

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

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO LINHA-POR-LINHA PARA AVALIAÇÃO DO MODELO
DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZA EM CHAMAS LAMINARES DIFUSIVAS
DE METANO

por

Aline Ziemniczak

Tese para obtenção do Título de
Doutora em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2018.

UTILIZAÇÃO DO MÉTODO-LINHA-POR-LINHA PARA AVALIAÇÃO DO
MODELO DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZA EM CHAMAS LAMINARES
DIFUSIVAS DE METANO

por

Aline Ziemniczak
Mestre em Engenharia Mecânica

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

Doutora em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Co-orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, PROMEC/UFRGS

Aprovada por:

Prof. Dr. Amir Antônio Martins de Oliveira Junior / UFSC

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva / URI-Campus Erechim

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 13 de Dezembro de 2018.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Leonardo e Elir, que, apesar de todas as dificuldades, me ajudaram a concluir mais essa etapa da minha vida.

A todos os meus amigos, familiares e dindos, Maria de Lurdes e Volmir, que entenderam a minha ausência, acompanharam a minha dedicação e torceram por mim.

Aos meus amigos e colegas de Laboratório de Radiação Térmica, Laboratório de Combustão e Geste, pelo incentivo e pelo apoio constante.

A todos os professores que fizeram parte da minha formação, especialmente aos professores Francis Henrique Ramos França e Fernando Marcelo Pereira, pela orientação, apoio e confiança.

Ao professor Luiz Alberto Oliveira Rocha e à professora Thamy Cristina Hayashi (projeto de pesquisa FABERGS-13/2105-2), por disponibilizarem computadores essenciais à conclusão deste trabalho.

A CAPES e à Petrobras pelo apoio financeiro.

Agradeço também ao meu namorado Ricardo que, de forma especial e carinhosa, me deu força e coragem, me apoiando nos momentos de dificuldade.

A todas as pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a realização desta pesquisa.

RESUMO

A transferência de calor por radiação é um problema bastante complexo de ser resolvido devido às altas temperaturas envolvidas, sobretudo em processos de combustão. O cálculo da transferência de calor por radiação envolve propriedades de absorção que variam com a temperatura, concentrações de espécies químicas participantes e o número de onda, sendo assim, faz-se necessária a utilização de modelos espectrais para obtenção de resultados confiáveis com um tempo computacional apropriado. Neste trabalho, a transferência de calor radiativa em uma chama laminar difusiva de metano, modelada como axissimétrica, para condições reais de operação, é analisada numericamente utilizando o software comercial *Ansys-Fluent*. A equação da transferência radiativa é resolvida espacialmente pelo método das ordenadas discretas (DOM). A modelagem do coeficiente de absorção do meio participante foi realizada através do método da integração linha por linha (LBL), o qual leva em conta cada número de onda disponível para o cálculo da radiação térmica, sua implementação é realizada por meio de rotinas de usuários (UDFs). Os cálculos foram realizados de forma desacoplada - radiação/dinâmica de fluidos computacional (CFD). Os resultados obtidos com o método LBL foram comparados com dados experimentais e com resultados obtidos através do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) com correlações baseadas em banco de dados atuais – HITEMP2010. Essa comparação foi realizada com o propósito de avaliar a exatidão dos resultados obtidos pelo modelo WSGG, uma vez que a solução LBL é considerada uma solução *benchmark*. Também foi realizada uma análise da resolução quanto à quantidade de números de onda necessárias para a solução LBL apresentar resultados satisfatórios e computacionalmente viáveis. Os resultados encontrados com o método LBL para o fluxo de calor radiativo concordaram de forma satisfatória com os resultados obtidos pelo modelo WSGG mostrando, que apesar da simplicidade o modelo WSGG é capaz de prever eficientemente a transferência de calor por radiação em problemas de combustão, da mesma forma que para com os dados experimentais.

Palavras-chave: Radiação Térmica; Combustão; Soma-ponderada-de-gases-cinzas; LBL.

ABSTRACT

The radiative heat transfer is a very complex problem to be solved, due to the high temperatures involved, especially in combustion processes. The calculation of radiative heat transfer involves absorption properties that vary with temperature, concentrations of participating chemical species and wavelength number, thus requiring the use spectral models to obtain reliable results with an appropriate computational time. In this work, the radiative heat transfer in a diffusive laminar flame of methane, modeled as axisymmetric, for real operation conditions is numerically analyze using the commercial software *Ansys-Fluent*. The radiative heat equation was solved spatially by the discrete ordinates method (DOM). The modeling of the absorption coefficient for participant medium was performed through the line by line integration method (LBL) that takes into account the absorption coefficient at each wavelength available to calculate the thermal radiation, its implementation is done through user-defined-functions (UDFs). The calculations were performed decoupled form – radiation/ computational fluid dynamics (CFD). The results obtained with the LBL method was compared to experimental data available and to the numerical solution obtained with the WSGG model with correlations based from current database – HITEMP2010. This comparison was made with the purpose of evaluating the accuracy of the results obtained by the WSGG model, since the LBL solution is considered a benchmark solution. An analysis was also performed on the resolution of the quantity of wave numbers required for the LBL solution has satisfactory and computationally viable results. The results obtained with the LBL method for the radiative heat flux satisfactorily agreed with the results obtained by the WSGG model showing that despite the simplicity of the model it is able to efficiently predict the transfer of heat by radiation in combustion problems, in the same way as for the experimental data.

Keywords: Thermal Radiation; Combustion, Weighted-Sum-of-Gray-Gases; Correlations; LBL.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Motivação	1
1.2	Revisão bibliográfica	2
1.3	Objetivos e contribuição do trabalho	14
1.4	Organização do Trabalho.....	15
2	MODELAGEM DE CHAMAS LAMINARES DIFUSIVAS	17
2.1	Equações de conservação	17
2.1.1	Equação da conservação da massa total	17
2.1.2	Equação de transporte da quantidade de movimento linear	18
2.1.3	Equação de conservação de massa das espécies químicas	18
2.1.4	Equação do transporte da energia	20
2.2	Modelagem da cinética química	21
2.3	Mecanismos de cinética química	23
2.3.1	Mecanismos detalhados	23
2.3.2	Mecanismos <i>Skeleton</i>	24
2.3.3	Mecanismos Globais.....	26
3	RADIAÇÃO TÉRMICA	27
3.1	Corpo negro	28
3.2	Intensidade da radiação térmica.....	29
3.3	Atenuação da intensidade devido à absorção do meio participante.....	30
3.4	Aumento da intensidade devido à emissão do meio participante	31
3.5	Emitância total	32
3.6	Equação do transporte radiativo	32
3.7	Coefficiente de absorção e as linhas espectrais	34
3.7.1	Alargamento natural	36
3.7.2	Alargamento Doppler	37
3.7.3	Alargamento <i>Stark</i>	37
3.7.4	Alargamento por Colisão	37
3.8	Espectros de seção transversal de absorção espectral.....	38

3.9	Banco de dados espectrais HITEMP	39
3.10	Geração dos espectros de absorção para a solução LBL	41
3.10.1	Dependência das pressões parciais na obtenção dos coeficientes de absorção baseados nas pressões parciais	41
3.10.2	Passo a passo para construção das <i>databases</i>	43
3.10.3	Artifício matemático para construção da <i>database</i>	44
3.11	Modelos espectrais.....	46
3.11.1	Integração Linha-por-Linha.....	49
3.11.2	Soma-Ponderada-de- Gases-Cinza - WSGG	49
3.11.3	Soma-ponderada-de-gases-cinzas da sobreposição parcial (NCR-WSGG)	52
3.12	Modelos espaciais para solução da Equação de Transferência Radiativa-RTE	54
3.12.1	Método das ordenas discretas – DOM.....	56
4	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	58
4.1	Caracterização do problema.....	58
4.1.1	Medidas experimentais	58
4.2	Diluição do combustível	60
4.3	Domínio computacional, Condições de contorno e Propriedades Físicas	61
5	SOLUÇÃO NUMÉRICA	64
5.1	Método dos volumes finitos.....	64
5.2	Acoplamento pressão velocidade e aproximações numéricas	65
5.3	Estudo de malha.....	67
5.4	Implementação do modelo WSGG no <i>Fluent</i>	68
5.5	Implementação da integração LBL no <i>Fluent</i>	70
5.5.1	Validação da UDF construída para a integração LBL.....	71
5.5.2	Ferramentas utilizadas para obtenção da solução LBL	75
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	77
6.1	Chamas diluídas com CO ₂	77
6.1.1	Diluição de 50% de CO ₂	77
6.1.2	Influência dos intervalos espectrais no fluxo de calor radiativo.....	84
6.1.1	Avaliação do termo fonte radiativo, para diluição de 50% de CO ₂	86
6.1.2	Outras diluições de CO ₂ : 40%, 20% e 10%	87
6.2	Chamas diluídas com N ₂	90

6.2.1	Diluição de 50% de N ₂	90
6.2.2	Influência dos intervalos espectrais no fluxo de calor radiativo para diluição de N ₂ ...	95
6.2.3	Avaliação do termo fonte radiativo, para diluição de 50% de N ₂	96
6.2.4	Outras diluições de N ₂ : 40%, 20% e 10%	97
6.3	Cálculo da fração radiante X_r para as chamas diluídas de CO ₂ e N ₂	100
6.4	Avaliação da discretização das <i>databases</i> na solução de um problema 1D	102
6.4.1	Avaliação da independência das <i>databases</i> para a solução LBL 2D x 1D.....	110
7	CONCLUSÕES.....	113
7.1	Trabalhos Futuros	115
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	116
	APÊNDICE A Estudo da Redução das <i>databases</i>	129
	APÊNDICE B Estudo do GCI	132

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Espectro da radiação eletromagnética [Incropera e De Witt, 2008].	27
Figura 3.2	Corpo negro envolvido por um detector hemisférico [Brittes, 2011].	28
Figura 3.3	Geometria para emissão de radiação de uma área diferencial dA [adaptado de Siegel e Howell, 2002].	30
Figura 3.4	Intensidade de radiação ao longo do meio participante de espessura dS [adaptado de Howell et al., 2011].	31
Figura 3.5	Espectro do coeficiente de absorção para CO_2 , $T=1500\text{K}$ e $p_{\text{co}_2}=1$ atm.	34
Figura 3.6	Forma de linha pra diversos tipos de alargamento [Modest, 1993].	36
Figura 3.7	Espectro da seção transversal do coeficiente de absorção para: (a) CO_2 , (b) H_2O para temperatura de 1000K e pressão parcial de $0,1$ atm.	40
Figura 3.8	Coefficiente de absorção baseado na pressão de H_2O para pressões parciais de $0,1$ atm e $0,4$ atm.	42
Figura 3.9	Coefficiente de absorção baseado na pressão de CO_2 para pressões parciais $0,05$ atm e $0,2$ atm.	43
Figura 3.10	Espectro da seção transversal do coeficiente de absorção para CO_2 para temperatura de 1100K e pressão parcial de $0,1$ atm, para $\text{NP}=150000$ e $\text{NP}=30000$	45
Figura 3.11	Representação de um meio participante composto por três gases cinzas para o modelo WSGG [adaptado de Maurente et al., 2008].	50
Figura 3.12	Sistema de coordenadas angulares [Ansys, 2011b]	57
Figura 4.1	Vista em corte do queimador Santoro adaptado [Machado, 2015].	59
Figura 4.2	Esquema construtivo da bancada experimental [Machado, 2015].	60
Figura 4.3	Domínio geométrico empregado nas simulações [adaptada de Rodrigues, 2016].	63
Figura 5.1	Local de escolha da ignição da chama.	66
Figura 5.2	Refino na região próxima à saída de combustível [Rodrigues, 2016].	67
Figura 5.3	Fluxograma da implementação do modelo WSGG [Rodrigues, 2016].	69
Figura 5.4	Perfis de temperaturas referentes.	73
Figura 5.5	Termo fonte radiativo para os perfis de temperatura: (a) Equação 5.5, (b) Equação 5.6, (c) Equação 5.7 e (d) Equação 5.8.	74

Figura 6.1	(a) Perfil de temperatura; (b) Perfil de CO ₂ com diluição de 50% e (c) Perfil de H ₂ O com diluição de 50%.	78
Figura 6.2	Perfis de fração molar ao longo do domínio para linhas axiais: (a)CO ₂ e (b)H ₂ O, para a diluição de 50% de CO ₂ .	79
Figura 6.3	Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de CO ₂ em comparação com WSGG.	81
Figura 6.4	Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de CO ₂ : (a) comparação com WSGG, (b) comparação com medições.	82
Figura 6.5	Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de CO ₂ entre solução LBL e abordagens distintas do WSGG.	83
Figura 6.6	Representação da porcentagem para cada intervalo do espectro para chama com diluição de 50% de CO ₂ e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.	85
Figura 6.7	Termo fonte de calor radiativo para diluição de 50% de CO ₂ .	86
Figura 6.8	Fluxo calor radiativo para diluição de CO ₂ : (a) 40% (b) 20% e (c) 10%.	88
Figura 6.9	(a) Perfil de temperatura; (b) Perfil de CO ₂ com diluição de 50% e (c) Perfil de H ₂ O com diluição de 50%.	91
Figura 6.10	Perfis de fração molar ao longo do domínio para linhas axiais: (a)CO ₂ e (b)H ₂ O, para a diluição de 50% de N ₂ .	91
Figura 6.11	Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de N ₂ em comparação com WSGG.	92
Figura 6.12	Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de N ₂ em comparação com medições	93
Figura 6.13	Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de N ₂ entre solução LBL e abordagens distintas do WSGG.	94
Figura 6.14	Representação da porcentagem para cada intervalo do espectro para chama com diluição de 50% de N ₂ e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.	96
Figura 6.15	Termo fonte de calor radiativo para diluição de 50% de N ₂ .	97
Figura 6.16	Fluxo calor radiativo para diluição de N ₂ : (a) 40% (b) 20% e (c) 10%.	99
Figura 6.17	Fração radiante em função do percentual de diluição para as chamas diluídas com (a) CO ₂ e (b) N ₂ .	101
Figura 6.18	Representação da geometria utilizada [adaptada de Dorigon, 2012].	102

Figura 6.19	Fluxo de calor radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.	105
Figura 6.20	Termo fonte radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.	106
Figura 6.21	Fluxo de calor radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.	109
Figura 6.22	Termo fonte radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.	110
Figura 6.23	Desvio médio em relação ao NP das <i>databases</i> .	111
Figura A.1	Fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo com $NP_{\text{reduzido}} = 20$ para duas abordagens de redução: para perfis de temperatura (a) simétrico, (b) dupla simetria e (c) assimétrico.	130
Figura A.2	(a) Fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo com $NP_{\text{reduzido}} = 30000$ para duas abordagens de redução: para perfis de temperatura (a) simétrico, (b) dupla simetria e (c) assimétrico.	131

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Comparação entre HITEMP e HITRAN [Rothman et al., 2010].	40
Tabela 3.2	Nomenclatura utilizada pelo banco de dados HITEMP.	40
Tabela 3.3	Configuração da <i>database</i> gerada.	44
Tabela 3.4	Coeficientes para o modelo WSGG com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$ [Dorigon et al., 2013].	51
Tabela 3.5	Coeficientes para o modelo WSGG com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$ [Dorigon et al., 2013].	52
Tabela 3.6	Coeficientes para o modelo WSGG com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,5$ [Ceteno et al., 2018].	52
Tabela 4.1	Parâmetros das chamas estudadas [adaptada de Machado, 2015].	63
Tabela 5.1	Razão média das concentrações das espécies no domínio e correlações utilizadas.	69
Tabela 5.2	Desvio máximo e médio em relação à solução LBL-Fortran para o termo fonte radiativo, para os perfis de temperaturas mostrados.	75
Tabela 5.3	Discretizações das <i>databases</i> .	76
Tabela 6.1	Desvio máximo e médio de acordo com a discretização do LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções para diluição de 50% de CO ₂ .	83
Tabela 6.2	Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de CO ₂ e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.	84
Tabela 6.3	Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de CO ₂ e $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$.	85
Tabela 6.4	Desvio máximo e médio em relação ao LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções.	89
Tabela 6.5	Desvio máximo e médio em relação ao WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.	89
Tabela 6.6	Desvio máximo e médio em relação ao método NCR-WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.	89
Tabela 6.7	Desvio máximo e médio de acordo com a discretização do LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções para diluição de 50% de N ₂ .	94

Tabela 6.8	Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de N ₂ e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$	95
Tabela 6.9	Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de N ₂ e $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$	96
Tabela 6.10	Desvio máximo e médio de acordo com a discretização do LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções.	100
Tabela 6.11	Desvio máximo e médio em relação ao WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.	100
Tabela 6.12	Desvio máximo e médio em relação ao NCR-WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.	100
Tabela 6.13	Fração radiante para diluição de CO ₂	101
Tabela 6.14	Fração radiante para diluição de N ₂	101
Tabela 6.15	Discretizações das <i>databases</i> utilizadas no Fortran.	103
Tabela 6.16	Desvio máximo e médio em relação a discretização do LBL para fluxo e termo fonte para o Perfil simétrico Equação 5.6.	107
Tabela 6.17	Desvio máximo e médio em relação a discretização do LBL para fluxo e termo fonte para o Perfil duplo simétrico Equação 5.7.	107
Tabela 6.18	Desvio máximo e médio em relação a discretização do LBL para fluxo e termo fonte para o Perfil assimétrico Equação 5.8.	108
Tabela 6.19	Desvio médio em relação ao NP=30000 das soluções LBL para fluxo.	112
Tabela B.1	Valores numéricos para a temperatura e concentrações das espécies participantes para as três malhas adotadas.	134
Tabela B.2	Valores calculados para o GCI e χ para a temperatura e para as concentrações das espécies participantes.	134
Tabela B.3	Valores numéricos para o fluxo de calor radiativo para os três níveis de discretização angular.	135
Tabela B.4	Valores calculados para o GCI e para χ o fluxo de calor radiativo.	135

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ALB	Função distribuição das linhas de absorção do corpo negro
CFD	Dinâmica de fluidos computacional
CW	Modelo do número de onda cumulativo
DOM	Método das ordenadas discretas - <i>discrete ordinates method</i>
DTRM	Método de transferência discreta de radiação - <i>discrete transfer radiation model</i>).
FGM	<i>Flamelet-Generated Manifold</i>
FSCK	Modelo do k -correlacionado baseado em todo o espectro
FSNB-CK	<i>fitted statistical narrow-band correlated-k</i>
GCI	Índice de convergência de malha - <i>Grid Convergence Index</i>
GG	Modelo gás cinza
HITEMP	Banco de dados espectrais calculado à temperatura de 1000 K
HITRAN	Banco de dados espectrais calculado à temperatura ambiente
IEA	Agência Internacional de Energia - <i>International Energy Agency</i>
ISAT	<i>In-situ adaptative tabulation</i>
LBL	Linha-por-Linha
MDA	Aproximação diferencial modificada
MVF	Método de volumes finitos
OTA	Modelo meio oticamente fino
PCI	Poder Calorífico Inferior
PDF	Função densidade de probabilidade
POX	Chama com oxidação parcial
RTE	Equação da transferência de calor radiativa – <i>radiative transfer equation</i>
SIMPLE	<i>Semi-implicit method for pressure linked equations</i>
SNB	Modelo estatístico de banda estreita
SNBCK	Modelo do k -correlacionado baseado no modelo SNB
SLW	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado em linhas espectrais
UDF	Rotinas de usuário - <i>user-defined-functions</i>
WMPS	Modelo de múltiplas fontes pontuais - <i>weighted multi-point source model</i>
WSGG	Modelo da soma-ponderada-dos-gases-cinzas

LISTA DE SÍMBOLOS

a_i	Fator de ponderação correspondente ao i -ésimo gás cinza
a_0	Fator de ponderação correspondente à janela transparente
A	Área, m^2 ; Fator pré-exponencial
$b_{i,j}$	Coefficientes polinominais do modelo WSGG
C_1	Primeira constante de Planck, $0,5955 \times 10^8 \text{ W} \cdot \mu\text{m}^4/\text{m}^2$
C_2	Segunda constante de Planck, $1,4387 \times 10^4 \mu\text{m} \cdot \text{K}$
c_p	Calor específico, $\text{J}/\text{kg K}$
$C\eta$	Seção transversal de absorção, $\text{cm}^2/\text{molécula}$
D	Diâmetro dos átomos ou moléculas, m
$D_{i,M}$	Coefficiente médio de difusão mássica da espécie i na mistura
$D_{i,j}$	Coefficiente de difusão binária da espécie i em relação a espécie j .
E_b	Poder emissivo total do corpo negro, W/m^2
$E_{\eta,b}$	Poder emissivo espectral do corpo negro, $\text{W}/\text{m}^2\text{sr}$
E	Erro relativo
E_i	Energia de ativação no nível mais baixo, cm^{-1}
E_F	Erro fracional
E_a	Energia de ativação
F_s	Fator de segurança para cálculo do GCI
f_1, f_2, f_3	Valores obtidos com a solução numérica para cada malha
g	Vetor de forças de campo, N
h	Entalpia específica da mistura, kJ/kg
$h_{i,f}^0$	Entalpia de formação, kJ/kg
\hat{I}	Tensor de identidade
I_b	Intensidade radiativa do corpo negro, W/m^2
I_η	Intensidade radiativa espectral no número de onda, W/m^2
$I_{\eta,b}$	Intensidade radiativa espectral do corpo negro, $\text{W}/\text{m}^2 \text{sr}$
$I_{\eta,e}$	Intensidade radiativa espectral emitida, W/m^2
I_λ	Intensidade radiante espectral no comprimento de onda, W/m^2

\vec{j}_i	Vetor de difusão mássica, kg/m ² s
\vec{j}_q	Vetor fluxo de calor, W/m ²
\vec{j}_i^T	Fluxo de difusão mássica devido aos gradientes de temperatura (efeito Soret), kg/m ² s
\vec{j}_i^P	Fluxo de difusão mássica devido aos gradientes de pressão, kg/m ² s
\vec{j}_i^d	Fluxo de difusão mássica devido aos gradientes de concentração das espécies, kg/m ² s
k	Coefficiente da taxa de reação
K_c	Constante de equilíbrio
\dot{m}	Vazão de combustível, kg/s
\mathcal{M}_i	Formula molecular da espécie i
MW	Massa molecular da mistura
n_b	Número de gases
N_s	Número de espécies químicas
N_r	Número de reações químicas
N	Densidade molar ou número de <i>Loschmidt</i> , moléculas/m ³
N_A	Numero de Avogrado, 6,022 x 10 ²³ moléculas/mol
NC	Faixa de dados em torno de η
NP	Número de pontos usados para obtenção dos espectros
P, p	Pressão, atm
p_i	Pressão parcial, atm
p	Taxa de convergência GCI
pS	Produto da pressão pelo caminho, atm m
p_0	Pressão de referência
q_R''	Fluxo de calor radiativo, kW/m ²
\dot{q}_R	Termo fonte de calor radiativo, kW/m ³
Q	Soma das funções de partição
r	Razão de refinamento de malha
R	Raio do tubo injetor, m
Re	Reynolds
Ru	Constante universal dos gases ideias, 8,314 J/mol k

S_i	Intensidade da linha, $\text{cm}^{-1}/(\text{molécula} \cdot \text{cm}^{-2})$
t	Tempo, s
T	Temperatura, K
T_{ref}	Temperatura no estado termodinâmico de referência, K
x	Intervalo de valores na <i>database</i> Distância entre as placas planas
v	Velocidade do escoamento, m/s
$v_{combustivel}$	Velocidade do combustível, m/s
\vec{v}_i	Velocidade de difusão da espécie i
Y	Fração molar, adimensional
X_i	Fração mássica da i -ésima espécie, adimensional
X_r	Fração radiante, adimensional
$\nu_{i,j}$	Coefficientes estequiométricos

Símbolos Gregos

α_η	Absortância espectral
β	Expoente da temperatura, adimensional.
Δy	Diferença entre as posições de medida do fluxo radiativo, m
γ_i	Meia largura de linha espectral i , m
γ_n	Meia largura para alargamento natural, m
γ_D	Meia largura para alargamento Doppler, m
γ_C	Meia largura para alargamento por colisão, m
γ_{self}	Meia largura devido ao alargamento da própria molécula, m
γ_{arf}	Meia largura devido ao alargamento ao ar, m
ε	Emissividade, adimensional; Emitância, adimensional
ε_η	Emitância espectral, adimensional
η	Número de onda, m^{-1}
θ	Número de direções
κ	Coefficiente de absorção, m^{-1}
κ_M	Coefficiente de absorção para a mistura, m^{-1}
κ_η	Coefficiente de absorção espectral, m^{-1}
κ_p	Coefficiente de absorção dependente da pressão, atm m^{-1}
$\kappa_{p,\eta}$	Coefficiente de absorção espectral dependente da pressão, atm m^{-1}

λ	Comprimento de onda, m
	Condutividade térmica da mistura gasosa, W/m K
μ	Viscosidade dinâmica, N s /m ²
σ	Coeficiente de Stefan-Boltzmann, $5,67 \times 10^{-8}$ W/(m ² K ⁴); Coeficiente de espalhamento, m ⁻¹
$\hat{\tau}$	Tensor tensão, N/m ²
v_i	Diferença de energia entre o estado inicial e final
ρ	Massa específica, kg/ m ³
χ	Convergência da solução da faixa assintótica
ω	Ângulo sólido, sr
ω_i	Produção ou consumo da espécie química, W/m ³

Subíndices

<i>abs</i>	Absorção
<i>b</i>	Condição para o corpo negro
<i>CO₂</i>	Dióxido de carbono
<i>e</i>	Condição de emissão
<i>f</i>	Sentido direto
<i>H₂O</i>	Vapor de água
<i>i</i>	Condição para incidindo Espécie da molécula
<i>loc</i>	Estado local
<i>mol</i>	Molécula
<i>M</i>	Condição de mistura
<i>p</i>	Valor obtido em função da pressão
<i>r</i>	Sentido reverso
<i>reduzido</i>	Condição em termos reduzidos
<i>total</i>	Condição em termos totais
η	Dependência espectral com relação ao número de onda
λ	Dependência espectral com relação ao comprimento de onda

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

A maior parte da energia consumida mundialmente é proveniente de processos de combustão, sejam eles utilizados para geração de energia consumida em transportes (automóveis, trens, aviões, etc.), ou na produção de energia elétrica e/ou térmica. A combustão está presente em equipamentos, processos industriais e domésticos como fogões residenciais, aquecedores de água, turbinas a gás, motores de combustão interna, caldeiras geradoras de vapor, fornos industriais, sistemas de *flaring* em refinarias e plataformas de petróleo, entre outros. A chama nesses equipamentos geralmente está confinada em uma câmara de combustão e/ou estabilizada em um queimador.

De acordo com estatísticas de produção mundial de energia da Agência Internacional de Energia (IEA- *International Energy Agency*), apesar do desenvolvimento de fontes alternativas, a produção de energia a partir da combustão ainda deverá prevalecer ao longo das próximas décadas. Logo, um aumento na eficiência destes processos, mesmo para razões modestas, da ordem de 1% a 2%, pode superar a contribuição de outras fontes de energia na matriz energética mundial.

O aumento na eficiência energética de processos envolvendo a combustão e a geração de energia térmica se dá a partir da compreensão dos fenômenos físicos e do desenvolvimento de modelos matemáticos que viabilizam/facilitam a solução desses processos. Entre esses vários processos envolvidos na combustão está a transferência de calor por radiação, principal tópico de interesse de estudo da presente pesquisa.

Devido às altas temperaturas envolvidas e à formação de gases participantes, a transferência de calor por radiação é geralmente o modo de transferência de calor dominante em processos de combustão. No entanto, a solução exata de problemas de combustão é uma tarefa que depende de várias outras áreas de conhecimento, como tratamento da mecânica do escoamento, seja ele laminar ou turbulento, processos de reações químicas de combustão, convecção, difusão. Assim, a modelagem adequada da transferência de calor por radiação é fundamental para a otimização de projetos e operação de sistemas de combustão. Para tal,

ferramentas numéricas de modelagem capazes de prever as características deste processo assumem um papel estratégico.

O cálculo da radiação térmica, por si só, envolve um fenômeno bastante complexo, com muitos fatores intervenientes. Um deles é o tratamento espectral do coeficiente de absorção-emissão, o qual apresenta grande dependência em relação ao número de onda, temperatura e composição dos gases. Outro fator que dificulta os cálculos é a não homogeneidade nas distribuições de temperatura e concentração das espécies químicas, as quais afetam fortemente o coeficiente de absorção espectral das espécies envolvidas. Várias metodologias vêm sendo propostas ao longo dos anos a fim de solucionar esses problemas.

Uma dessas metodologias consiste no uso do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG: *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) para solução das propriedades espectrais. Outro avanço na solução de problemas multi-fenomenológicos é a utilização de códigos computacionais comerciais de CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Porém, para o cálculo da radiação, os modelos nesses softwares, meio cinza ou a soma-ponderada-de-gases-cinza são, muitas vezes, incapazes de levar em conta aspectos encontrados nos processos de combustão reais, como é o caso da variação nas concentrações das espécies químicas. Portanto, ferramentas com o objetivo de contornar essas limitações veem sendo desenvolvidas, como é o caso da implementação de rotinas de usuário (UDFs: *user-defined functions*) nos códigos comerciais. UDFs são rotinas acopladas ao código CFD que permitem modificar modelos, tratamentos de variáveis, condições de contorno, propriedades de materiais, entre outros.

Assim, o presente estudo prevê uma análise numérica em CFD envolvendo a solução da combustão, radiação térmica e cinética química em chamas livres. O principal objetivo do trabalho é a análise numérica de modelos espectrais para a solução da radiação térmica. A motivação crucial se dá pela necessidade de melhor compreensão, aplicação e aprimoramento destes modelos espectrais.

1.2 Revisão bibliográfica

Na sequência, serão apresentados alguns trabalhos relacionados à modelagem da radiação térmica em processos de combustão encontrados na literatura, tanto para chamas laminares unidimensionais quanto para chamas multidimensionais laminares ou turbulentas.

Além disso, serão apresentados estudos com foco na comparação e desenvolvimento de modelos espectrais, não necessariamente com aplicação direta na modelagem da combustão.

Ao longo do texto, outras citações relevantes serão apresentadas à medida que os métodos utilizados no trabalho forem descritos, tais como modelos utilizados para solução da cinética química, modelagem do coeficiente de absorção e modelagem da equação da transferência radiativa (RTE: *Radiative Transfer Equation*).

Trabalhos envolvendo combustão, incluindo análise da radiação térmica utilizando modelos espectrais mais simples como o modelo de gás cinza (GG: *Gray Gas*); o modelo da soma ponderada de gases cinza (WSGG); além da simplificação de meio opticamente fino (OTA) são apresentados. Outros trabalhos abrangendo o estudo com modelos mais sofisticados como o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado em linhas espectrais (SLW: *Spectral line based weighted-sum-of-gray-gases model*); o modelo estatístico de banda estreita (SNB: *Statistical Narrow Band*); e o modelo do número de onda cumulativo (CW: *Cumulative wavenumber*), também são apresentados.

As propriedades da radiação podem ser determinadas pela aproximação para meios opticamente finos (OTA: *Optically Thin Approximation*), como no caso do trabalho apresentado por Colomer et al., 2004, o qual analisou o fenômeno de radiação e convecção natural em CFD em uma cavidade tridimensional aquecida para um meio transparente e participante. O método das ordenadas discretas (DOM: *Discrete Ordinates Method*) foi empregado no cálculo da RTE. Os números de Rayleigh e Planck foram analisados para determinar o fluxo de calor e espessuras óticas. Os autores concluíram que para Reynolds maiores que 0,5 os efeitos de radiação podem ser negligenciados para pequenas espessuras óticas e para Reynolds menores que 0,01 a radiação é dominante.

Muitos trabalhos publicados na literatura tratam a radiação térmica com o modelo de gás cinza (GG) onde o coeficiente de absorção é considerado independente do número de onda. Tal como em Zhang et al., 1998, que estudaram a produção de fuligem em uma câmara de combustão cilíndrica, onde a radiação térmica foi calculada com o modelo do gás cinza pelo método das ordenadas discretas (DOM) para a solução da equação de transporte radiativa. Barve et al., 2007 modelaram chamas laminares considerando gás cinza no cálculo da radiação térmica de forma semelhante.

Nessa mesma linha de trabalho Saji et al., 2008, investigaram numérica e experimentalmente chamas laminares difusivas de etileno e ar, utilizando um mecanismo de cinética de dezesseis passos incluindo o efeito da fuligem sobre a radiação térmica. O

coeficiente de absorção da mistura gasosa e da fuligem foi resolvido pelo GG. O método de volumes finitos foi utilizado na solução das equações de Navier-Stokes para coordenadas cilíndricas axissimétricas. Os resultados obtidos apresentaram concordância razoável entre dados numéricos e experimentais para comparação da altura de chama e distribuição de temperatura.

O modelo de gás cinza também foi utilizado na modelagem da radiação térmica por Ma et al., 2009, que simularam a queima de biomassa usando o software *Ansys-Fluent*.

Vários trabalhos encontrados na literatura utilizam modelos menos simplificados que o modelo de gás cinza. Como é o caso do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG), que considera, em sua forma clássica, o coeficiente de absorção para um número finito de gases cinza constante e um fator de ponderação descrito por uma função polinomial em função temperatura. Além disso, a aplicação do método em códigos computacionais independe de qualquer conhecimento a respeito dos bancos espectrais, outro atrativo para a escolha do método WSGG. Aplicações do modelo em problemas envolvendo oxi-combustão: [Johansson et al., 2010; Bécher et al., 2012; Rajhi et al., 2014; Garten et al., 2015], em problemas bidimensionais [Silva et al., 2007; Centeno et al., 2013; Crnomarkovic et al., 2013; Centeno et al.; 2014; Garten et al., 2015; Silva et al., 2018], problemas tridimensionais [Trivic, 2014; Bhuiyan e Naser, 2015; Zhang et al., 2015] além de problemas envolvendo a modelagem da interação radiação turbulência (TRI) [Krishnamoorthy, 2010; Coelho, 2012; Centeno et al., 2016].

O modelo WSGG foi utilizado também por Nieckele et al., 2001. Os autores realizaram uma análise numérica do processo de combustão em uma câmara cilíndrica, através do software *Ansys-Fluent*. A solução espacial da RTE foi resolvida com o método de transferência discreta de radiação (DTRM: *Discrete Transfer Radiation Method*), com um mecanismo de reação química simplificado de dois passos para oxidação do metano. A solução numérica foi comparada com dados experimentais e apresentou uma concordância razoável.

Nessa mesma linha, Lammers e de Goey, 2004, estudaram a influência da radiação térmica na temperatura, em chamas pré-misturadas de metano, unidimensionais e bidimensionais. O modelo DTRM, também, foi empregado na solução espacial da RTE junto com o modelo WSGG para solução espectral da radiação. As simulações foram realizadas em um código comercial CFX empregando técnica *Flamelet-Generated Manifold* (FGM) para a solução da cinética.

Prieler et al., 2014, realizaram uma análise em CFD para uma câmara de combustão em escala de laboratório de 11,5kW para a condição de oxi- combustão em processos com altas temperaturas. O modelo *Steady Laminar Flamelet* (SFM) associado a um mecanismo de cinética detalhado foi o escolhido. Os métodos P1(método dos harmônicos esféricos) e DOM foram empregados na solução da RTE e, o modelo WSGG foi utilizado na solução das propriedades espectrais do gás de combustível utilizando as correlações de Smith, 1982, para H₂O e CO₂. Os casos estudados com o modelo P1 superestimaram a radiação, o que acarreta em temperaturas mais baixas nos gases. O modelo DOM gerou os valores de temperaturas mais perto do esperado.

Variações na modelagem do modelo WSGG foram aplicadas por Zhang et al., 2015, em simulações CFD ANSYS-*Fluent*. Foi estudado o processo de oxi-combustão de carvão em um forno de grande escala. Diferentes abordagens na solução do problema para o modelo WSGG foram empregadas: WSGG com correlações de Smith's; WSGG com distribuição uniforme da energia radiativa em cada banda cinza; e WSGG no qual a energia radiativa é distribuída utilizando fatores de ponderação. O método das ordenadas discretas para solução da RTE e um mecanismo global de dois passos para a cinética química foram empregados nas simulações. Os autores não recomendam a utilização do WSGG com correlações do Smith, pois este não apresentou resultados satisfatórios, principalmente para a temperatura dos gases e para o fluxo de calor nas paredes.

Trabalhos que investigam o efeito da diluição em processos de combustão também são encontrados na literatura como em Fuentes et al., 2013, que investigaram numérica e experimentalmente os efeitos da adição de oxigênio no oxidante em chamas laminares difusivas de etileno: a altura de chama, características do ponto de fumaça, produção de fuligem e perdas radiativas foram os fatores estudados pelos autores. Os efeitos da diluição do combustível, da velocidade de entrada e da gravidade na forma e estrutura de uma chama laminar difusiva de metano/ar também foram investigados numericamente e experimentalmente por Cao et al., 2015. Os resultados experimentais e computacionais apresentaram boa concordância entre si. Machado, 2015, realizou um estudo experimental dos efeitos na radiação para uma série de chamas laminares em escala de laboratório para diferentes porcentagens de diluição de CO₂ e H₂O.

Modelos mais sofisticados como o SLW, SNB, FSCK (*Full Spectrum Correlated-k*), CW, entre outros, também veem sendo bastante empregados na literatura para o cálculo da

transferência de calor por radiação térmica em problemas envolvendo combustão, bem como em estudos de comparação de modelos espectrais.

Colomer et al., 2007, utilizaram o método das ordenadas discretas para a solução da RTE em cavidades bidimensionais com gases participantes- CO_2 e H_2O - considerando convecção/condução. Quatro tratamentos para radiação foram investigados: meio transparente; meio cinza; e duas abordagens para diferentes coeficientes do modelo SLW para propriedades não cinzas da radiação em meios participantes. O trabalho teve como objetivo otimizar os parâmetros do modelo SLW. Em todos os casos testados pelos autores, os resultados indicam que para pequenas cavidades a escolha do método de cálculo de radiação não tem impacto no resultado final. Para grandes cavidades a condução de calor, de forma geral, pode ser negligenciada na transferência de calor.

Mossi et al., 2010, utilizaram um código de volumes finitos para simular uma chama laminar difusiva de metano e ar, considerando cinética química detalhada e formação de fuligem. A equação da transferência de calor radiativa (RTE) foi calculada através do método de ordenadas discretas. A modelagem espectral foi tratada com os modelos GG e o modelo da soma ponderada de gases cinza baseado em linhas espectrais (SLW). O objetivo do trabalho era comparar os resultados dos perfis de temperatura, concentração de espécies químicas, e fuligem entre os dois modelos. O modelo SLW levou quase o dobro do tempo computacional nas simulações para resolver o problema.

Garten et al., 2015, realizaram um estudo numérico para uma chama laminar de metano bidimensional com oxidação parcial (POX), investigando diferentes abordagens para a solução da radiação. Os métodos das ordenadas discretas, aproximação diferencial modificada (MDA: *Modified Differential Approximation*), e harmônicas esféricas- P1 foram utilizados para a solução da RTE. A avaliação das propriedades radiativas foi feita para a aproximação de meio opticamente fino (OTA), utilizando os modelos SLW, WSGG e de gás cinza. As simulações foram realizadas utilizando o software *openFOAM* com um mecanismo de 28 espécies e 112 reações químicas no cálculo da cinética química. O método OTA não foi capaz de reproduzir bons resultados. Os métodos MDA e P1 combinados com os modelos SLW e WSGG mostraram bons resultados para os perfis de temperatura da chama. Os autores concluíram que tanto o modelo SLW e o WSGG são eficientes para solução de chamas, uma vez que melhoras apenas moderadas foram obtidas com o modelo SLW em comparação com o WSGG.

Kang e Yoo, 2017, propuseram uma nova abordagem do modelo WSGG baseado em bandas estreitas (RG-NBW). A fim de se verificar a abordagem proposta, vários casos utilizando uma geometria 3d foram testados: casos isotérmicos, não homogêneos, com diferentes composições de meios participantes. A RTE foi resolvida utilizando o modelo DOM. Várias abordagens de WSGG foram utilizadas para comparação com a nova proposta. O modelo SNB foi adotado como solução *benchmark*. Para todos os casos testados o modelo modificado RG-NBW apresentou boa concordância com o *benchmark*, assim como com os outros modelos testados, com exceção do WSGG com coeficientes do Smith, 1982, que superestima os valores do termo fonte radiativos e subestima os valores de fluxo de calor radiativo. Além disso, o modelo RG-NBW modificado requer um menor custo computacional, com exceção para o modelo WSGG clássico. Assim, os autores recomendam o uso da nova abordagem em problemas multidimensionais.

Além de estudos envolvendo problemas multidimensionais, a transferência de calor em chamas unidimensionais ainda vem sendo amplamente estudada. Esses estudos acabam sendo computacionalmente mais viáveis e, assim, podem, entre outras vantagens, auxiliar na compreensão de características de chamas multidimensionais.

Soufiani e Djavdan, 1994, implementaram o modelo WSGG e SNB no cálculo da RTE pra um caso unidimensional e para um caldeira axissimétrica com combustão de metano. Nesse estudo o modelo SNB foi considerado a solução *benchmark*. Ambos os modelos foram gerados a partir de cálculos de emitâncias para uma faixa de 330-2500K e uma razão de pressão parcial $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$. Para as condições onde os gradientes de temperatura eram significantes, o modelo WSGG apresentou erros importantes. Já para condições com temperatura baixas os erros foram baixos em comparação com o SNB.

Ruan et al., 2001, estudaram os efeitos combinados da radiação e variação da pressão em meios não cinza sobre os limites de propagação e inflamabilidade de chamas unidimensionais pré-misturadas de metano diluídas com CO₂ no oxidante. O modelo SNB e o OTA foram usados no cálculo da transferência de calor por radiação juntamente com um mecanismo detalhado de cinética química Grimech 3.0 [Kee et al., 1986] e transporte de propriedades. O método das ordenadas discretas foi usado na solução da RTE. Os efeitos da radiação obtidos com o modelo SNB tornaram-se maiores à medida que a razão de diluição de CO₂ aumentou. O modelo OTA não se mostrou eficiente para valores altos de diluição de CO₂ e baixas razões de equivalência.

Chen et al., 2007, estudaram, experimentalmente e numericamente os efeitos da absorção espectral da radiação sobre a velocidade de chamas à pressões normais e elevadas (maiores de 5 atm) em chamas unidimensionais laminares de metano diluídas com CO₂. O modelo SNB foi comparado com o modelo FSNB-CK (*Fitted Statistical Narrow-Band Correlated-k*), desenvolvido e validado no artigo, para prever a radiação em geometrias esféricas. O modelo de cinética química implementado foi o GRI_{mech} 3.0 e o esquema de diferenças central foi utilizado para o cálculo da RTE. A comparação entre os resultados experimentais e numéricos apresentou boa concordância. O modelo FSNB-CK foi comparado com o modelo SNB. O modelo SNB superestimou a absorção da radiação. Os autores disponibilizaram o programa desenvolvido para *download* gratuito em seu site.

Os modelos de propriedades radiativas, GG, modelo do *k*-correlacionado baseado no modelo SNB (SNBCK), WSGG, modelo do *k*-correlacionado baseado em todo o espectro (FSCK) e SLW foram avaliados por Demarco et al., 2011, e comparados com soluções de referências obtidas com o modelo SNB em configurações unidimensionais (meio homogêneo e isotérmico e meio não-homogêneo e não-isotérmico) e bidimensional axissimétrica (meio homogêneo não-isotérmico), contendo misturas de vapor de água, dióxido de carbono e fuligem. Os resultados mostraram que o modelo WSGG forneceu melhores resultados que o modelo GG, conduzindo a discrepância somente para altas concentrações de fuligem, neste trabalho o modelo SNBCK foi recomendado para soluções que necessitem alto grau de precisão, mesmo exigindo um elevado tempo computacional. Os modelos FSCK e SLW foram os que forneceram, em geral, o melhor balanço entre precisão dos resultados e exigência computacional.

Um estudo recente feito por Sun e Zhang, 2018, investigou a contribuição de diferentes gases cinza no modelo SLW com o método dos volumes finitos utilizando o modelo P1. O objetivo do estudo é aperfeiçoar a seleção dos gases cinza mais relevantes para o SLW além da construção de um método híbrido com o método dos volumes finitos e P1, onde os gases com maior contribuição seriam tratados pelo P1 e os demais pelo método dos volumes finitos, acarretando numa redução considerável do tempo computacional envolvido. O método de Monte Carlo é usado como solução de referência de cada gás cinza para uma geometria unidimensional. Foram considerados 10 gases para o SLW. Os resultados mostraram que diferentes gases cinza têm contribuições completamente diferentes e os métodos individualmente geram precisões diferentes. Os gases com coeficientes de absorção

com valores médios (5 e 6 no trabalho), foram os responsáveis pela maior parcela do fluxo de calor e do termo fonte.

A transição entre o escoamento laminar e turbulento também é de interesse para alguns pesquisadores como é o caso de Abdul-Sater e Krishnamoorthy, 2013, que estudaram essa configuração de escoamento em transição, para chamas difusivas de oxi-metano em aproximações bidimensionais e axissimétricas em escala de laboratório. O software *Ansys-Fluent* foi empregado na solução do problema. Modelos cinza e não cinzas (WSGG) foram empregados para a solução espectral da radiação. A implementação das metodologias foi realizada por meio de rotinas de usuário (UDF). A RTE foi modelada pelo método das ordenadas discretas e a transição do escoamento laminar para turbulento foi modelada pelo modelo $k-\varepsilon$ sendo que a cinética química foi modelada por meio de uma função densidade de probabilidade (PDF: *Probability Density Function*). A fração radiante foi determinada a partir dos fluxos incidentes radiativos ao longo das paredes da fornalha, a qual foi comparada com dados experimentais. Os dados experimentais de comparação foram obtidos com os modelos SNB e GG. Os autores encontraram variações significativas entre os modelos cinza e os não cinza para as frações radiativas, no geral aumentado com a diminuição do número de Reynolds.

Visto que chamas turbulentas são frequentemente encontradas em equipamentos de combustão, muitos trabalhos considerando o fenômeno da turbulência associados com o fenômeno de radiação térmica podem ser encontrados na literatura e entre eles, os trabalhos relacionados à interação turbulência-radiação (TRI: *Turbulence-Radiation Interaction*).

Como em Silva et al., 2007, que simularam a combustão de metano com ar em uma câmara cilíndrica. O método das zonas foi o escolhido para a solução da RTE, e o comportamento espectral foi modelado pelo WSGG. Um modelo global de dois passos para o cálculo da cinética química foi empregado. O maior efeito da radiação térmica foi percebido nos fluxos de calor junto às paredes da câmara. Os efeitos da radiação térmica nas reações químicas mostraram não serem significativos.

Habibi, et al., 2007, utilizaram o modelo WSGG em simulações 3d de um forno de craqueamento a vapor, com escoamento turbulento previsto pelos modelo RNG $k-\varepsilon$, e *Finite Rate/Eddy-Dissipation* com um modelo de cinética de 3 etapas. Três modelos espaciais foram utilizados e comparados com os resultados da simulação adiabática: DOM, P1 e *Rosseland*. O modelo *Rosseland* foi o que apresentou os piores resultados comparando com os demais. O uso dos modelos DOM e P1 apresentaram resultados muito semelhantes. Os autores

concluíram que o modelo P1 é mais rápido, porém o DOM tem uma faixa de aplicação mais ampla e que, de modo geral, o DOM é o método mais indicado.

Centeno et al., 2014, analisaram a modelagem da radiação para uma chama turbulenta do tipo jato de metano, resolvendo a cinética química da combustão com um modelo de duas etapas. O modelo WSGG foi empregado na solução espectral da radiação e o modelo das ordenadas discretas na solução da RTE, sendo que nesse trabalho a formação de fuligem foi negligenciada.

Uma nova abordagem para o cálculo da radiação pelo modelo WSGG, considerando a razão de concentração das espécies participantes H_2O e CO_2 variável ao longo do domínio, foi testada por Centeno et al., 2015, e comparada com a solução tradicional do método e com a solução LBL. Ambas as abordagens do WSGG utilizaram correlações baseadas no banco de dados HITEMP2010, também para uma chama turbulenta de metano em uma geometria 2d assiximétrica. As duas abordagens do modelo mostraram-se adequadas para prever o campo de radiação em comparação com a integração LBL, resultando em desvios dentre as soluções inferiores a 8%. Entretanto, o modelo que considera a razão da concentração variável apresentou um tempo computacional maior, porém ainda inferior ao da solução para o LBL.

Seguindo a linha de trabalhos com escoamento turbulentos, o modelo WSGG com correlações do Smith e um novo WSGG para a solução das propriedades radiativas dos gases foi desenvolvido e validado por Yin et al., 2011. O objetivo foi o de investigar a cinética química e a transferência de calor por radiação. A metodologia desenvolvida foi implementada no código *Ansys-Fluent* via UDFs. O processo de oxi-combustão para modelagem da combustão turbulenta de gás natural e gases reciclados foi resolvido pelo método das ordenadas discretas na solução da RTE. As simulações numéricas foram comparadas com dados experimentais e apresentaram boa concordância. A nova abordagem para o WSGG mostrou-se mais eficiente na predição da temperatura e transferência de calor. Dentre os mecanismos de cinética utilizados, o de quatro passos, mais refinado, foi o que se mostrou melhor, sendo o recomendado pelos autores.

Considerando a transferência de calor por radiação para chamas turbulentas, tratando a modelagem da radiação térmica espectral através modelo WSGG e o cálculo da equação da transferência de calor radiativa pelo método das ordenadas discretas, outros trabalhos podem ser citados: para modelos de cinética química global de um ou mais passos [chamas de metano – Bide et al., 2008; Habibi et al., 2007; carvão – Nakod et al., 2013; Hu et al., 2014,

Yin 2015; Yin 2016], para modelos de cinética química detalhada [chamas de metano - Parente et al., 2011; Galletti et al., 2009].

Além do modelo WSGG, outros modelos para solução da radiação térmica espectral em chamas turbulentas aparecem na literatura: SNB e CK para chamas de metano [Coelho, 2004] e SLW [Coelho et al., 2003].

O uso de modelos espectrais para o tratamento da radiação térmica requer o conhecimento de banco de dados espectrais para a geração de novas correlações e novas abordagens desses modelos. A precisão da solução obtida com os modelos está diretamente relacionada à base de dados espectrais adotada. Nesse sentido são comuns estudos que realizam comparações entre os modelos espectrais e diferentes banco de dados a fim de avaliar aspectos como a precisão e o tempo de cálculo.

Bem como em Chu et al., 2011, que investigaram os efeitos do uso de vários bancos de dados espectrais: HITRAN, HITEMP e CSDS *high-resolution* para a solução do LBL, em um problema de placas planas paralelas unidimensional para casos isotérmicos, não isotérmicos, homogêneo não homogêneos com várias razões de mistura dos gases participantes: CO₂ e H₂O. O modelo SNB também foi incluído no estudo. Os resultados para os diferentes bancos de dados mostraram que o LBL, em geral, apresenta forte dependência do banco de dados utilizado. Diferenças bastante significativas foram encontradas entre os resultados do método LBL usando o HITEMP2010 para com aqueles que usam bancos de dados mais antigos. A concordância entre os resultados de LBL usando o banco de dados HITEMP2010 e os resultados com o SNB foi considerada muito boa. Assim, os autores concluíram que o modelo SNB, também gerado com o HITEMP2010, é suficientemente preciso para reproduzir uma solução em problemas multidimensionais de transferência de calor, onde os cálculos de LBL são inviáveis.

Johansson et al., 2011, modificaram o modelo WSGG, que além de considerar as variações de temperatura, também consideraram também a variação das razões de concentração de H₂O e CO₂. Novas correlações para o modelo foram obtidas para a faixa de temperatura de 500-2500 K e razões molares entre 0,125 e 2. O modelo SNB foi utilizado como referência. Casos isotérmicos e não isotérmicos foram investigados em placas planas paralelas. É mostrado que o modelo WSGG modificado melhora significativamente os valores encontrados para o termo fonte radiativo enquanto os valores de fluxos na parede são similares ou melhores em relação a outros modelos cinza.

Outros trabalhos que fizeram uso da base de dados espectrais HITEMP2010 para a obtenção de novas correlações para o modelo WSGG podem ser citados: [Kangwanpongpan et al., 2012; Dorigon et al., 2013; Cassol et al., 2014; Bordbar et al., 2014; Guo et al., 2015, Brittes et al., 2017, Centeno et al., 2018].

Bordbar, et al., 2014 apresentaram uma nova formulação para o modelo WSGG que considera a variação da razão da fração molar na mistura. Novos coeficientes baseados no HITEMP2010 para o modelo foram obtidos para a faixa de temperatura de 300-2400 K e para razão de frações molares de H_2O e CO_2 entre 0,01 e 4, as quais englobam diferentes condições, principalmente nos sistemas de oxi-combustão. O modelo proposto foi comparado com outros WSGGs e com a solução LBL, e apresentou os melhores resultados entre os demais WSGGs. A validação do novo método foi realizada para casos 1D não isotérmicos e não homogêneos considerando a geometria para uma placa plana. O método DOM foi o utilizado no cálculo da RTE. Um caso 3d para oxi-combustão foi também avaliado apresentado bons resultados. A vantagem do presente WSGG é que o modelo não requer tratamento especial para as misturas de gases, uma vez que a fórmula de aproximação é uma função da razão de fração molar.

Chu et al., 2016, avaliaram o efeito de pressões elevadas em cálculos de transferência de calor por radiação em uma placa plana paralela unidimensional, considerando meios isotérmicos e homogêneos, sob condições relevantes para a oxi-combustão. Os modelos LBL, SNB, SNBCK, WSGG, e FSCK foram utilizados na avaliação. Os resultados para a solução LBL foram baseados no banco de dados HITEMP2010 e CDS-1000, sendo considerada a solução *benchmark* para avaliar a precisão dos outros modelos. O aumento na pressão total aumentou significativamente a transferência de calor da radiação. Entre os modelos testados o WSGG possui a menor precisão, porém a melhor eficiência computacional. A pressão total foi variada entre 1-30 atm. Segundo os autores, a escolha pelo melhor modelo vai depender das condições específicas de cada problema. Já em Chu, et al., 2017, foi feita uma análise da radiação térmica em problemas uni e bidimensionais utilizando o modelo LBL baseado no banco de dados HITEMP2010 em problemas envolvendo oxi-combustão. O método DOM foi o escolhido para os cálculos da RTE. Os parâmetros de análise para o LBL foram: resolução das linhas espectrais; esquema espacial de discretização; quadratura do método DOM e a pressão total. Os autores concluíram que a resolução espectral tem um impacto significativo no tempo computacional e a avaliação da pressão total foi o parâmetro de maior relevância

para a solução. Os resultados obtidos com o modelo LBL foram também comparados com os modelos SNB e SNBCK, apresentando boa concordância.

Mais recentemente, Centeno et al., 2018, apresentaram um estudo com o modelo WSGG no cálculo da transferência de calor por radiação para um sistema axissimétrico representativo de uma chama laminar difusiva de etileno com diluição de H₂O. Os perfis de temperatura e concentrações das espécies participantes (H₂O e CO₂), utilizados no estudo, foram determinados previamente através de uma simulação global da chama. Foram testadas diferentes abordagens para o WSGG: para correlações com razões constantes de frações molares das espécies participantes (Y_{H_2O} / Y_{CO_2}), e com o método da superposição (NCR-WSGG), o qual permite considerar as variações locais nas razões entre as concentrações de H₂O/CO₂ e fuligem. Os coeficientes utilizados no modelo foram obtidos a partir do HITEMP2010. A integração espacial da RTE foi resolvida utilizando DOM. Foram considerados diferentes cenários para as simulações: sem fuligem e com concentrações de fuligem moderadas e altas. A precisão com as diferentes abordagens do WSGG foi avaliada por comparação direta com a solução de LBL. A abordagem NCR-WSGG foi a que obteve resultados menos precisos, além de exigir um esforço computacional moderado. Os autores observaram que apesar da razão das concentrações molares (H₂O e CO₂) variarem localmente na chama, a aplicação do modelo WSGG com coeficientes obtidos para razões constantes ($Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 1$ e 2) mostrou ser a melhor alternativa, isso desde que a razão média global dessas concentrações fosse respeitada. Os autores encontraram uma razão de concentrações de fração molar média na chama de $Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 1,5$, logo uma média aritmética simples das soluções obtidas com o uso dos coeficientes WSGG para razões $Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 1$ e para $Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 2$ (ambos disponíveis na literatura) foi feita e provou ser uma maneira simples e precisa de se contornar essa diferença das correlações existentes. Entretanto, novos coeficientes de WSGG para a razão de $Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 1,5$ foram gerados. A solução do problema com esses novos coeficientes levou a resultados mais precisos e próximos a solução com a média das soluções com $Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 1$ e $Y_{H_2O} / Y_{CO_2} = 2$. Por fim, observou-se que o WSGG torna-se mais preciso quando a inclusão da fuligem é mais significativa, uma vez que a fuligem apresenta um comportamento espectral muito mais simples em comparação com H₂O e CO₂.

1.3 Objetivos e contribuição do trabalho

O presente trabalho tem como objetivo geral a avaliação numérica da transferência de calor radiativa em uma chama laminar difusiva resultante da combustão de metano, 2D axissimétrica. Para tanto, será utilizada um modelo de cinética química com nível de detalhamento confiável para obtenção de campos de temperatura e concentração das espécies químicas envolvidas no processo de combustão, para que, em seguida, a transferência de calor radiativa para meios participantes possa ser resolvida através da implementação e comparação de modelos de radiação. A modelagem da radiação térmica será calculada pelo método da integração linha-por-linha (LBL), considerada uma solução *benchmark*. Sua implementação é realizada através de UDFs com dados espectrais provenientes de banco de dados atuais e mais completos – HITEMP2010. Com isso, o objetivo principal deste estudo se constitui na aplicação do método LBL em problemas CFD, para validação do modelo WSGG na simulação de chamas laminares bidimensionais, além da comparação dos resultados da simulação numérica com dados experimentais.

Os resultados serão obtidos para condições compatíveis com as encontradas em processos de combustão reais, tanto para gradientes de temperatura como para as concentrações das espécies químicas. Uma das principais contribuições deste trabalho é a obtenção de uma solução numérica coerente com valores experimentais [Machado, 2015] e, com isso, validar o uso dos modelos.

Além disso, com vista a se obter uma solução confiável e computacionalmente exequível com o método LBL, será apresentada uma avaliação em relação à dependência da discretização e valores de números de onda. Essa avaliação poderá indicar se as simulações com maiores conjuntos de valores de número de ondas são prescindíveis em análises desse tipo.

Como discutido até o momento, o tratamento das propriedades espectrais de gases, ou mistura de gases, é uma etapa fundamental na obtenção de resultados consistentes em problemas envolvendo troca de calor por radiação térmica. O detalhamento dos efeitos da radiação no impacto dos processos de combustão é pertinente, pois quanto maior o detalhamento, maior será a precisão dos resultados. Apesar do progresso considerável dos modelos espectrais nas últimas décadas, existem algumas lacunas nessa área do conhecimento e, por isso, ainda há um amplo espaço para a pesquisa de métodos que permitam a solução

prática e computacionalmente viável de problemas envolvendo meios participantes em radiação térmica, principalmente nos processos de combustão.

Visto que na literatura trabalhos utilizando a integração LBL são geralmente para casos unidimensionais ou limitados a condições muito específicas, o propósito do trabalho é o desenvolvimento de uma rotina para integração espectral, através da integração linha-por-linha, aplicada ao cálculo da equação de transferência de calor radiativa, considerando o espectro em todos os números de onda, adaptada no *Ansys-Fluent* através de UDFs.

A implementação da integração LBL de forma acoplada em simulações de radiação-CFD ainda não é viável devido à alta demanda computacional, sendo aproximadamente 4000 vezes mais elevada do que o modelo WSGG [Centeno, 2014]. Contudo, a abordagem LBL (*benchmark*) pode ser empregada para testar os modelos espectrais, a fim de se fazer uma avaliação e validação dos modelos globais já existentes. Pretende-se, assim, conseguir mensurar o desvio que a solução obtida a partir do modelo WSGG, já implementada anteriormente, apresenta com relação à solução LBL, estabelecendo-se, assim, a principal contribuição deste trabalho de doutorado dentro da área de radiação térmica.

1.4 Organização do Trabalho

No Capítulo 2 é apresentada a modelagem de chamas laminares difusivas e as principais técnicas para modelagem da cinética química.

O Capítulo 3 expõe os fundamentos básicos da troca térmica por radiação em meios participantes, além dos principais modelos usados na literatura para a modelagem do coeficiente de absorção. É apresentado com maiores detalhes a integração LBL o modelo WSGG e a formulação matemática do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas sobreposição parcial (NCR-WSGG)

O Capítulo 4 aborda o problema em estudo, incluindo o domínio computacional, condições de contorno e propriedades físicas, além dos dados experimentais utilizados como referência e uma breve explicação sobre diluição de chamas.

O Capítulo 5 discorre a respeito dos métodos numéricos utilizados na solução das equações apresentadas nos Capítulos 2 e 3: método de volumes finitos e o método de ordenadas discretas além das principais considerações adotadas na solução numérica do problema. Uma breve explicação sobre a malha é mostrada. Neste capítulo, ainda se dá como

a implementação do modelo WSGG e da solução LBL foram implementadas via UDF no *Fluent*. E, por fim, a validação da UDF desenvolvida para a integração LBL.

Os resultados obtidos são mostrados no Capítulo 6 com os modelos WSGG e LBL, para solução espectral da radiação térmica, para dois casos de diluição com CO₂ e N₂. Uma avaliação em relação as *databases* utilizadas também é apresentada. O Capítulo 7 traz as conclusões e propostas de continuidade da pesquisa.

O Apêndice A mostra um estudo a respeito das *databases* que foram utilizadas. O Apêndice B fornece detalhes a respeito do método GCI utilizado para escolha da malha e das ordenadas discretas.

2 MODELAGEM DE CHAMAS LAMINARES DIFUSIVAS

Chamas difusivas são também denominadas como chamas não pré-misturadas. São chamas nas quais os reagentes estão inicialmente separados, sendo que o oxidante e o combustível se encontram através do transporte por difusão. Assim, a combustão ocorre na interface entre os reagentes, dado que a mistura e a combustão ocorrem simultaneamente. A frente de chama se localiza na região onde os reagentes alcançam determinado nível de mistura (proporção estequiométrica).

Diferentemente das chamas pré-misturadas, as chamas não pré-misturadas não possuem as propriedades características de velocidade de propagação, espessura de referência ou razão de equivalência. A razão de equivalência em uma chama não pré-misturada varia desde 0, para região onde há apenas o oxidante, até ∞ , para a região onde há apenas o combustível [Coelho e Costa, 2007].

São apresentadas nesse Capítulo as equações para a conservação de massa total (continuidade), transporte das espécies químicas, quantidade de movimento e energia. E por último, mecanismos de cinética química.

2.1 Equações de conservação

2.1.1 Equação da conservação da massa total

A equação da conservação da massa total é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1)$$

onde ρ é a massa específica da mistura e \vec{v} é a velocidade do escoamento. Considerando a hipótese de baixos números de Mach, a densidade independe da pressão sendo, desta forma, somente uma função da temperatura e, portanto pode ser escrita como

$$\rho = \frac{p_0 MW}{R_u T} \quad (2.2)$$

na qual p_0 é a pressão de referência (atmosférica), MW a massa molecular da mistura, R_u a constante universal dos gases ideais e T a temperatura.

2.1.2 Equação de transporte da quantidade de movimento linear

A equação da quantidade de movimento do escoamento é representada através da equação de Navier-Stokes a seguir

$$\left(\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \rho \vec{v} \right) = -\vec{\nabla} p + \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \hat{\tau} \quad (2.3)$$

onde p é a pressão, \vec{g} o vetor de força de campo por unidade de massa. O termo entre parênteses, do lado esquerdo da igualdade, representa a derivada material do campo de velocidades, ou seja, a aceleração de uma partícula de fluido que se desloca no campo multiplicado por ρ . O lado direito da igualdade é o somatório das forças (por unidade de volume) que agem sobre a partícula. Os dois primeiros termos são forças de pressão e de campo, respectivamente, enquanto o terceiro termo representa forças de origem viscosa. Pela hipótese de Stokes, para um fluido newtoniano, o tensor tensão $\hat{\tau}$ é

$$\hat{\tau} = \mu \left[\vec{\nabla} \vec{v} + (\vec{\nabla} \vec{v})^T \right] - \frac{2}{3} \mu (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \hat{I} \quad (2.4)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica e \hat{I} é o tensor de identidade.

2.1.3 Equação de conservação de massa das espécies químicas

O campo das espécies i , em fração mássica, para cada espécie N_s , para escoamentos reativos é determinado pela seguinte equação

$$\frac{\partial(\rho X_i)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} X_i) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i + \omega_i, \text{ para } i = 1, N_s - 1 \quad (2.5)$$

onde os termos a esquerda da igualdade representam a evoluç o temporal da fraç o m ssica X_i da esp cie i e o seu transporte por advecç o, respectivamente. J  os termos   direita representam o divergente do fluxo de difus o m ssica (\vec{j}_i) da esp cie i , e ω_i representa a produç o ou consumo da esp cie qu mica i .

Para garantir a conservaç o da massa, a fraç o m ssica da esp cie nitrog nio N_2   calculada por

$$X_{N_2} = 1 - \sum_{i=1}^{N_s-1} X_i \quad (2.6)$$

O fluxo de difus o m ssica no escoamento ocorre devido aos efeitos dos gradientes de temperatura (tamb m conhecido como efeito Soret), \vec{j}_i^T , dos gradientes de press o, \vec{j}_i^p , e dos gradientes de concentraç o das esp cies qu micas, \vec{j}_i^d [Coelho e Costa, 2007]. Portanto o vetor de difus o m ssica   dado conforme

$$\vec{j}_i = \vec{j}_i^T + \vec{j}_i^p + \vec{j}_i^d \quad (2.7)$$

Em processos de combust o   press o atmosf rica os gradientes de press o s o muito pequenos e, portanto, o termo de difus o m ssica devido aos gradientes de press o pode ser desprezado [Coelho e Costa, 2007]. Na maioria desses processos, a contribuiç o pelo efeito Soret tamb m pode ser desprezada. Esse efeito   importante apenas para as esp cies com baixo peso molecular (H, He e H₂), e a temperaturas baixas. Deste modo, a difus o das esp cies se d  somente devido aos efeitos dos gradientes de concentraç o ($\vec{j}_i = \vec{j}_i^d$).

A difus o ordin ria por gradiente de concentraç o em misturas multicomponentes pode ser tratada, para um esforço computacional reduzido, assumindo a Lei de Fick [Coelho e Costa, 2007]. Nesta aproximaç o, o fluxo difusivo m ssico   dado por:

$$\vec{j}_i^d = -\rho D_{i,M} \vec{\nabla} X_i = \rho X_i \vec{v}_i \quad (2.8)$$

onde \vec{v}_i é a velocidade de difusão da espécie i dada por

$$\vec{v}_i = -\frac{D_{i,M}}{X_i} \vec{\nabla} X_i \quad (2.9)$$

e onde $D_{i,M}$ é o coeficiente médio de difusão mássica da espécie i na mistura. Este coeficiente pode ser obtido pela aproximação de Hirschfelder, et al., 1954:

$$D_{i,M} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j=1, j \neq i}^{N_s} \frac{X_j}{D_{i,j}}} \quad (2.10)$$

onde $D_{i,j}$ é o coeficiente de difusão binária da espécie i em relação a espécie j .

2.1.4 Equação do transporte da energia

A equação de conservação de energia pode ser escrita em termos de entalpia específica total da mistura, h , como

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} h) = \frac{Dp}{Dt} + \hat{\tau} : \vec{\nabla} \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_q + \dot{q}_R \quad (2.11)$$

na qual os termos da esquerda da igualdade representam a evolução temporal da entalpia h da mistura e o seu transporte por advecção, respectivamente. Os termos da direita representam a derivada material da pressão, a dissipação viscosa, o divergente do vetor de fluxo de calor \vec{j}_q , e o termo fonte radiativo, \dot{q}_R .

A aproximação de baixo Mach e regime permanente implica que o efeito da derivada material da pressão pode ser negligenciado. Por ser pequeno comparado com a liberação de calor na chama, o termo de dissipação viscosa também é desconsiderado [Coelho e Costa, 2007]. De forma semelhante ao fluxo difusivo mássico, o fluxo difusivo térmico também é

composto por três fenômenos: o primeiro é o fluxo de calor pela condução causado por gradientes de temperatura (Lei de Fourier); o segundo é o fluxo de calor gerado pelo gradiente de concentração das espécies (efeito Dufour) que é usualmente negligenciado em processos de combustão; e o terceiro e último ocorre devido à difusão ordinária de massa [Coelho e Costa, 2007].

O fluxo de calor pode ser representado pela Equação 2.12, na qual h_i é a entalpia específica da espécie química i

$$\vec{j}_q = -\lambda \vec{\nabla} T + \sum_{i=1}^{N_s} h_i \vec{j}_i \quad (2.12)$$

onde λ é condutividade térmica da mistura gasosa.

Os efeitos das reações químicas são contabilizados pela entalpia específica da mistura, que é função da composição conforme

$$h = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i h_i \quad (2.13)$$

$$h_i = h_{i,f}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i}(T) dT \quad (2.14)$$

onde $h_{i,f}^0$ é a entalpia específica de formação da espécie i na temperatura de referência, $T_{ref} = 298$ K e $c_{p,i}$ o calor específico a pressão constante.

2.2 Modelagem da cinética química

O processo de combustão é caracterizado pela existência de inúmeras reações elementares que ocorrem simultaneamente. Em geral, as reações são reversíveis e a taxa da reação reversa também é considerada. A seguir é mostrada a modelagem da produção ou consumo das espécies químicas no termo fonte da equação de transporte das espécies.

Uma reação química genérica j pode ser escrita como



onde \mathcal{M}_i representa a fórmula molecular da espécie i , $\nu_{i,j}$ são os coeficientes estequiométricos, os quais indicam quantos mols da espécie i fazem parte da reação j , os índices (\prime) e ($\prime\prime$) indicam a presença da espécie nos reagentes e produtos, respectivamente. A expressão geral para a taxa de reação líquida para a reação j pode ser escrita como

$$\bar{\dot{\omega}}_j = k_{f,j} \prod_{i=1}^{N_s} [\mathcal{M}_i]^{\nu_{i,j}^{\prime}} - k_{r,j} \prod_{i=1}^{N_s} [\mathcal{M}_i]^{\nu_{i,j}^{\prime\prime}}, \quad (2.16)$$

A concentração molar da espécie i , dada por $[\mathcal{M}_i] = (Y_i MW / MW_i)(p_0 / R_u T)$ e k representa a constante de taxa. Os subscritos f e r indicam os sentidos direto e reverso das reações respectivamente.

A constante de taxa k é escrito na forma modificada de Arrhenius,

$$k = AT^{\beta} e^{-E_a / R_u T} \quad (2.17)$$

com A sendo o fator pré-exponencial, β o expoente da temperatura e E_a a energia de ativação. Estes parâmetros são encontrados empiricamente por procedimentos de ajuste em resultados experimentais, ou teoricamente a partir de princípios mais fundamentais.

Quando não especificado, a constante da taxa de reação reversa $k_{r,j}$, pode ser calculado pela constante de equilíbrio K_c através da Equação 2.18, e tabelado em função da temperatura. No equilíbrio, a taxa de variação da concentração de qualquer espécie é zero. Disso resulta que a razão entre a taxa de reação direta e a taxa de reação reversa é igual à constante de equilíbrio $K_{c,j}$ da reação j em questão

$$K_{c,j}(T) = \frac{k_{f,j}(T)}{k_{r,j}(T)} \quad (2.18)$$

Por fim, tem-se que o termo fonte total $\dot{\omega}_i$ presente na equação de conservação das espécies, contendo a contribuição de todas as N_r reações presentes no mecanismo químico envolvendo a espécie i , é dado por

$$\dot{\omega}_i = MW_i \sum_{j=1}^{N_r} (v_{i,j}'' - v_{i,j}') \bar{\omega}_j \quad (2.19)$$

2.3 Mecanismos de cinética química

A combustão de hidrocarbonetos envolve um grande número de reações químicas, as quais se apresentam de forma consecutiva e competitiva, com diferentes taxas específicas, representando a nível molecular a transformação de reagentes em produtos. Ou seja, mostra quais ligações são rompidas ou formadas e em quais passos as reações prosseguem e também suas taxas relativas. Cada etapa envolve o rearranjo de átomos originando assim novas espécies químicas. Estas transformações que ocorrem, podem ser representadas através de mecanismos completos, ou seja, mecanismos que levam em consideração todas as reações elementares na rota de combustão do conjunto de espécies envolvidas.

Mecanismos cinéticos detalhados são validados para tipos específicos de chamas, e condições de operação. Ainda assim, os mecanismos de cinética química impõem certas limitações à solução de problemas envolvendo combustão. Os mecanismos cinéticos têm validade apenas para as condições em que foram criados ou ajustados. Além disso, frequentemente o número de etapas utilizado para descrever um processo de oxidação é enorme e, portanto, o custo computacional pode se tornar extremamente alto. Outra desvantagem está relacionada à dificuldade em se obter valores precisos das taxas de reação quando se tem um número grande de reações elementares formando um único mecanismo completo.

2.3.1 Mecanismos detalhados

Para n espécies químicas há n^2 pares de reagentes, e para cada um destes pares podem existir diferentes possíveis produtos. Entretanto, muitas destas reações matematicamente possíveis não ocorrem na realidade ou possuem taxas de reação muito pequenas para serem expressivas. A construção de um mecanismo detalhado e realístico, desta forma, envolve a

identificação das reações que realmente ocorrem e que possuem impacto significativo na oxidação do combustível.

O GRI-Mech é um mecanismo de reações químicas detalhadas otimizadas para oxidação de metano e gás natural. A versão 3.0 é formada por 325 reações e 53 espécies (O, O₂, M, H, OH, H₂, HO₂, H₂O₂, CH, CO, CH₂, HCO, CH₂(S), CH₃, CH₂O, CH₄, CO₂, CH₂OH, CH₃O, CH₃OH, C₂H, C₂H₂, HCCO, C₂H₃, CH₂CO, C₂H₄, C₂H₅, C₂H₆, H₂O, N₂, AR, C, HCCOH, N, NO, N₂O, NO₂, NH, HNO, NH₂, NNH, CN, NCO, HCN, HOCN, HNCO, H₂CN, HCNN, HCNO, NH₃, CH₂CHO, CH₃CHO, C₃H₈, C₃H₇) com seus respectivos parâmetros de reação e propriedades termoquímicas das espécies envolvidas. O mecanismo é produto da parceria entre várias universidades e pode ser encontrado em http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.

No mecanismo GRI-Mech estão incluídas reações químicas pertinentes aos hidrocarbonetos constituintes do gás natural. Entretanto, aspectos relevantes à combustão de várias espécies não foram considerados. Portanto, não é aconselhável para modelagem da oxidação de combustíveis puros como metanol, propano, etileno, acetileno, entre outros. Embora o mecanismo contabilize reações de formação de *NO_x*, a redução seletiva não-catalítica do NO (importante na queima de gás natural em baixas temperaturas) não está incluída no modelo, assim como a formação de fuligem [McBride et al., 1993; Burcat e McBride, 1993].

Estudos envolvendo mecanismo detalhados de cinética química, contabilizando somente reações elementares, ou seja, reações que presumivelmente ocorrem em nível molecular são reportadas nos trabalhos [Lutz, 1988; Miller e Bowman, 1989; Frenklach, 1994; Konnov, 2009].

2.3.2 Mecanismos *Skeleton*

Alguns mecanismos reduzidos a partir de mecanismos detalhados são chamados de *skeleton*. Esses mecanismos consideram apenas as reações mais significativas para o processo de combustão em questão. Estes mecanismos são formados por dezenas de reações em detrimento das centenas de reações elementares de um mecanismo completo. Essas reduções têm como principal objetivo obter um menor custo computacional quando comparados com os mecanismos detalhados, porém sem deixar de modelar a oxidação do combustível satisfatoriamente. Muitos trabalhos podem ser encontrados na literatura em que mecanismos

reduzidos do tipo *skeleton* são utilizados como uma alternativa eficiente para a solução da cinética química [Miller et al 1984; Kazakov e Frenklach, 1994; Sankaran et al., 2007; Chen, Z., et al 2007; Lu e Law, 2008; Choi, et al., 2009; Parente, et al 2011; Verhoeven et al., 2012 e Garten, B., et al 2015].

Dentre os vários mecanismos disponíveis na literatura para a queima de metano, o mecanismo skm-DRM19 foi o escolhido para realização deste trabalho, pois apresenta bons resultados com um custo computacional conveniente.

O mecanismo skm-DRM19 desenvolvido por Kazakov e Frenklach, 1994, é formado por 84 reações elementares e 21 espécies químicas (H_2 , H , O , O_2 , OH , H_2O , HO_2 , CH_2 , $CH_2(S)$, CH_3 , CH_4 , CO , CO_2 , HCO , CH_2O , CH_3O , C_2H_4 , C_2H_5 , C_2H_6 , N_2 e Ar). Este mecanismo representa um conjunto reduzido de reações capazes de reproduzir as características de tempo de ignição e a velocidade de chama laminar de forma coerente com o mecanismo original. As propriedades termodinâmicas e de transporte das espécies químicas são as mesmas do GRI-Mech 1.2 [Frenklach et al., 1994]. O mecanismo DRM19 pode ser encontrado em <http://combustion.berkeley.edu/drm/>.

O skm-DRM-19 foi testado em comparação ao GRI-Mech versão 1.2 em uma série de simulações de tempo de ignição e velocidade de chama laminar em pressões de 1 atm a 20 atm para a faixa de temperaturas de 1000 K a 2500 K e razão de equivalência de 0,6 a 1,5. Para o tempo de ignição de chama, o mecanismo reduzido manteve erros de aproximadamente 6-8% a baixas pressões em todo o intervalo da razão de equivalência, apresentando maiores desvios junto às menores temperaturas. Em pressões elevadas (10 atm) os erros para baixas temperaturas cresceram significativamente na ordem de 40%. Em chamas pré-misturadas foi avaliada a velocidade de chama laminar e a fração molar dos radicais H , OH e CH_3 , apresentando erros de aproximadamente 8% na velocidade de chama (3-4% para condição estequiométrica de mistura) e erros máximos da estimativa dos radicais na ordem de 20%, 80% e 15%, respectivamente para H , OH e CH_3 sendo que os valores elevados de erros na fração molar foram observados apenas em mistura com excesso de combustível (para razões estequiométricas próximas de 1 estes valores são em torno de 1-7,5%) [Kazakov e Frenklach,1994].

2.3.3 Mecanismos Globais

Mecanismos globais podem também ser utilizados de forma eficiente do ponto de vista numérico devido ao baixo custo computacional. Em situações nas quais as informações químicas fornecidas por mecanismos detalhados são desnecessárias, os mecanismos globais são em geral a opção escolhida. Entretanto, mecanismos globais são ajustáveis somente a uma estreita faixa de condições o que limita sua aplicabilidade.

Apesar das limitações, mecanismos globais são frequentemente utilizados como uma aproximação rápida e eficaz que reduz consideravelmente o tempo despendido para a solução de problemas de combustão [Westbrook e Dryer, 1981; Jones e Lindstedt 1988; Marakis et al., 2000 e Yin et al., 2011].

3 RADIAÇÃO TÉRMICA

Transferência de calor por radiação térmica é um fenômeno significativo em muitos processos industriais de aquecimento, resfriamento, secagem, assim como nos processos de conversão de energia que envolve a combustão de combustíveis, como câmaras de combustão ou fornos industriais, além, é claro, da radiação solar.

A radiação, ao contrário da condução e convecção, não requer um meio para que ela ocorra. A radiação pode ser determinada como a propagação de ondas eletromagnéticas. Uma representação do espectro eletromagnético pode ser visto na Figura 3.1. Cada segmento do espectro tem importância para variadas atividades. Para a radiação térmica tem-se interesse na região intermediária, que compreende a região de 0,1 a 100 μm , e inclui uma parcela do ultravioleta (UV) e toda a faixa visível e infravermelha (IV), sendo este o intervalo que interessa para a transferência de calor.

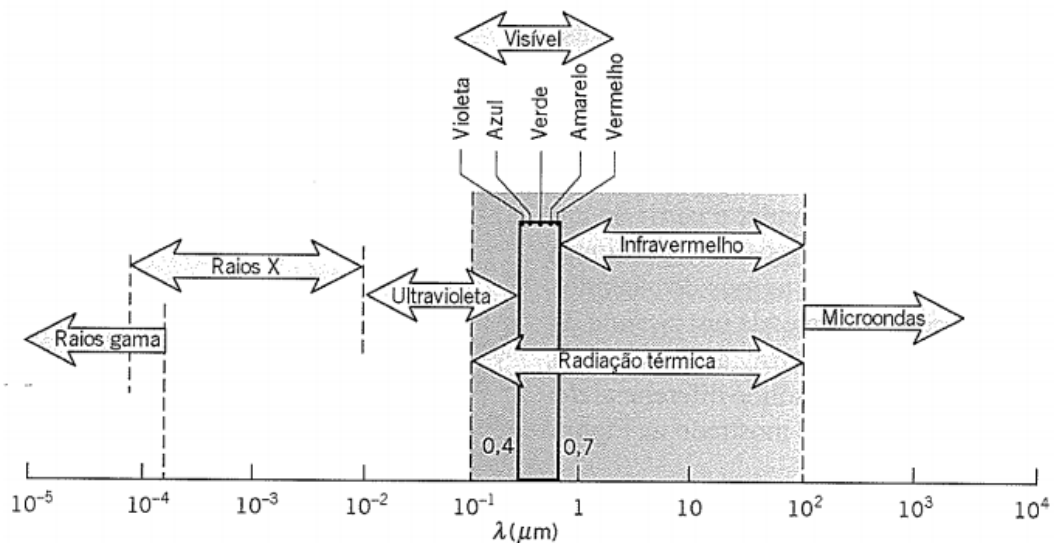


Figura 3.1 – Espectro da radiação eletromagnética [Incropera e De Witt, 2008].

Na engenharia muitos processos com radiação térmica envolvem gases que participam do processo de transferência de calor. Meios participantes absorvem, emitem e espalham energia radiante como, por exemplo, gases como o monóxido e dióxido de carbono, o metano e o vapor de água. O ar e os gases monoatômicos são transparentes à radiação térmica, ou seja, não participam do processo de radiação.

O objetivo deste capítulo é apresentar a equação de transferência radiativa (RTE) para meios participantes. Para tal, a definição de alguns conceitos é fundamental na compreensão do estudo de transferência de calor por radiação e, portanto, inicialmente a definição de corpo negro e da intensidade de radiação são apresentadas, seguido de uma descrição do comportamento espectral dos gases participantes no processo de transferência de calor por radiação e sua modelagem. A abordagem numérica necessária para a solução da equação de transferência radiativa também é apresentada nesse capítulo.

3.1 Corpo negro

O corpo negro é uma idealização, pois se considera que ele absorve toda a energia radiante incidente, independente da direção e do número de onda. Ainda, para uma dada temperatura, a energia radiante emitida pelo corpo negro é máxima para cada número de onda e direção [Siegel e Howell, 2002].

A Figura 3.2 considera um corpo negro a uma temperatura T , envolvido por um detector hemisférico que capta a radiação térmica com número de onda η , dentro de uma faixa $d\eta$.

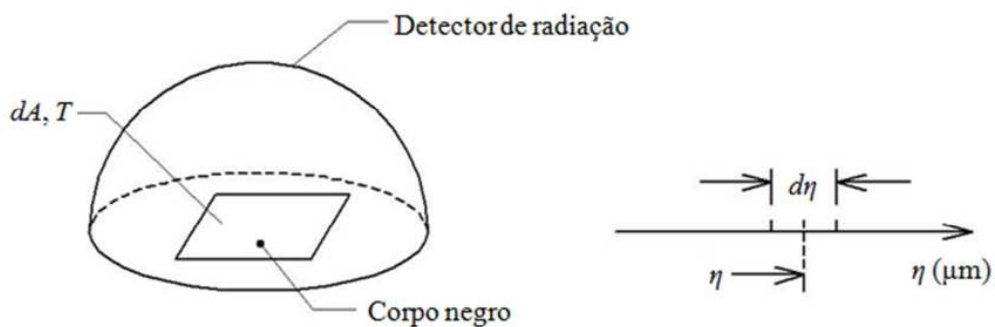


Figura 3.2 – Corpo negro envolvido por um detector hemisférico [Brittes, 2011].

O poder emissivo espectral hemisférico de corpo negro $E_{\eta,b}(\eta, T)$ ($\text{W}/\text{m}^2\mu\text{m}$), cuja dependência em relação ao número de onda é dada pela distribuição espectral de Planck, é a energia emitida por uma superfície negra, por unidade de tempo, por unidade de área e por unidade de intervalo de número de onda $d\eta$, em torno de η .

A equação para a distribuição espectral de Planck é escrita como

$$E_{\eta,b}(\eta, T) = \frac{2\pi C_1 \eta^3}{e^{C_2 \eta/T} - 1} \quad (3.1)$$

onde T (K) é a temperatura, η (μm) é o número de onda e C_1 e C_2 são constantes que valem, respectivamente: $0,59552137 \times 10^8 \text{ W}\mu\text{m}^4/(\text{m}^2\text{sr})$ e $1,4387752 \times 10^4 \mu\text{mK}$.

Integrando-se a Equação 3.1 em todos os números de onda, resulta na Lei de Stefan-Boltzmann

$$E_b = \sigma T^4 \quad (3.1)$$

onde E_b (W/m^2) é o poder emissivo total do corpo negro, que representa o fluxo de energia radiativa emitida por uma superfície de área unitária à temperatura T e $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$ é a constante de Stefan-Boltzmann. A intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro é dada por

$$I_b(T) = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (3.3)$$

3.2 Intensidade da radiação térmica

A intensidade da radiação, I_η , é definida como a energia radiante emitida por uma área infinitesimal dA , por unidade de tempo subtendendo o ângulo sólido $d\omega$ em um intervalo do espectro $d\eta$, considerando a emissão em uma direção particular proveniente de um elemento de área dA , contido em um meio participante, como pode ser visto na Figura 3.3. A equação para a intensidade é dada por

$$I_\eta = \frac{d^3 Q_\lambda}{dA \cos \beta d\omega d\eta} \quad (3.4)$$

onde I_η é dado em $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \mu\text{m sr})$.

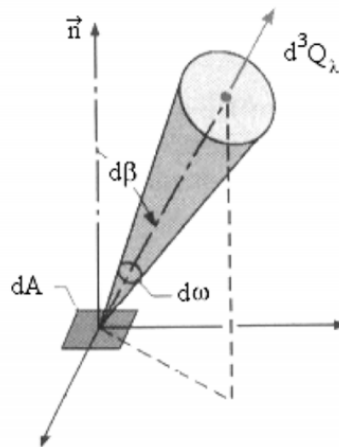


Figura 3.3 – Geometria para emissão de radiação de uma área diferencial dA [adaptado de Siegel e Howell, 2002].

Por consequência desta definição a intensidade mantém-se constante quando não há atenuação ou emissão no meio. Para um meio participante, a intensidade de radiação varia conforme o trajeto [Siegel e Howell, 2002].

Por ser perfeitamente difusa, a intensidade de radiação do corpo negro relaciona-se com o poder emissivo do corpo negro, conforme a equação abaixo:

$$I_{\eta,b} = \pi E_{\eta,b} \quad (3.5)$$

onde $I_{\eta,b}$ é a intensidade de radiação térmica espectral emitida por um corpo negro [Siegel e Howell, 2002].

3.3 Atenuação da intensidade devido à absorção do meio participante

Quando um feixe radiante passa através de uma camada do meio participante, ele atenua sua intensidade através de efeitos de absorção ou espalhamento. A redução na intensidade de radiação atravessando uma camada de meio participante de espessura dS é proporcional ao produto de I_{η} por dS , conforme Figura 3.4. Experimentalmente, foi possível determinar que a alteração na intensidade depende da magnitude da intensidade local. Uma constante de proporcionalidade dado pelo coeficiente de extinção κ_{η} é introduzida, sendo essa constante uma função da temperatura, da pressão, da concentração do meio e do número de onda da radiação incidente.

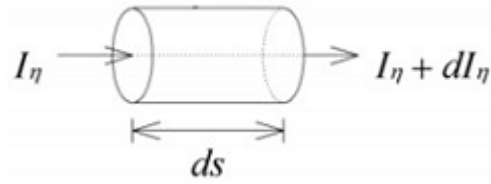


Figura 3.4 – Intensidade de radiação ao longo do meio participante de espessura ds
[adaptado de Howell et al., 2011].

Assumindo-se que não haja espalhamento, a intensidade da radiação reduz-se ao longo do caminho de acordo com a equação abaixo:

$$dI_{\eta} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}dS \quad (3.6)$$

A atenuação da radiação é a soma dos efeitos de absorção e espalhamento, e quando o espalhamento é negligenciado o coeficiente de extinção é igual ao coeficiente de absorção. Os principais gases estudados neste trabalho, CO_2 e H_2O , não espalham radiação de forma significativa, assim, o efeito de espalhamento é desprezado.

3.4 Aumento da intensidade devido à emissão do meio participante

À proporção em que a intensidade de radiação I_{η} atravessa um meio participante, em uma determinada direção, a energia é absorvida e a intensidade é atenuada. Porém ao mesmo tempo em que ocorre a atenuação, têm-se sua energia aumentada devido à emissão do meio.

A energia total quantificada ao longo de um caminho S depende do próprio comprimento desse caminho e da energia contida no meio. Contudo que o meio esteja em equilíbrio termodinâmico, tem-se que a intensidade de radiação emitida é dada pelo produto da energia emitida por um corpo negro multiplicado pelo coeficiente de absorção e pela trajetória percorrida. Assim, o diferencial de intensidade emitida ao longo de dS é dado da seguinte forma

$$dI_{\eta,e} = \kappa_{\eta}(S)I_{\eta,b}dS \quad (3.7)$$

Na equação κ_η , coeficiente de absorção, é o mesmo, tanto para emissão como para absorção, desde que o meio esteja em equilíbrio termodinâmico.

3.5 Emitância total

A emitância total é a integração em todo o espectro da intensidade de radiação emitida por um meio participante comparada ao poder emissivo total de um corpo negro a uma mesma temperatura [Siegel e Howell, 2002]:

$$\varepsilon(T) = \frac{\int_0^{\infty} I_{\eta,b} \varepsilon_\eta(T) d\eta}{\int_0^{\infty} I_{\eta,b} d\eta} \quad (3.8)$$

Aplicando a Lei de Kirchhoff, pela qual se tem que a emitância é igual à absorptância – propriedade que determina a fração de radiação que é absorvida por um meio - ($\varepsilon_\eta = \alpha_\eta$), e substituindo a absorptância espectral $\alpha_\eta = (1 - \exp(-\kappa_\eta pS))$, obtém-se então a equação para emitância total

$$\varepsilon(T) = \pi \frac{\int_0^{\infty} I_{\eta,b} [1 - \exp(-\kappa_\eta pS)] d\eta}{\sigma T^4} \quad (3.9)$$

onde pS é o produto da pressão parcial pelo caminho, dado em atm·m, e κ_η é o coeficiente de absorção do meio participante dado em m^{-1} .

3.6 Equação do transporte radiativo

A equação do transporte radiativo (RTE) é uma equação que engloba os efeitos de absorção, emissão e espalhamento na intensidade de radiação para um determinado meio participante ao longo de um caminho S . Em determinados casos, simplificações na equação podem ser realizadas, de acordo com a precisão necessária para a solução, ou de acordo com as propriedades do meio participante em questão. Nos casos onde o espalhamento é

desconsiderado a equação para transferência de calor radiativa é dada pela combinação das equações Equação 3.6 e Equação 3.7, vistas anteriormente.

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = -\kappa_{\eta} I_{\eta} + \kappa_{\eta} I_{\eta,b} \quad (3.10)$$

onde o primeiro termo no lado direito representa o aumento na intensidade de radiação devido à absorção; o segundo termo, a redução na intensidade de radiação devido à emissão, I_{η} é a intensidade de radiação espectral e $I_{\eta,b}$ corresponde à emissão do corpo negro, visto na Equação 3.1.

A Equação 3.10 corresponde à equação governante do problema de gases participantes. A solução da equação de transporte radiativo necessita de diferentes tipos de integração: espectral, direcional e espacial.

O interesse na modelagem espectral dos gases participantes se justifica pela complexidade de determinação das propriedades radiantes para esses meios, devido às grandes variações espectrais.

Os coeficientes de absorção e emissão são funções que variam abruptamente com o número de onda. Isso ocorre devido a transições nos estados de vibração ou rotação que os gases participantes frequentemente são submetidos [Siegel e Howell, 2002]. A Figura 3.5 ilustra o comportamento irregular dos espectros e seus coeficientes de absorção, nesse caso específico para uma molécula de CO₂.

Um gás participante é composto por moléculas, átomos, íons ou elétrons livres, que podem assumir diferentes níveis de energia. Em uma molécula, seus átomos formam um sistema dinâmico com modos de vibração e rotação em níveis específicos de energia. O fóton é a unidade básica de energia radiativa. Quando fótons são liberados, ocorre emissão de energia radiativa, já quando eles são capturados ocorre absorção de energia. Assim, quando um fóton é emitido ou absorvido, a energia da partícula emissora ou absorvedora é reduzida ou aumentada, respectivamente. Esse aumento ou diminuição envolve níveis discretos de energia. A seção a seguir mostra como o coeficiente de absorção κ_{η} pode ser obtido.

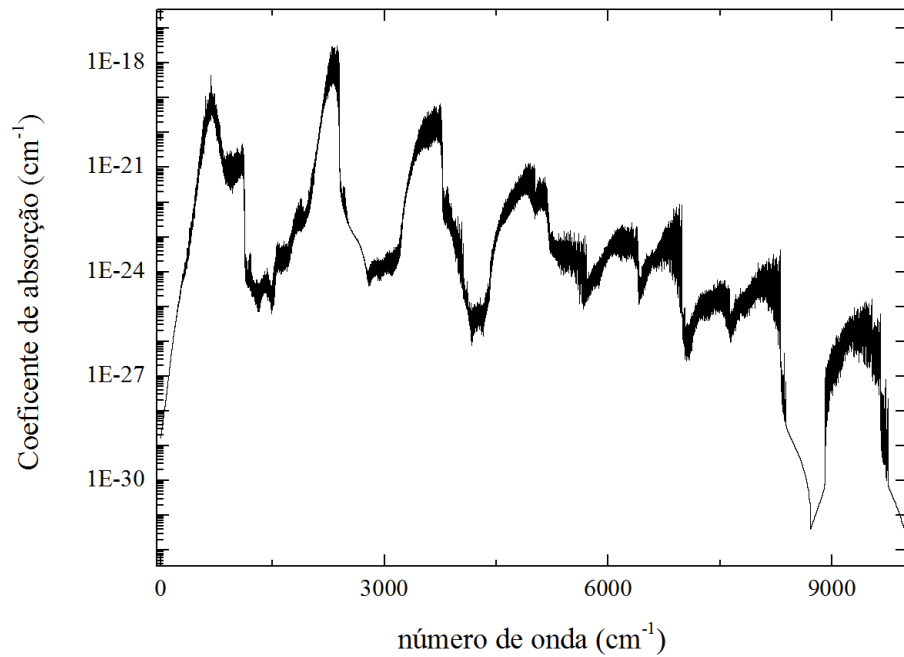


Figura 3.5 – Espectro do coeficiente de absorção para CO_2 , $T=1500\text{K}$ e $p_{\text{CO}_2}=1$ atm.

3.7 Coeficiente de absorção e as linhas espectrais

O coeficiente de absorção, κ_η , dado em função do número de onda, da temperatura, da fração molar e da pressão total e é calculado através de

$$\kappa_\eta(\eta, T, p, Y) = N(T, p) Y C_\eta(\eta, T, p, Y) \quad (3.11)$$

onde N é a densidade molecular, em molécula/(cm^2m), C_η é a seção transversal de absorção, em $\text{cm}^2/\text{molécula}$ e Y é a fração molar que pode ser definida como $Y = p_i / p$. Considerando que a pressão total (p), utilizada nesse trabalho é igual a 1, a pressão parcial da molécula (p_i) é equivalente a fração molar da espécie.

A densidade molar do gás N é dada por

$$N(T, p) = \frac{p N_A}{R_u T} \quad (3.12)$$

onde N_A é o número de avogadro, R_u é a constante universal dos gases e T é a temperatura do gás. Definindo-se $N^* \equiv N_A / R_u$ tem-se:

$$\kappa_{\eta} = N^* \frac{p_i}{T} C_{\eta} \quad (3.13)$$

Para o modelo WSGG, é conveniente definir o coeficiente de absorção baseado na pressão $\kappa_{p,\eta}$. Assim

$$\kappa_{p,\eta} \equiv \frac{\kappa_{\eta}}{p_i} = \frac{N^*}{T} C_{\eta} \quad (3.14)$$

O cálculo para a seção transversal de absorção C_{η} depende da modelagem de linhas espectrais. Essas linhas espectrais formam o espectro da radiação. Um número de onda (ou uma determinada frequência) está associado com a transição de um nível de energia para outro e, na ausência de outros efeitos, esse espectro é composto por linhas espectrais de espessura infinitesimal posicionadas naquele número de onda. Os efeitos de alargamento fazem com que a linha espectral infinitesimal seja alargada e, conseqüentemente, tenha uma faixa finita de número de onda ao redor do número de onda de transição η_{ij} . Alguns mecanismos de alargamento são o natural, *Doppler*, por colisão e *Stark*.

Cada processo de alargamento contribui com um diferente perfil de linha e o espectro final será o resultado da mudança dos processos de alargamento individuais. As formas dessas linhas são apresentadas esquematicamente na Figura 3.6. Uma característica importante é a meia largura γ . Ela define a metade da largura da banda na metade da sua altura.

O termo S_{ij} , intensidade da linha, é obtido através do banco de dados HITEMP, e é dado pela integral da seção transversal de absorção, $C_{\eta,ij}$, em relação ao número de onda, sendo calculado a partir da seguinte relação:

$$S_{ij} = \int_0^{\infty} C_{\eta,ij}(\eta) d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} C_{\eta,ij}(\eta) d(\eta - \eta_{ij}) \quad (3.15)$$

S_{ij} e $C_{\eta,ij}(\eta)$ são dependentes do número de moléculas que estão em transição do nível de energia i para j , e da massa específica do gás. A razão $C_{\eta,ij}(\eta)/S_{ij}$, tende a cancelar o efeito da massa específica na magnitude $C_{\eta,ij}(\eta)$. Assim é possível observar o efeito da massa

específica na mudança da forma da linha, onde os fenômenos responsáveis pelo alargamento da linha são vistos [Siegel e Howell, 2002]. A seguir são apresentados em maiores detalhes os mecanismos de alargamento.

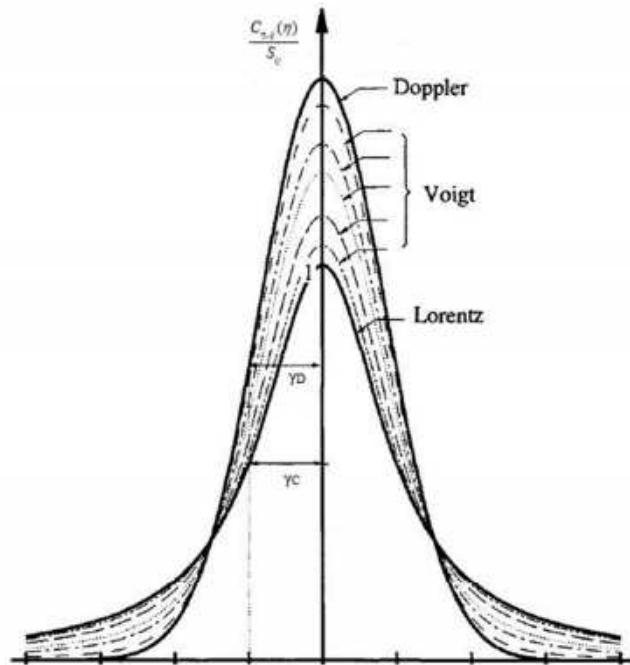


Figura 3.6 – Forma de linha pra diversos tipos de alargamento [Modest, 1993].

3.7.1 Alargamento natural

O alargamento natural é calculado pela seguinte equação:

$$\frac{C_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_n / \pi}{\gamma_n^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.16)$$

onde γ_n é a meia largura para o alargamento natural, S_{ij} é a intensidade da linha e η é o número de onda.

Esse alargamento tem a forma do perfil de Lorentz e é simétrico em torno de η_{ij} . O alargamento natural normalmente é negligenciado em aplicações de engenharia, sendo muito pequeno se comparado aos outros mecanismos de alargamento [Howell et al., 2011].

3.7.2 Alargamento Doppler

O alargamento Doppler é causado pelo deslocamento dos números de onda dos fótons devido aos movimentos dos átomos e moléculas e pode ser calculado

$$\frac{C_{n,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{1}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left[-(\eta - \eta_{ij})^2 \frac{\ln 2}{\gamma_D^2}\right] \quad (3.17)$$

onde γ_D é a meia largura para o alargamento Doppler. Esse alargamento tem importância apenas em altas temperaturas acima das encontradas em processos convencionas de combustão. [Siegel e Howell. 2002].

3.7.3 Alargamento Stark

O alargamento *Stark* ocorre na presença de fortes campos elétricos, na qual as moléculas de gases são fortemente perturbadas.

3.7.4 Alargamento por Colisão

O cálculo do alargamento por colisão é baseado no perfil de Lorentz. Nesse caso, a equação utilizada é

$$\frac{C_{n,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_c / \pi}{\gamma_c^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.18)$$

onde γ_c é a meia largura para o alargamento por colisão. Uma expressão aproximada para γ_c é dada por:

$$\gamma_c = \frac{1}{2\pi c} \frac{4\sqrt{\pi} D^2 p}{(MkT)^{1/2}} \quad (3.19)$$

onde D é o diâmetro dos átomos ou moléculas e p é a pressão do gás.

De acordo com Siegel e Howell, 2002, de todos os alargamentos mostrados, o mais importante é o alargamento por colisão, pois ele tem grande influência na região infravermelha do espectro, importante em problemas que envolvem transferência de calor. Assim, a geração dos espectros dos gases considerados neste trabalho é baseada nesse perfil.

3.8 Espectros de seção transversal de absorção espectral

O espectro de absorção para os gases considerando, neste trabalho, o alargamento por colisão, é descrito pelo perfil de Lorentz, dado por:

$$C_{\eta} = \sum_{\eta-NC}^{\eta+NC} \frac{S_i(T)}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (3.20)$$

onde C_{η} é a seção transversal de absorção, S_i é a intensidade da linha para cada linha do banco de dados em um determinado número de onda, η_i , NC é a faixa de dados em torno de η que é lida no banco de dados para cálculo de C_{η} e γ_i é a meia largura para cada transição, que pode ser calculada da seguinte forma:

$$\gamma_i = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n p_s \gamma_{self,i} + (1 - p_s) \gamma_{air,i} \quad (3.21)$$

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

Os espectros para os valores de seção transversal de absorção são gerados variando o η para a região em que se tem interesse, ou seja, a faixa de número de onda entre $\eta=0$ e 10000cm^{-1} , que compreende a região mais significativa para a radiação térmica em processos de interesse em engenharia.

Para uma dada temperatura T , a integral da intensidade da linha é obtida por:

$$S_i(T) = S_i(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \frac{\exp(-C_2 E_i / T)}{\exp(-C_2 E_i / T_{ref})} \frac{[1 - \exp(-C_2 \nu_i / T)]}{[1 - \exp(-C_2 \nu_i / T_{ref})]} \quad (3.22)$$

onde Q é a soma das funções de partição (depende da molécula, do isótopo e da temperatura) e representa a soma de todos os estados de energia (vibracional, rotacional), ν_i é a diferença de energia entre o estado inicial e o final, dado como um número de onda no vácuo, E_i é a energia no nível mais baixo, e C_2 é a segunda constante de Planck, 1,43877cm K. Os parâmetros Q , ν_i , E_i , são obtidos pelo banco de dados HITEMP 2010, o qual é apresentado na próxima seção.

3.9 Banco de dados espectrais HITEMP

É a partir de bancos de dados como o HITRAN e HITEMP que os espectros da seção transversal de absorção são possíveis de serem gerados. Esses bancos de dados contêm informações sobre parâmetros relativos às moléculas, em função do número de onda. Para estudos de combustão, é mais apropriada a utilização do banco de dados HITEMP, pois os dados são obtidos para temperaturas elevadas de 1000 K e 1500K. Isso significa que extrapolações para temperaturas mais elevadas com esse banco de dados é mais adequada que com o HITRAN, que é obtido na temperatura de referência de 296 K.

A primeira versão da base de dados HITRAN (“*High resolution TRANSmision molecular absorption database*”) foi distribuída gratuitamente, utilizando-se fitas magnéticas de banda larga, em 1973, pelo Laboratório de pesquisas da Força Aérea de Cambridge e tem sido atualizada periodicamente através dos anos [Rothman et al., 1998, Rothman et al., 2005, Rothman et al., 2010]. As atualizações estão disponíveis na internet. A atual versão do HITRAN contém 47 diferentes espécies (moléculas) [Rothman et al., 2013], contra 42 espécies da versão apresentada anteriormente [Rothman et. al., 2010]. Por outro lado, o banco de dados mais recente do HITEMP (*High Temperature Molecular Spectroscopic Database*) apresenta parâmetros para cinco moléculas: H₂O, CO₂, CO, NO e OH [Rothman et al., 2010].

As Tabelas 3.1 e 3.2 a seguir, mostram uma comparação entre os parâmetros do HITEMP e HITRAN para os números de isótopos e de linhas espectrais para cada espécie e os principais parâmetros encontrados no banco de dos do HITEMP, respectivamente.

Tabela 3.1 – Comparação entre HITEMP e HITRAN [Rothman et al., 2010].

Molécula	Faixa Espectro (cm ⁻¹)	N isótopos (HITEMP 2010)	N linhas (HITEMP 2010)	N linhas HITRAN
H ₂ O	0 < η < 30000	6	111377777	69201
CO ₂	5 < η < 12785	7	11167618	3124792
CO	0 < η < 8465	6	115218	4477
NO	0 < η < 9274	3	105633	105079
OH	0 < η < 10268	3	40055	31976

Tabela 3.2 – Nomenclatura utilizada pelo banco de dados HITEMP.

Parâmetro	Descrição
Mol	Número da molécula
Iso	Número do isótopo
η	Número de onda no vácuo, cm ⁻¹
S	Intensidade, cm ⁻¹ /(molec cm ⁻²)
A	Coefficiente de Einstein, s ⁻¹
γ_{ar}	Alargamento da meia largura pelo ar, cm ⁻¹ /atm
γ_{self}	Alargamento da meia largura, cm ⁻¹ /atm
E	Energia do estado mais baixo, cm ⁻¹
n	Coefficiente de dependência de temperatura

A Figura 3.7 mostra espectros da seção transversal de absorção para CO₂ e H₂O. Os espectros foram obtidos na temperatura de 1000 K e para a pressão parcial de 0,1 atm e pressão total de 1 atm a partir do banco de dados HITEMP.

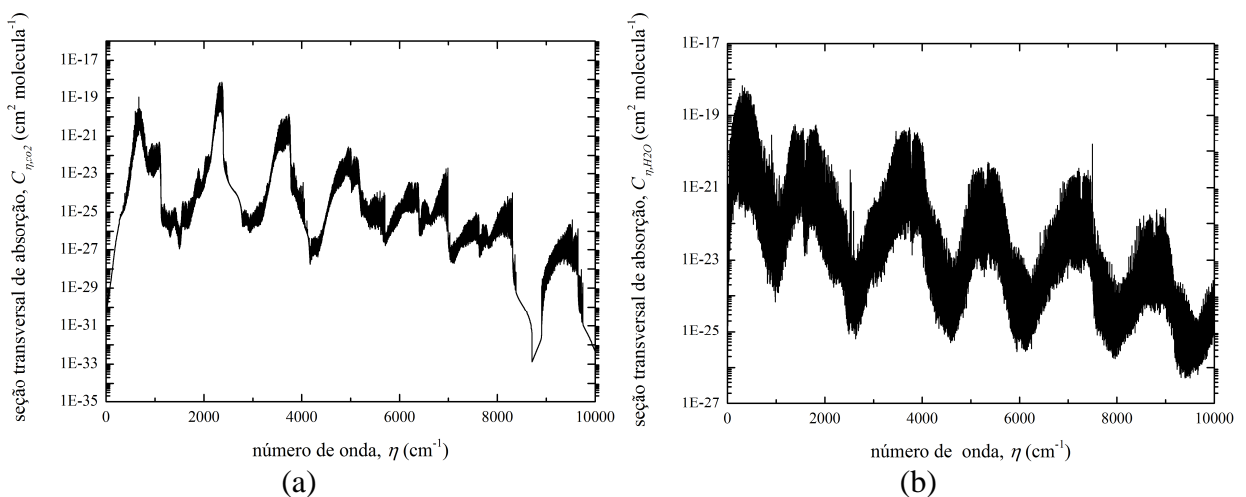


Figura 3.7 – Espectro da seção transversal do coeficiente de absorção para: (a) CO₂, (b) H₂O para temperatura de 1000K e pressão parcial de 0,1 atm.

3.10 Geração dos espectros de absorção para a solução LBL

Para obtenção da solução com o LBL o primeiro passo é a geração dos espectros de seção transversal de absorção (seção de choque transversal). Entretanto, a obtenção desses espectros requer a análise de alguns aspectos numéricos importantes. Um deles, e possivelmente mais importante, é se o número de pontos (NP) utilizados na geração dos $C\eta$ s é suficiente para uma resolução adequada dos espectros. O NP corresponde ao valor total de números de onda (η) que o espectro de seção transversal de absorção terá para o intervalo de $\eta = 0$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$.

A avaliação do NP é feita individualmente para cada gás de interesse, CO_2 , H_2O , diante do fato de que cada gás se comporta de maneira diferente. Essa avaliação foi realizada por Ziemniczak, 2014 onde foram gerados espectros de CO_2 e H_2O para valores de NP entre 150.000 a 400.000 para $T=1500\text{K}$ e $p_i= 0,5 \text{ atm}$. A avaliação da convergência foi obtida pelo cálculo da emitância total (Equação 3.9), com $pS= 3,0 \text{ atm m}$. Essa avaliação determinou que 150000 valores de NP são suficientes para geração dos espectros que correspondem a um $d\eta = 0,066 \text{ cm}^{-1}$.

3.10.1 Dependência das pressões parciais na obtenção dos coeficientes de absorção baseados nas pressões parciais

A Figura 3.8 ilustra o coeficiente de absorção baseado na pressão $\kappa_{p\eta, \text{H}_2\text{O}}$ calculado para duas pressões parciais $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ e $0,4 \text{ atm}$ para valores de números de onda dentro de uma faixa do espectro, considerando uma temperatura de $T=1200\text{K}$ e uma pressão total de $p=1,0 \text{ atm}$ para a espécie de H_2O . É possível observar que o coeficiente de absorção para o H_2O é dependente da pressão parcial a qual foi gerado.

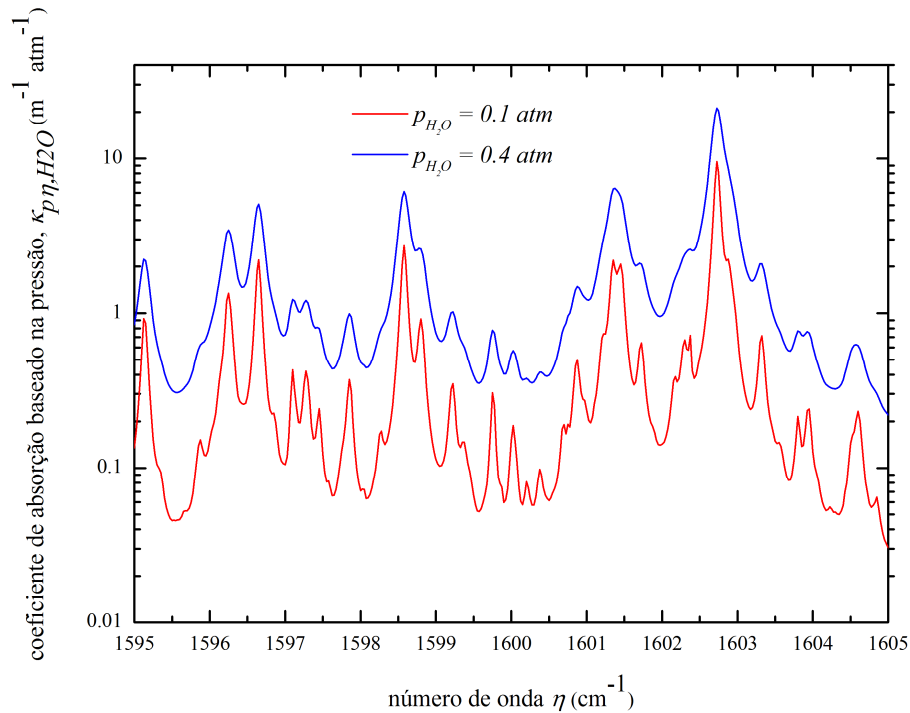


Figura 3.8 – Coeficiente de absorção baseado na pressão de H₂O para pressões parciais de 0,1 atm e 0,4 atm.

O mesmo é mostrado na Figura 3.9 para a espécie de CO₂. O coeficiente de absorção baseado na pressão $\kappa_{p\eta,CO_2}$ foi calculado para duas pressões parciais $p_{CO_2} = 0,05$ e $0,2$ atm para valores de número de onda dentro de uma faixa do espectro, considerando uma temperatura de $T=1200K$ e uma pressão total de $p=1,0$ atm. Diferentemente do comportamento da espécie de H₂O a espécie CO₂ não apresenta dependência da pressão parcial que foi gerado.

Essa independência da pressão parcial para o CO₂ do $\kappa_{p\eta}$ permite que o coeficiente de absorção $\kappa_{\eta,i} = \kappa_{p\eta,i} p_i$ seja calculado para apenas uma pressão parcial igual a 1.

A diferença no comportamento do H₂O e CO₂, provavelmente, se dá devido à diferença na estrutura da geometria molecular delas, uma vez que o CO₂ é uma molécula apolar com geometria linear e o H₂O é molécula polar com geometria angular.

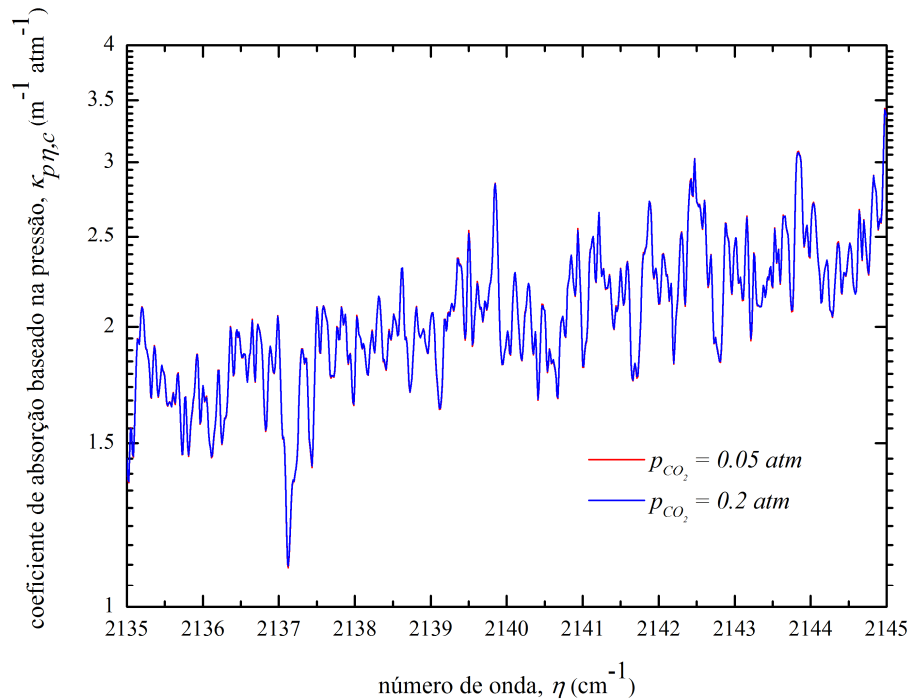


Figura 3.9 – Coeficiente de absorção baseado na pressão de CO_2 para pressões parciais 0,05 atm e 0,2 atm.

Para problemas onde o meio participante é composto por mais de uma espécie química, o coeficiente de absorção κ_η , no problema LBL pode ser calculado para a mistura das espécies participantes (CO_2 e H_2O), para cada número de onda, em função das pressões parciais de cada uma das espécies conforme

$$\kappa_\eta = \kappa_{p\eta,\text{CO}_2} p_{\text{CO}_2} + \kappa_{p\eta,\text{H}_2\text{O}} p_{\text{H}_2\text{O}} \quad (3.23)$$

3.10.2 Passo a passo para construção das *databases*

Os espectros de seção transversal de absorção para a solução do LBL foram então gerados para $\text{NP}=150000$, conforme recomendado em Ziemniczak, 2014, para a faixa de temperaturas de 200 K a 2200 K, com intervalo de temperatura de 100 K entre elas, totalizando 21 temperaturas. Foram gerados espectros para as moléculas de CO_2 , com pressão parcial de $p_{\text{CO}_2}=1$ atm e para a molécula de H_2O , com pressões parciais de $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,1$ atm e $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,2$ atm. O nitrogênio é considerado um gás inerte e não influencia nos cálculos de radiação térmica.

Para cada molécula, pressão parcial e conjunto de temperaturas (200 K – 2200 K) foi gerado um arquivo de texto com os valores de número de onda (η) e seus respectivos valores de seção transversal de absorção ($C\eta$) obtidos a partir do HITEMP. Esses arquivos são chamados de *database* ao longo do texto. Sendo assim, três *databases* foram empregadas no cálculo do método LBL: duas para a molécula de H₂O com pressões parciais de 0,1 atm e 0,2 atm e uma para CO₂ com pressão parcial de 1 atm.

A Tabela 3.3 a seguir, ilustra como esses arquivos estão configurados. A primeira coluna corresponde ao valor de número de onda, para o intervalo de $\eta = 0$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$, e as demais colunas aos valores de $C\eta$ para cada uma das 21 temperaturas correspondente ao η em que foram gerados. A partir desses parâmetros contidos na *database* são calculados os coeficientes de absorção, κ_η (Equação 3.23), que são utilizados para a solução da RTE no LBL.

Tabela 3.3 – Configuração da *database* gerada.

$\eta \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	$C\eta \text{ (T= 200K)}$	$C\eta \text{ (T= 300K)}$	$C\eta \text{ (T= 400K)}$	$C\eta \text{ (T= 500K)}$
0,16667	2,70947647E-24	1,99602691E-24	1,67090013E-24	1,65348263E-24
0,50000	1,82536477E-20	1,82393978E-20	1,82344427E-20	1,82408827E-20
0,83333	6,67427804E-25	2,64309576E-24	1,05918363E-23	2,59676842E-23
1,16667	4,45551000E-24	3,95086004E-24	3,89177266E-24	4,06938466E-24

Como visto o coeficiente de absorção $\kappa_{p\eta, c}$, é independente da pressão parcial da qual o espectro é gerado para a molécula de CO₂ e por isso, somente uma *database* com pressão parcial igual a 1 atm foi utilizada. Rememorando que nesse caso a pressão parcial é correspondente à fração molar da espécie.

3.10.3 Artificio matemático para construção da *database*

A maior dificuldade encontrada nas soluções para os modelos é a limitação da capacidade computacional. Uma solução com o método LBL via *Fluent* considerando as *databases* com o valor total de NP (150000) não é factível, no momento, com a capacidade computacional disponível. A partir dessa limitação uma redução no valor de número de pontos das *databases* foi necessária. A metodologia para essa redução consiste gerar *databases* menores a partir da *database* para o NP = 150000, como as que serão utilizadas na obtenção dos resultados mostrados mais adiante nesse trabalho.

Essa redução é realizada através de uma média aritmética dos valores contidos em intervalos x (Equação 3.24) para os parâmetros η e $C\eta$ contidos nas *databases*. Assim,

$$x = \frac{NP_{total}}{NP_{reduzido}} \quad (3.24)$$

$$C_{\eta_{reduzido}} = \frac{\sum_{i=1}^x C_{\eta,i}}{x} \quad (3.25)$$

Por exemplo: uma *database* com NP reduzido a 30000 tem-se que $x = 5$, dessa forma a cada intervalo de 5 valores de η e $C\eta$ a média é calculada e um novo valor para η e $C\eta$ é obtido. A Figura 3.10 ilustra espectros da seção transversal de absorção para CO₂ na temperatura de 1100 K e para a pressão parcial de 0,1 atm e pressão total de 1 atm para o NP_{total} com 150000 mil pontos e para o NP_{reduzido} de 30000. É possível observar que o comportamento com a redução é muito próximo ao espectro considerando todos os pontos disponíveis.

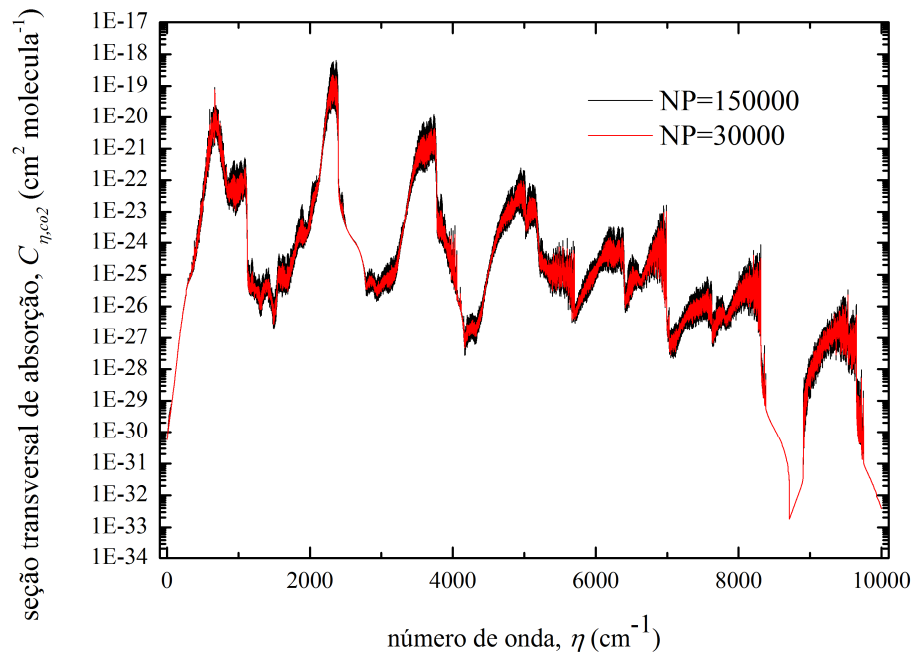


Figura 3.10 – Espectro da seção transversal do coeficiente de absorção para CO₂ para temperatura de 1100K e pressão parcial de 0,1 atm, para NP=150000 e NP= 30000

Uma nova abordagem de redução para as *databases* foi avaliada. Essa abordagem realiza uma média ponderada, utilizando a função de Planck como peso no intervalo x . Dessa forma os valores para C_η reduzido são obtidos pela Equação 3.26 a seguir

$$C_{\eta_{\text{reduzido}}} = \frac{\sum_{i=1}^x C_{\eta,i} I_{\eta,b} x_i}{\sum_{i=1}^x I_{\eta,b} x_i} \quad (3.26)$$

onde $I_{\eta,b}$ é a distribuição espectral de Planck, que corresponde a Equação 3.1, já apresentada, em função de cada valor de η dentro do intervalo x .

Uma comparação com os resultados obtidos com as *databases* reduzidas pela Equação 3.25 e pela Equação 3.26 para um problema de placas planas 1D foi resolvida. Entretanto, a nova abordagem não apresentou uma diferença representativa nos resultados, com desvios nos resultados entre as duas abordagens menores de 0,01%. Portanto, as *databases* utilizadas no decorrer deste trabalho foram obtidas pela redução apresentada na Equação 3.25. O problema para a placa plana, citado, será abordado em mais detalhes nos capítulos seguintes. No Apêndice A, são apresentados os resultados para as duas abordagens de redução das *databases*.

3.11 Modelos espectrais

Como falado anteriormente, a solução da RTE demanda uma integração espectral (ou seja, uma integração em relação ao número de onda), o que acaba tornando-se uma tarefa bastante complexa para meios participantes constituídos, por exemplo, de CO_2 e H_2O , devido ao comportamento irregular do coeficiente de absorção em relação ao número de onda de cada espécie. O comportamento espectral do coeficiente de absorção pode ser tratado através da integração linha-por-linha (LBL), no qual a RTE é resolvida em todos os números de onda que se têm, proporcionando resultados com boa exatidão. Porém, esse modelo exige esforços computacionais muito grandes tornando muitas vezes inviável sua solução em problemas muito complexos de engenharia.

Desse modo, vários modelos espectrais de gases têm sido e veem sendo desenvolvidos. Estes modelos acabam por simplificar o problema da enorme quantidade de

informações espectrais, reduzindo substancialmente o tempo computacional. Vários modelos espectrais podem ser encontrados na literatura, e a seguir são citados alguns destes modelos.

A radiação térmica pode ser modelada assumindo a aproximação de meios opticamente finos (OTA) para a transferência radiativa entre os gases quentes da combustão e a vizinhança. Este modelo é utilizado devido a sua simplicidade, fácil implementação e baixo esforço computacional [Bedir et al., 1997]. A emissão de radiação é o único fenômeno levado em consideração. A absorção e o espalhamento são negligenciados. Essa aproximação implica que para cada ponto do domínio computacional, a radiação é isotrópica e a transferência radiativa dos gases com a vizinhança (considerada corpo negro) ocorre sem qualquer interferência do meio participante. A RTE não precisa ser resolvida para definir o termo fonte de perda de calor por radiação na equação da energia, uma vez que o termo fonte radiativo depende somente das condições locais e da temperatura da vizinhança. A acurácia do método OTA em condições onde a reabsorção da radiação é importante, acaba ficando comprometida, como em casos onde os níveis de fuligem na chama são altos [Hoerlle, 2015].

O modelo espectral mais simples é o de gás cinza (GG), no qual o coeficiente de absorção é tratado como independente do número de onda. Apesar da simplicidade com que ele resolve a dependência espectral o modelo de gás cinza ainda é largamente utilizado em problemas que envolvem transferência de calor por radiação [Xue et al., 2001; Sijerčić et al., 2001; Desmukh et al., 2007; Cassol et al., 2012].

Outro modelo amplamente utilizado com um nível de detalhamento baixo é o da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG). Foi proposto por Hottel e Sarofim, 1967, e aprimorado por Modest, 1991, o qual demonstrou que o modelo pode ser utilizado, juntamente com qualquer método, para a solução da equação de transferência de calor radiativa. O modelo utiliza o espectro inteiro considerando apenas algumas bandas com coeficientes de absorção uniformes, e cada banda corresponde a um gás cinza. Os coeficientes de ponderação correspondem às frações de energia do corpo negro na região do espectro onde os gases cinza estão localizados. As correlações apresentadas na literatura, em sua maioria, são para misturas de vapor de água e dióxido de carbono em pressões parciais pré-estabelecidas [Taylor e Foster, 1974; Smith, 1982; Galarça et al., 2008; Kangwanpongpan et al., 2012; Dorigon et al., 2013; Cassol, 2013; Centeno et al., 2018]. Correlações para espécies individuais de CO_2 e H_2O [Cassol et al., 2014] para a espécie de CO [Brittes et al., 2017]. Correlações para o modelo WSGG para pressões totais maiores que 1 atm [Coelho e França, 2018].

Modelos com um nível de detalhamento maior como o SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais), o modelo FSCK (distribuição- k que considera todo o espectro), e o modelo CW (número de onda cumulativo), similarmente vem sendo desenvolvidos ao longo dos anos.

O método SLW proposto por Denison e Webb, 1993a, inclui a obtenção de fatores de ponderação dos gases cinza através da função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (ALB). Foi aplicado inicialmente para um meio participante composto apenas por H₂O e posteriormente, mais gases participantes foram incluídos [Denison e Webb, 1995a e Denison e Webb 1995b]. A solução de problemas utilizando o SLW pode ser encontrada em Solovjov e Webb, 2000, 2001 e 2011,

Modest e Zhang, 2002, apresentaram o modelo FSCK, baseado na teoria do k -correlacionado e da distribuição- k , o qual pode ser encontrado em vários trabalhos na literatura, como em Wang e Modest, 2006, que aplicaram o modelo junto com o método de Monte Carlo em soluções tridimensionais com uma redução de uso de memória e tempo computacional.

O modelo CW foi o último modelo espectral, dentre os citados, a ser desenvolvido por Solovjov e Webb, 2001. O método resolve a equação da transferência radiativa em meios uniformes e não uniformes, e baseia-se em uma função gerada quando uma seção transversal constante corta o espectro. Nos pontos em que o espectro é menor que essa seção transversal, o modelo gera uma reta crescente e, nos pontos em que o espectro é maior o modelo gera uma reta constante, ocasionando uma função não decrescente. De acordo com os autores, possui uma excelente aproximação no valor do termo fonte radiativo. Porém o modelo CW não determina o fluxo de calor radiativo eficientemente, pois o modelo não é conservativo, Galarça et al., 2011, resolveram essa dificuldade na determinação do fluxo de calor radiativo e denominaram a correlação para o modelo como MCW (número de onda cumulativo modificado), entretanto o tempo computacional envolvido na solução acabou tornando-se muito elevado, fator que restringe sua utilização.

A seguir são apresentadas, em maiores detalhes, as abordagens que serão empregadas no presente trabalho: a integração linha-por-linha (LBL), e o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG).

3.11.1 Integração Linha-por-Linha

O método de integração linha por linha envolve o uso de dados espectrais. Os parâmetros de um modelo aleatório-estatístico são calculados a partir das linhas de absorção obtidas pela espectroscopia. Se houvessem dados espectrais totalmente completos sobre as moléculas, a integração linha-por-linha (LBL) seria considerada um método exato.

A integração linha-por-linha resolve a equação de transporte considerando a variação do coeficiente de absorção para diferentes temperaturas e concentrações encontradas nas misturas de gases resultantes da combustão. Dessa forma, a equação a ser resolvida para cada direção S considerando um meio sem espalhamento corresponde a Equação 3.10 vista na Seção 3.6.

Esse método fornece resultados precisos e, portanto, é usado como solução *benchmark* na validação espectral de modelos de gases.

3.11.2 Soma-Ponderada-de- Gases-Cinza - WSGG

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) é um método que não envolve dados espectrais detalhados, por isso, é classificado como um método global. Os coeficientes de absorção dos gases cinza e as correlações de ponderação são ajustados a partir de dados tabelados de emitância total, que podem ser obtidos de resultados experimentais ou calculados utilizando-se modelos espectrais mais complexos [Siegel e Howell, 2002].

O modelo WSGG substitui a integração das propriedades no espectro pelo somatório de um pequeno número de gases cinza a fim de simular as propriedades dos gases reais. Assim, o espectro se divide em regiões onde o coeficiente de absorção pode ser considerado constante. A Figura 3.10 representa um meio com três gases cinza e com janelas transparentes, na qual o coeficiente de absorção é considerado zero nas regiões mostradas. O método da soma-ponderada-de-gases-cinza foi proposto por Hottel e Sarofin, 1967.

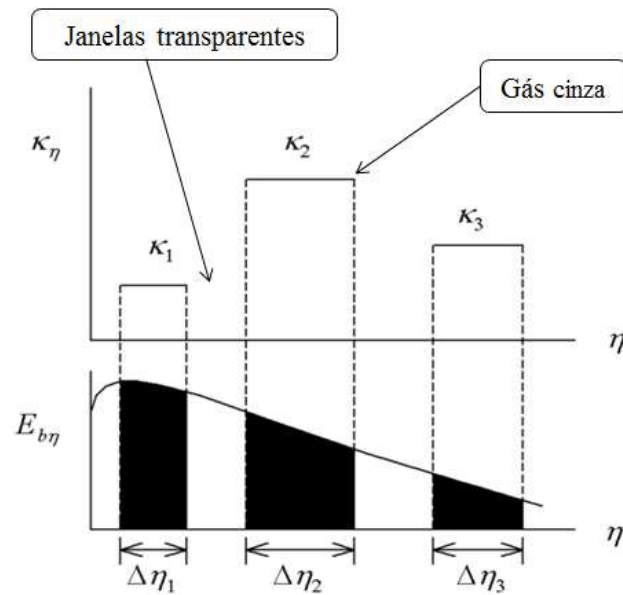


Figura 3.11 – Representação de um meio participante composto por três gases cinzas para o modelo WSGG [adaptado de Maurense et al., 2008].

A partir deste modelo, pode-se demonstrar que a integração da emitância espectral, para o cálculo da emitância total ao longo de um caminho, resulta em:

$$\varepsilon(S) = \sum_{i=1}^n a_i(T) [1 - \exp(-\kappa_{pi} PS)] \quad (3.27)$$

onde κ_{pi} é o coeficiente de absorção por unidade de pressão ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1}$) e a_i é o correspondente ao coeficiente de ponderação para o i -ésimo gás cinzas. O coeficiente de ponderação depende apenas da temperatura do gás. Para uma mistura gasosa, P é a soma das pressões parciais de cada espécie química. Fisicamente, o fator de ponderação a_i corresponde à fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza κ_i .

Smith et al., 1982, propuseram que os coeficientes de ponderação a_i fossem representados por um polinômio

$$a_i(T) = \sum_{j=1}^n b_{i,j} T^{j-1} \quad (3.28)$$

onde $b_{i,j}$ corresponde aos coeficientes polinomiais. Para n gases cinza e ordem de polinômio $n-1$, tem-se $I(n+1)$ coeficientes a serem determinados.

Smith et al., 1982, obtiveram coeficientes polinomiais para ajustar valores de emitância total de mistura gasosa de vapor de água e dióxido de carbono para temperaturas de 600 K a 2400 K, e produto de pressão parcial pelo caminho variando de 0,001 atm.m até 10 atm.m.

Denison e Webb, 1993b, mostraram que o método WSGG pode ser usado na equação de transferência radiativa conforme a seguir:

$$\frac{dI_i}{dS} = -\kappa_i I_i + \kappa_i a_i I_b \quad (3.29)$$

onde κ_i e I_i são os coeficiente de absorção e a intensidade de radiação do gás cinza i . Para mistura de H₂O e CO₂ tem-se; $\kappa_i = \kappa_{p,i}(p_{H_2O} + p_{CO_2})$.

As Tabelas 3.4 e 3.5 apresentam os coeficientes para o modelo WSGG obtidos por Dorigon et al., 2013, o qual utilizou um ajuste das curvas de emitância total em relação às calculadas a partir da integração LBL, com linhas espectrais baseadas no banco de dados HITEMP2010. Os coeficientes foram obtidos considerando quatro gases cinza para uma mistura de dióxido de carbono e vapor de água para razões de pressão parcial $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$ e $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$. A Tabela 3.6 apresenta coeficientes para o modelo WSGG obtido por Centeno et al., 2018 para a razão de pressão parcial $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,5$.

As correlações são validas para o intervalo de temperaturas de $400 \text{ K} \leq T \leq 2500 \text{ K}$ e $0,001 \text{ atm.m} \leq Ps \leq 10 \text{ atm.m}$. o subíndice i representa o número de gases, κ_{pi} os valores dos coeficientes de absorção por unidade de pressão e b_{ji} os coeficientes polinomiais.

Tabela 3.4 – Coeficientes para o modelo WSGG com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$ [Dorigon et al., 2013].

j	$\kappa_{p,i}(\text{m}^{-1}\text{atm}^{-1})$	$b_{i,1}$	$b_{i,2} (\text{K}^{-1})$	$b_{i,3} (\text{K}^{-2})$	$b_{i,4} (\text{K}^{-3})$	$b_{i,5} (\text{K}^{-4})$
1	0,1873	$7,197 \times 10^{-2}$	$8,724 \times 10^{-4}$	$-9,690 \times 10^{-7}$	$4,651 \times 10^{-10}$	$-7,917 \times 10^{-14}$
2	1,723	$1,107 \times 10^{-1}$	$3,397 \times 10^{-4}$	$-2,467 \times 10^{-7}$	$4,647 \times 10^{-11}$	$-1,039 \times 10^{-15}$
3	12,480	$2,091 \times 10^{-1}$	$-6,423 \times 10^{-5}$	$-3,200 \times 10^{-8}$	$1,718 \times 10^{-10}$	$-2,105 \times 10^{-15}$
4	144,9	$7,092 \times 10^{-2}$	$6,586 \times 10^{-5}$	$-1,278 \times 10^{-7}$	$5,577 \times 10^{-11}$	$-7,709 \times 10^{-15}$

Tabela 3.5 – Coeficientes para o modelo WSGG com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$ [Dorigon et al., 2013].

j	$\kappa_{p,i}(\text{m}^{-1}\text{atm}^{-1})$	$b_{i,1}$	$b_{i,2} (\text{K}^{-1})$	$b_{i,3} (\text{K}^{-2})$	$b_{i,4} (\text{K}^{-3})$	$b_{i,5} (\text{K}^{-4})$
1	0,192	$5,617 \times 10^{-2}$	$7,844 \times 10^{-4}$	$-8,563 \times 10^{-7}$	$4,246 \times 10^{-10}$	$-7,440 \times 10^{-14}$
2	1,719	$1,426 \times 10^{-1}$	$1,795 \times 10^{-4}$	$-1,077 \times 10^{-8}$	$-6,972 \times 10^{-11}$	$1,774 \times 10^{-14}$
3	11,370	$1,362 \times 10^{-1}$	$2,574 \times 10^{-4}$	$-3,711 \times 10^{-7}$	$1,575 \times 10^{-10}$	$-2,267 \times 10^{-14}$
4	111,016	$1,222 \times 10^{-1}$	$-2,327 \times 10^{-5}$	$-7,492 \times 10^{-8}$	$4,275 \times 10^{-11}$	$-6,608 \times 10^{-15}$

Tabela 3.6 – Coeficientes para o modelo WSGG com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,5$ [Ceteno et al., 2018].

j	$\kappa_{p,i}(\text{m}^{-1}\text{atm}^{-1})$	$b_{i,1}$	$b_{i,2} (\text{K}^{-1})$	$b_{i,3} (\text{K}^{-2})$	$b_{i,4} (\text{K}^{-3})$	$b_{i,5} (\text{K}^{-4})$
1	0,178	$6,345 \times 10^{-2}$	$8,077 \times 10^{-4}$	$-8,900 \times 10^{-7}$	$4,337 \times 10^{-10}$	$-7,472 \times 10^{-14}$
2	1,501	$1,042 \times 10^{-1}$	$3,102 \times 10^{-4}$	$-1,904 \times 10^{-7}$	$1,974 \times 10^{-11}$	$3,091 \times 10^{-15}$
3	9,510	$1,864 \times 10^{-1}$	$4,624 \times 10^{-5}$	$-1,318 \times 10^{-7}$	$5,402 \times 10^{-11}$	$-7,232 \times 10^{-15}$
4	110,348	$1,071 \times 10^{-1}$	$2,209 \times 10^{-5}$	$-1,056 \times 10^{-7}$	$4,986 \times 10^{-11}$	$-7,007 \times 10^{-15}$

3.11.3 Soma-ponderada-de-gases-cinzas da sobreposição parcial (NCR-WSGG)

Cassol, 2013, propôs uma nova metodologia de solução da equação da transferência radiante através do modelo WSGG. Essa nova proposta possibilita a implementação de misturas das espécies químicas com diferentes razões de misturas ao longo domínio de cálculo.

O novo método NCR-WSGG da sobreposição parcial, para a solução de misturas de gases envolve um sistema de equações. A primeira equação a ser considerada é a da integração da equação de transporte radiativo (RTE), Equação 3.10. Considera-se inicialmente que na solução da RTE para uma mistura de gases a intensidade total é a soma das intensidades parciais dos gases, nesse caso CO_2 , H_2O . A solução é obtida como:

$$\left(\frac{dI_i}{dS}\right)_M = \left(\frac{dI_i}{dS}\right)_{H_2O} + \left(\frac{dI_i}{dS}\right)_{CO_2} \quad (3.30)$$

onde M representa a mistura. Para representar a intensidade dos gases utilizados tem-se:

$$\int_{\Delta\eta_i} \left(\frac{dI_\eta}{dS}\right)_{H_2O} d\eta = - \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,H_2O} I_\eta d\eta + \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,H_2O} I_{\eta,b} d\eta \quad (3.31)$$

$$\int_{\Delta\eta_i} \left(\frac{dI_\eta}{dS} \right)_{CO_2} d\eta = - \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,CO_2} I_\eta d\eta + \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,CO_2} I_{\eta,b} d\eta \quad (3.32)$$

Para a solução da integral da intensidade, é necessário estabelecer uma relação entre a intensidade total da mistura e a intensidade de cada fração de gás de forma individual. Sabendo-se que o peso a_i representa uma fração de emissão referente ao corpo negro, tem-se então para a intensidade de radiação absorvida [Cassol, 2013].

Assim, assume-se que a intensidade para cada espécie química terá uma relação com a intensidade da mistura:

$$\frac{\int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta}{\int_{\Delta\eta_i,H_2O} I_\eta d\eta} \cong \frac{a_{M,i}}{a_{H_2O,i}} \quad \therefore \quad \int_{\Delta\eta_i,H_2O} I_\eta d\eta \cong \int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta \frac{a_{H_2O,i}}{a_{M,i}} \quad (3.34)$$

$$\frac{\int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta}{\int_{\Delta\eta_i,CO_2} I_\eta d\eta} \cong \frac{a_{M,i}}{a_{CO_2,i}} \quad \therefore \quad \int_{\Delta\eta_i,CO_2} I_\eta d\eta \cong \int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta \frac{a_{CO_2,i}}{a_{M,i}} \quad (3.35)$$

Combinando-se a Equação 3.30 com as Eqs. 3.34 e 3.35 e rearranjando de acordo com a intensidade radiante da mistura, tem-se:

$$\left(\frac{dI_i}{dS} \right)_M = - \left(\kappa_{H_2O,i} \frac{a_{H_2O,i}}{a_{M,i}} + \kappa_{CO_2,i} \frac{a_{CO_2,i}}{a_{M,i}} \right) \int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta + (\kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i}) I_b \quad (3.36)$$

Como o valor de $a_{M,i}$ é desconhecido, não é possível uma solução direta da Equação 3.36. Pelo sistema de equações estabelecido, propõe-se que a solução dos coeficientes da mistura deve ser equivalente aos valores das frações de cada espécie química, ou seja:

$$\kappa_{M,i} a_{M,i} \cong \kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i} \quad (3.37)$$

A absorção da mistura é dada pela soma da absorção de cada espécie química:

$$\kappa_{M,i} = \kappa_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} \quad (3.38)$$

Portanto:

$$a_{M,i} = \frac{\kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i}}{\kappa_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i}} \quad (3.39)$$

A partir dos valores para o peso da mistura obtidos pela equação anterior, calcula-se o valor da absorção, para que seja obtida uma correção deste valor. A correção do valor da absorção é dada por:

$$\kappa_{M,i} = \frac{a_{M,i} \kappa_{H_2O,i}}{a_{H_2O,i}} + \frac{a_{M,i} \kappa_{CO_2,i}}{a_{CO_2,i}} \quad (3.40)$$

Pela utilização da Equação 3.40, quando houver uma única espécie química presente, a seguinte relação será satisfeita:

$$a_{H_2O,i} \kappa_{M,i} = a_{M,i} \kappa_{H_2O,i} \quad \therefore \quad a_{CO_2,i} \kappa_{M,i} = a_{M,i} \kappa_{CO_2,i} \quad (3.41)$$

Com a Equação 3.41 os pesos e absorções da mistura se tornam equivalentes aos pesos e absorções da espécie química de forma individual, não sendo necessárias modificações na formulação em situações que envolvam a presença de, por exemplo, uma única espécie química.

3.12 Modelos espaciais para solução da Equação de Transferência Radiativa-RTE

Soluções analíticas exatas para a RTE são extremamente difíceis, e soluções explícitas são praticamente impossíveis, exceto para casos muito simples. Pesquisas envolvendo transferência de calor por radiação em meios participantes geralmente procedem em duas

direções: exatas (analíticas e numéricas) aplicadas em situações idealizadas, e métodos de soluções aproximada para casos mais reais.

Modest, 2003, dividiu em cinco categorias os vários aspectos que tornam difícil a solução da RTE:

- Geometria: os problemas podem ser unidimensionais, bidimensionais, ou tridimensionais. A grande maioria dos problemas encontrados são unidimensionais e para casos simples envolvendo placas planas paralelas.
- Campo de temperatura: o caso mais comum é para o perfil de temperatura do meio participante isotérmico e conhecido. Porém, para casos mais complexos, a transferência de calor por radiação é combinada com a condução e/ou convecção, portanto o perfil de temperatura é não uniforme e desconhecido.
- Espalhamento: a solução de problemas de radiação é significativamente simplificada se o meio não espalha. No entanto quando o espalhamento é considerado, geralmente são isotrópicos (problemas considerando espalhamento anisotrópico são escassos e ainda limitados a problemas lineares).
- Propriedades radiativas: a maioria dos meios participantes possuem características não-cinzas (dependência espectral), e dependem da temperatura e da concentração de espécies.

Os métodos mais utilizados em trabalhos envolvendo transferência de calor por radiação na solução espacial da RTE são o método de harmônicas esféricas, método de ordenadas discretas (DOM – *discrete ordinates method*); método das zonas; método de Monte Carlo; e método de transferência discreta (DTRM-*discrete transfer radiation model*).

O método das harmônicas esféricas, a partir de uma solução aproximada da RTE, transforma a equação em um conjunto de equações diferenciais parciais. O DOM, assim como o método das harmônicas esféricas, utiliza aproximações direcionais, enquanto o método das zonas utiliza aproximações espaciais com subdivisões da cavidade em sub-volumes finitos isotérmicos. Já o método de Monte Carlo pode ser descrito como um método estatístico, consiste em conceitos probabilísticos para modelar eventos estocásticos, tais como emissão, espalhamento, reflexão e absorção de fótons. O método apresenta uma formulação mais complexa do que outros métodos, portanto, para problemas mais simples acaba demandando um esforço computacional desnecessário. O método de transferência discreta é uma combinação de características dos métodos das ordenadas discretas, das zonas e Monte Carlo [Modest, 2003]. O modelo apresenta algumas vantagens como simplicidade, a precisão da

solução pode ser aumentada com um maior número de raios, e é aplicável para uma ampla faixa de espessuras ópticas [Ansys, 2011a].

De um modo geral não existe um único método que possa ser considerado o melhor. A escolha por um dos métodos depende das características e exigências do problema a ser resolvido. Entretanto vários estudos onde a radiação térmica é avaliada recomendam o método das ordenadas discretas para solução espacial da RTE: [Coelho, 2007; Habibi, et al., 2007; Bidi et al., 2008; Prieler et al., 2014].

A próxima seção explica o método de solução da RTE utilizado no presente trabalho: o método das ordenadas discretas.

3.12.1 Método das ordenas discretas – DOM

O método das ordenadas discretas baseia-se em uma representação discreta da dependência direcional da intensidade radiante. A solução para o problema de transporte é encontrada resolvendo a equação de transferência radiativa para um conjunto de direções discretas que totalizam o ângulo sólido 4π sr. A RTE é escrita para cada ordenada direcional e seus termos integrais são substituídos por quadraturas numéricas somadas para todas as direções discretas [Modest, 2003].

Ele também é conhecido como aproximação S_N , onde o N representa a ordem da aproximação (número de valores discretos de cossenos diretores considerados). Em geral, o número total de direções ordenadas, M , está relacionado à ordem da aproximação, N , através da relação $M = 2^d N(N+2)/8$, onde d representa a dimensão do problema. Maiores detalhes sobre o DOM são encontrados em Modest, 2003.

Para problemas multidimensionais, o método das ordenadas discretas resulta em um conjunto de equações diferenciais parciais de primeira ordem, que geralmente devem ser resolvidos numericamente. Para casos bi e tridimensionais, a discretização da equação de transferência de calor por radiação para uma dada direção conduz a uma equação algébrica que relaciona a intensidade da radiação em um nó da malha com a intensidade de radiação nos nós vizinhos, sendo que essa condição é uma das principais características do método [Cassol, 2013].

Alguns exemplos de trabalhos em que o a solução da RTE foi realizada através do método das ordenadas discretas utilizando CFD em condições laminares são Abdul-Sater e Krishnamoorthy 2013; Yin, et al., 2011; Colomer, et al., 2004; Colomer, et al., 2007; Garten,

et al., 2015, tendo esse último realizado estudo utilizando OpenFOAM, Em relação a trabalhos empregando o método em casos turbulentos podem ser citados Habibi, et al., 2007; Coelho, 2004; Bidi et al., 2008.

O método das ordenadas discretas resolve a RTE para um número finito de ângulos sólidos, cada um associado a uma direção vetorial s num sistema cartesiano (x, y, z) . Cada octante do espaço angular 4π em qualquer localização espacial é discretizado em $N_\theta N_\phi$ ângulos sólidos. Os ângulos são θ e ϕ , denominados ângulo polar e azimutal, respectivamente, são medidos em relação ao sistema cartesiano (x, y, z) . Para cálculos bidimensionais, somente quatro octantes são resolvidos devido à simetria totalizando $4N_\theta N_\phi$. Maior detalhamento é disponível em *Ansys* (2011b).

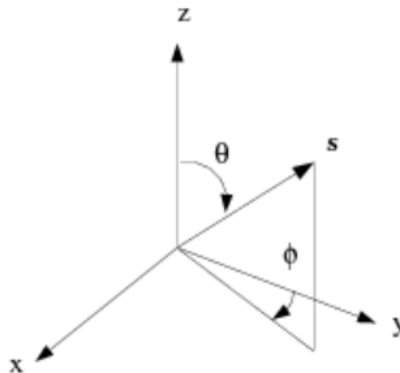


Figura 3.12 – Sistema de coordenadas angulares [Ansys, 2011b]

Os próximos capítulos mostram como os modelos, apresentados até aqui, foram implementados, tanto no cálculo da combustão como para o cálculo da radiação térmica. Os modelos WSGG e NCR-WSGG assim como o método LBL foram empregados para a solução espectral do problema. A solução espacial da RTE foi obtida através do método DOM. O problema proposto também é descrito em detalhes ao longo dos próximos capítulos.

4 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

A caracterização do problema físico investigado e os dados experimentais utilizados para comparação com o problema numérico são mostrados na Seção 4.1. Uma breve discussão sobre os efeitos da diluição no combustível é apresentada na Seção 4.2. Na Seção seguinte, 4.3, são apresentados o domínio computacional, as condições de contorno e as propriedades físicas do problema investigado.

4.1 Caracterização do problema

O problema estudado compreende uma série de chamas laminares não pré-misturadas de metano com diluição na corrente de combustível por dióxido de carbono ou nitrogênio. Machado, 2015, realizou um estudo experimental para uma série de chamas laminares não pré-misturadas de metano puro ou metano diluído no qual obteve valores de comprimento de chama, fluxo de calor radiativo e fração radiante. As medições foram realizadas para diferentes configurações de chamas: chamas de potência constante onde o diluente é acrescido sem alteração na vazão do metano; chamas de vazão constante onde o diluente é acrescido com decréscimo na vazão do combustível mantendo a vazão total constante e chamas de diluição constante.

No presente trabalho a série de chamas com potência constante (vazão de combustível, igual a 50L/min, PC0050), apresentadas por Machado, 2015, foram simuladas computacionalmente para diferentes porcentagens de diluição de CO₂ e N₂. Esses dados experimentais foram os utilizados como comparação para as simulações realizadas via CFD.

4.1.1 Medidas experimentais

A geometria adotada nas simulações baseia-se em um queimador Santoro [Santoro et al., 1983] o qual é utilizado na estabilização de chamas não pré-misturadas para realização de medições de fração volumétrica de fuligem por diferentes técnicas. O queimador é composto por um tubo interno de 11,11 mm de diâmetro, e 12,7 mm de diâmetro externo onde é injetado o combustível. Um tubo externo de 101,6 mm de diâmetro interno e 107,9 mm de

diâmetro externo formando um canal anular destinado ao escoamento paralelo (*coflow*) de ar atmosférico e é utilizado para estabilizar a chama e fornecer o oxidante para a reação, de acordo com Figura 4.1.

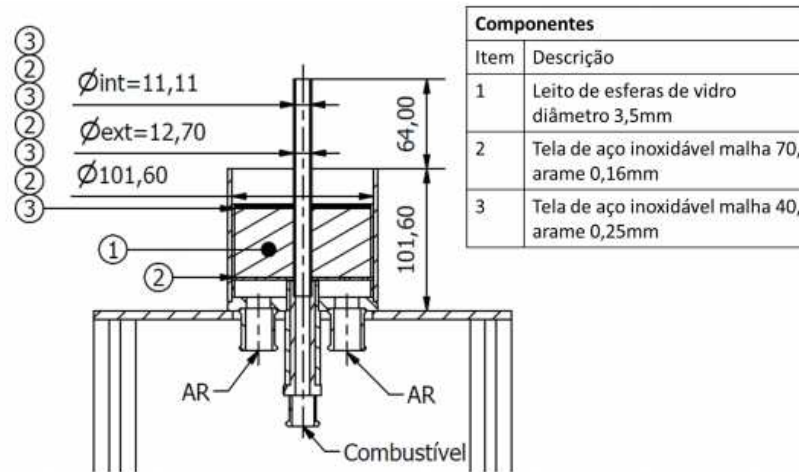


Figura 4.1 – Vista em corte do queimador Santoro adaptado [Machado, 2015].

Para fins práticos das medições experimentais do fluxo de calor radiativo na região abaixo da saída do injetor, o duto injetor de combustível foi prolongado 60 mm em relação ao original proposto por Santoro et al., 1983.

Machado, 2015, obteve a distribuição do fluxo de calor radiativo e o comprimento de chama visível através de uma série de medições em diversas posições paralelas ao eixo da chama. As medições foram obtidas desde regiões abaixo do ponto onde o combustível é injetado até regiões após o topo da chama. O fluxo de calor radiativo foi obtido a uma distância radial, R , em relação ao eixo da chama, em diversas alturas, Z , em relação ao bico injetor. Um esquema da banca experimental pode ser visto na Figura 4.2.

Um transdutor de fluxo de calor do tipo Schmidt-Boelter modelo MEDTHERM 64-0,5-20/ZnSeW-1C-150 foi utilizado nas medições experimentais. Uma camada de tinta, com absorção aproximadamente constante para uma ampla faixa de número de onda é utilizada sobre a superfície que incide a radiação no sensor. De acordo com MEDTHERM CORPORATION, 2003, os sensores do tipo Schmidt-Boelter são transdutores de fluxo capazes de produzir uma tensão elétrica proporcional ao fluxo de calor radiativo incidente. O sinal elétrico é convertido em um valor de fluxo radiativo com o uso de uma constante de calibração do sensor.

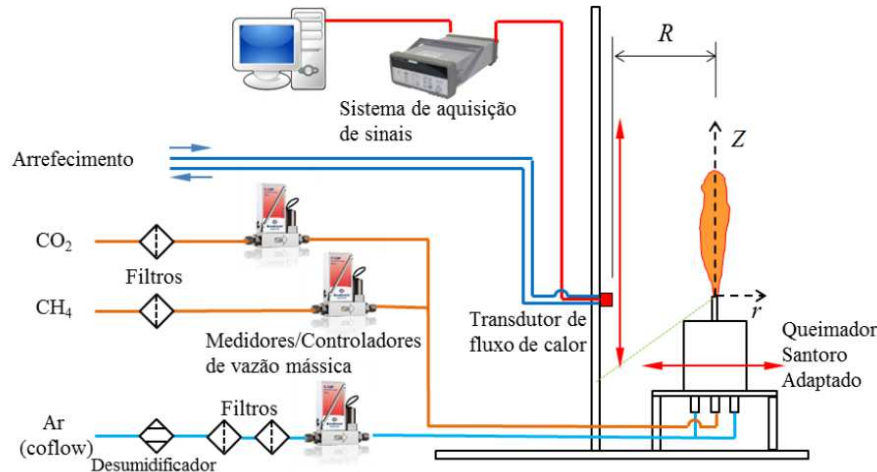


Figura 4.2 – Esquema construtivo da bancada experimental [Machado, 2015].

O transdutor do calor por radiação foi calibrado pelo fabricante com um simulador de corpo negro, e apresenta incerteza de 3% do sinal de resposta, com confiabilidade de 95% e repetibilidade de 1%. O sistema de aquisição dos sinais utilizado é da marca Agilent, modelo 34972^A. A incerteza associada ao sistema de aquisição é de 0,003% da leitura mais 0,0035% da faixa de medição utilizada, 100 mV.

Machado 2015, para a obtenção da fração radiante utilizou a abordagem sugerida por Houf e Schefer, 2007, onde os fluxos radiativos são integrados ao longo de uma superfície virtual em torno da chama. Essa superfície onde são medidos os fluxos pode ser considerada como um cilindro de raio R concêntrico ao eixo da chama. Assim, a fração radiante é obtida por

$$X_r = \frac{2\pi R \Delta y}{\dot{m} PCI} \sum_{i=1}^n q_R'' \quad (4.1)$$

onde Δy é a diferença entre as posições onde o fluxo radiativo é medido, n o número de medidas realizadas, \dot{m} a vazão de combustível e PCI seu poder calorífico inferior.

O tratamento das incertezas é mostrado em Machado et al., 2014. Maiores detalhes sobre o procedimento experimental e equipamentos, além de dados completos de medições de fluxo radiativo e comprimento de chama, podem ser encontrados em Machado, 2015.

4.2 Diluição do combustível

A diluição dos reagentes é uma maneira simples de intervir nos parâmetros da combustão. Quando injetados na corrente do combustível exercem influência nas características geométricas da chama como o comprimento visível da chama. Segundo Turns et al., 1993, a utilização de combustíveis diluídos com nitrogênio faz com que o comprimento visível de chama seja reduzido quando comparado a chama de combustível puro de mesma vazão, isso porque a quantidade de combustível presente para a reação é reduzida com o aumento da diluição.

Em casos onde se deseja manter a potência da chama constante a diluição pode ser realizada com a adição de gás inerte sem alterar a vazão de combustível. Nessa condição, para chamas laminares de metano com até sessenta por cento de diluição de nitrogênio em massa (até 35% em volume), o comprimento da chama não sofre alterações significativas [Turns et al., 1993].

O nitrogênio pode ser modelado com um gás inerte, isto é, como um gás que não participa das reações químicas envolvidas, como modelado nesse trabalho. Entretanto, em alguns casos, o N_2 participa nas reações onde há formação de NO_x . Porém, mesmo em circunstâncias nas quais ele é considerado inerte sua diluição altera outras propriedades da mistura como o calor específico e a concentração de combustível nas zonas de maior reação, o que ocasiona em decréscimo na temperatura da chama. Em menor escala, as concentrações das espécies participantes também podem ser afetadas. A influência na transferência de calor radiativa é por consequência afetada devido à combinação da diluição sobre a temperatura e a concentração das espécies.

O dióxido de carbono quando utilizado como diluente em chamas, participa diretamente nas reações químicas, promovendo alterações na cinética química. E por se tratar de um gás participante, impõe mudanças nas características de emissão, absorção, e em menor grau no espalhamento da radiação térmica na chama. Assim, o CO_2 no combustível pode atuar como agente de extinção de chamas tanto por efeitos cinéticos quanto radiativos. Além do mais, a diluição de chamas difusivas com dióxido de carbono reduz consideravelmente a fração volumétrica de fuligem, pois limita a formação de seus precursores [Liu et al., 2001].

4.3 Domínio computacional, Condições de contorno e Propriedades Físicas

O problema foi simplificado assumindo uma geometria bidimensional com domínio computacional axissimétrico. O combustível e o oxidante (*coflow*) são injetados através de

duto coaxiais com raios de 0,00555m e 0,0508m, respectivamente. Para determinação do fluxo de calor radiativo, uma parede externa foi posicionada a 0,0543 m da linha de centro, mesma distância em que foram obtidos os dados experimentais de fluxo radiativo. A escolha da parede física foi necessária no lugar de um domínio aberto, pois não é possível obter o fluxo radiativo no *Fluent* diretamente de uma zona do fluido. O domínio possui um comprimento total de 0,414 m a partir do *coflow* que está posicionado 0,064 m abaixo do injetor de combustível.

Conforme citado na Seção 4.1, a combustão é considerada em regime laminar de escoamento ($Re_{max}=172$), não adiabática, sem pré- mistura entre reagente e oxidante.

A parede lateral é modelada como uma superfície negra a uma temperatura constante de 298K e condição de deslizamento livre. A parede do duto injetor de combustível é admitida adiabática e com condição de não deslizamento. Para a parte superior do domínio a condição de contorno de *outflow* é adotada, sendo considerada como e superfície negra a uma temperatura constante de 298K para radiação. Combustível e oxidantes são injetados paralelamente ao eixo de simetria a uma temperatura de 298K. A vazão de oxidante, em todas as chamas é de 100L/min, resultado numa velocidade média de 0,21m/s, e é composto por 21% de oxigênio e 79% de nitrogênio. O combustível é composto por uma mistura de metano-diluyente de acordo com cada simulação, onde a vazão total varia para cada porcentagem de diluyente. Foi adotado um perfil parabólico de velocidade para entrada de combustível descrito por

$$v(r) = 2v_{\text{combustível}} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (4.1)$$

sendo $R=0,0555\text{m}$ o raio do tubo de injeção de combustível e $v_{\text{combustível}}$ a velocidade média do combustível para cada chama, conforme a Tabela 4.1.

O comprimento visível de chama (L_f), medido por Machado, 2015 também é apresentado na Tabela 4.1. O autor utilizou uma técnica de imagem, onde foram capturadas imagens das chamas, e o comprimento visível da chama foi assumido como sendo a média dos valores máximos observados em uma sequência de 150 imagens com tempo de exposição de 0,02 segundos, das quais foram avaliados todos os comprimentos de chama.

Tabela 4.1 – Parâmetros das chamas estudadas [adaptada de Machado, 2015].

Chamas	Diluição %	Velocidade do combustível [m/s]	Re	L_f [m]
PC0050C10	10	0,1928	70	0,101
PC0050C20	20	0,217	86	0,102
PC0050C40	40	0,2858	134	0,108
PC0050C50	50	0,344	172	0,113
PC0050N10	10	0,1928	64	0,101
PC0050N20	20	0,217	73	0,102
PC0050N40	40	0,2858	98	0,104
PC0050N50	50	0,344	119	0,106

As condições de contorno empregadas nas simulações e as dimensões do domínio computacional são apresentadas na Figura 4.3.

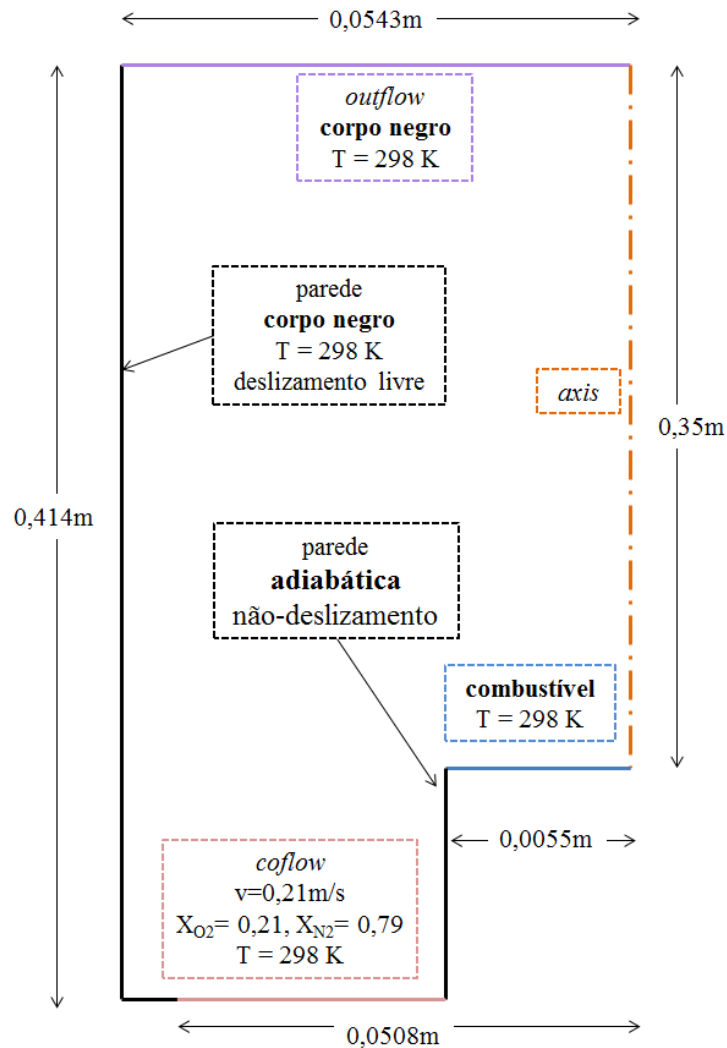


Figura 4.3 – Domínio geométrico empregado nas simulações [adaptada de Rodrigues, 2016].

5 SOLUÇÃO NUMÉRICA

Neste capítulo são apresentados os métodos numéricos utilizados no trabalho e as principais considerações adotadas na solução numérica do problema descrito. A Seção 5.1 apresenta o método dos volumes finitos [Patankar, 1980, Maliska, 2003], o qual foi empregado para a solução do conjunto de equações necessárias na solução do processo de combustão e da transferência de calor por radiação, vistas nos Capítulos 2 e 3. O problema numérico foi estabelecido para um domínio bidimensional e axissimétrico, sendo simulado no *software* comercial *Ansys-Fluent* versão 18 [Ansys, 2011a]. Na Seção 5.3 uma breve discussão sobre a malha utilizada é apresentada.

A solução com o método da integração linha-por-linha, desenvolvida no presente trabalho, se deu a partir dos campos de temperatura e concentrações molares das espécies participantes obtidos a partir das simulações com o modelo WSGG. A implementação da solução do problema utilizando o WSGG, descrito na Seção 5.4, foi implementada por Rodrigues, 2016.

Por fim, na Seção 5.5, é mostrado como se deu a implementação da integração linha por linha, através de rotinas de usuários (UDFs), no tratamento da radiação térmica.

5.1 Método dos volumes finitos

O método dos volumes finitos consiste em dividir a região de interesse em pequenas regiões chamadas de volumes de controle, e gerar uma malha computacional. As equações diferenciais são integradas em cada volume, gerando um conjunto de equações algébricas [Patankar, 1980]. Um valor aproximado para cada uma das variáveis é obtido em cada volume de controle do domínio computacional, isso a partir de um processo iterativo. Um dos aspectos importantes do método é que a solução resultante satisfaz um balanço de todos os escalares calculados em cada volume de controle do domínio computacional.

Resultados mais aproximados da solução exata fisicamente podem ser obtidos a partir de um refinamento dos volumes de controle no método. Como o sistema de equações é resolvido para cada volume de controle, o aumento do número destes volumes do domínio

computacional acaba implicando numa maior quantidade de cálculos e conseqüentemente um acréscimo no tempo computacional até que a solução esteja convergida.

5.2 Acoplamento pressão velocidade e aproximações numéricas

Todas as simulações, para o WSGG, foram realizadas utilizando o código CFD comercial *Ansys-Fluent* versão 18 [Ansys, 2011a] adotando o esquema SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) para o acoplamento entre o campo de pressão e o de velocidades, onde uma equação para correção da pressão é resolvida de forma a assegurar a conservação de massa e obter o campo de pressões. A discretização espacial para as equações governantes foi feita através do esquema *upwind* de segunda ordem para os termos advectivos e diferenças centrais para os termos difusivos.

Esquemas de discretização de primeira ordem geralmente produzem resultados menos precisos devido a erros de difusão numérica, embora levem a convergência mais rapidamente. Apesar de estes erros serem naturalmente baixos para escoamentos alinhados com malha estruturada, a discretização de segunda ordem acaba por reduzi-los ainda mais [Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 2007].

Para o problema da transferência de calor por radiação a solução do campo espacial deu-se através do método das ordenadas discretas. Foram utilizadas 80 direções para a solução com o método LBL. As soluções para a o modelo WSGG também foram geradas utilizando esse valor de direções. Utilizando 80 direções para o DOM na solução do LBL e considerando 50 coeficientes de absorção o *Fluent* calcula a RTE 16000 vezes em cada volume de controle, enquanto para o modelo WSGG, com 4 gases mais a janela transparente a RTE é calculada somente 1600, em cada volume de controle. Essa diferença faz com que a solução LBL seja mais dispendiosa. Estabelecido o número de direções utilizadas é possível estabelecer a quadratura do método através da relação $M = 2^d N(N + 2) / 8$, nesse caso igual a 3280.

Para garantir que 80 direções sejam suficientes para obtenção de resultados adequados, uma avaliação do número de direções foi executada através do *Grid Convergence Index* (GCI). O método e os valores obtidos pelo GCI são apresentados em detalhe no Apêndice B.

O critério de convergência de todas as equações foi estabelecido para resíduos inferiores a 10^{-6} .

A solução numérica acoplada com o método WSGG, foi realizada por Rodrigues, 2016. Primeiramente foi simulado o transporte a frio dos reagentes. Isso significa que o combustível e o oxidante entram no domínio em um escoamento não reativo onde sua mistura acontece por efeitos de difusão e advecção, essa etapa se deu como uma alternativa para melhor convergência do escoamento reativo. A partir desse campo convergido, o escoamento reativo foi calculado. O processo de combustão deu-se início através da inserção de uma pequena região com temperatura elevada capaz de promover a ignição da mistura. Esse ponto de ignição é localizado junto à borda da boca de injeção do combustível, região onde a fração de mistura é próxima da condição estequiométrica. A escolha da região de ignição é crucial, uma escolha aleatória pode ocorrer na falha da ignição, dificuldade de convergência, e conseqüentemente um aumento no tempo computacional do processo de solução do sistema de equações. A Figura 5.1 mostra a região onde a ignição da chama no programa foi imposta. Depois de alcançada a convergência, a modelagem da radiação térmica foi então incluída.

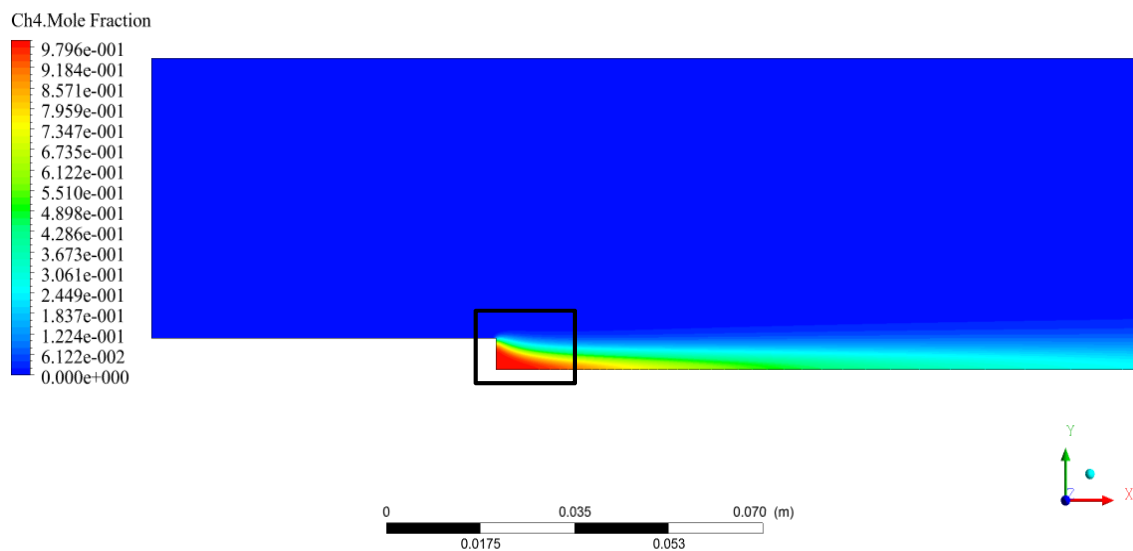


Figura 5.1 – Local de escolha da ignição da chama.

O método ISAT, [Pope, 1997], e o esquema de aglomeração química durante a ignição e evolução inicial da chama, foram utilizados na obtenção da solução por Rodrigues, 2016. Quando a chama está suficientemente desenvolvida, o termo fonte químico passou então a ser calculado via integração direta até a convergência.

O uso desses métodos é conveniente visto a dificuldade de convergência em escoamentos reativos devido à magnitude do termo fonte das reações. Estes métodos reduzem o número de integrações das equações diferenciais ordinárias, as quais são

computacionalmente demandantes, proporcionando um ganho de tempo computacional. Alguns trabalhos utilizando essas técnicas são encontrados em Verhoeven, 2011 e Hoerlle 2015. No manual do software *Ansys-Fluent* [Ansys, 2011a] maiores detalhes podem ser encontrados sobre estes métodos numéricos.

5.3 Estudo de malha

O estudo de qualidade de malha é um dos fatores primordiais em uma análise numérica. Tem como finalidade verificar a discretização necessária do domínio físico a fim de se obter resultados numéricos suficientemente independentes do grau de refinamento da malha. A região de maior interesse no domínio computacional deve ter uma atenção maior, no entanto a malha deve equilibrar a precisão dos resultados e o tempo computacional necessário para a convergência do problema.

A avaliação da qualidade de malha usada na solução do domínio em estudo foi realizada por Rodrigues, 2016, utilizando o GCI, uma vez que os resultados para a solução da integração LBL foram obtidos a partir dos campos convergidos de temperatura e concentrações da solução WSGG.

Rodrigues, 2016, avaliou três malhas com 70875, 37800 e 20160 volumes de controle, construídas no software ANSYS/ICEM. As variáveis utilizadas na análise do GCI foram a temperatura máxima, as máximas frações molares de dióxido de carbono e vapor de água. A malha com 70875 volumes foi a escolhida. A região de maior interesse, onde se dá chama, apresenta maior refinamento com 45000 volumes.

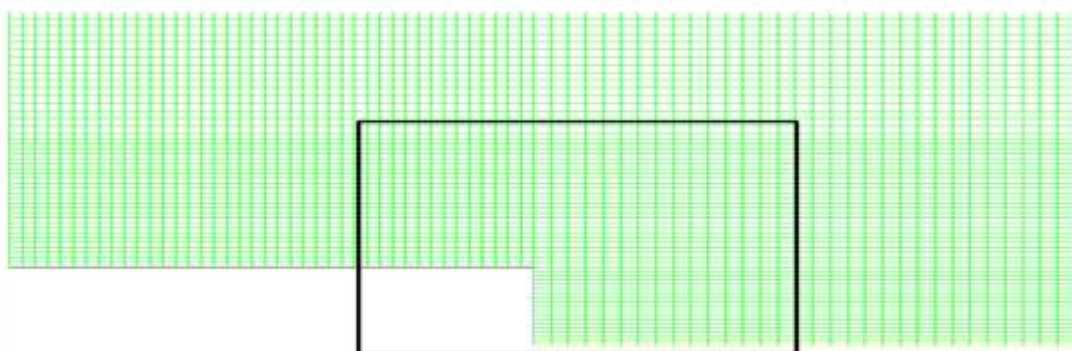


Figura 5.2 – Refino na região próxima à saída de combustível [Rodrigues, 2016].

5.4 Implementação do modelo WSGG no *Fluent*

A implementação do modelo WSGG no *Fluent* foi realizada através de rotinas de usuários (UDF's). Rotinas de usuários são rotinas escritas em linguagem C, as quais podem ser dinamicamente ligadas ao solver, neste caso *Fluent*, a fim de se modificar modelos específicos, condições de contorno, propriedades de matérias, alterar variáveis de tratamento etc [Ansys, 2011b]. A seguir é apresentada uma breve explanação sobre como se deu a implementação da modelagem do problema com o modelo WSGG.

O ANSYS *Fluent* fornece várias funções e rotinas pré-definidas, denominadas de macros. Essas macros tem como objetivo facilitar a programação das UDFs. As macros são divididas em duas categorias principais:

- Macros para definir parâmetros de um modelo específico no software, como: fuligem, cinética química, turbulência;
- Macros para funções gerais do *solver* que são independentes dos modelos que se deseja utilizar, tais como: tamanho do passo de tempo (para soluções transientes), escrita de arquivo, entre outros.

No caso específico do modelo WSGG, foram necessárias duas UDFs macros para modificação de parâmetros: uma para o cálculo do coeficiente de absorção (κ_i) (*DEFINE_GRAY_BAND_ABS_COEFF*) e outra para o fator de ponderação da emissividade ($a_i(T)$), (*DEFINE_EMISSIVITY_WEIGHTING_FACTOR*). Uma terceira UDF macro (*DEFINE_EXECUTE_AT_END*) foi implementada com a função de, ao final de cada iteração, armazenar os valores para cada gás cinza em cada volume de controle em uma variável global, onde estes valores são posteriormente recuperados pela UDF, que calcula o fator de ponderação da emissividade [ANSYS, 2011b].

Essa estrutura de programação foi adotada como um recurso de diminuição de tempo computacional. Como a terceira UDF, executada ao final de cada iteração, é chamada apenas uma vez pelo *Fluent*, reduz o tempo de solução do problema, uma vez que a UDF para o fator de ponderação da emissividade é executada para cada direção da discretização angular do DOM em cada volume de controle. Simulações com esse recurso diminuíram cerca de 20% o tempo computacional.

A Figura 5.3 mostra um esquema de como o modelo WSGG está implementado no *Fluent*.

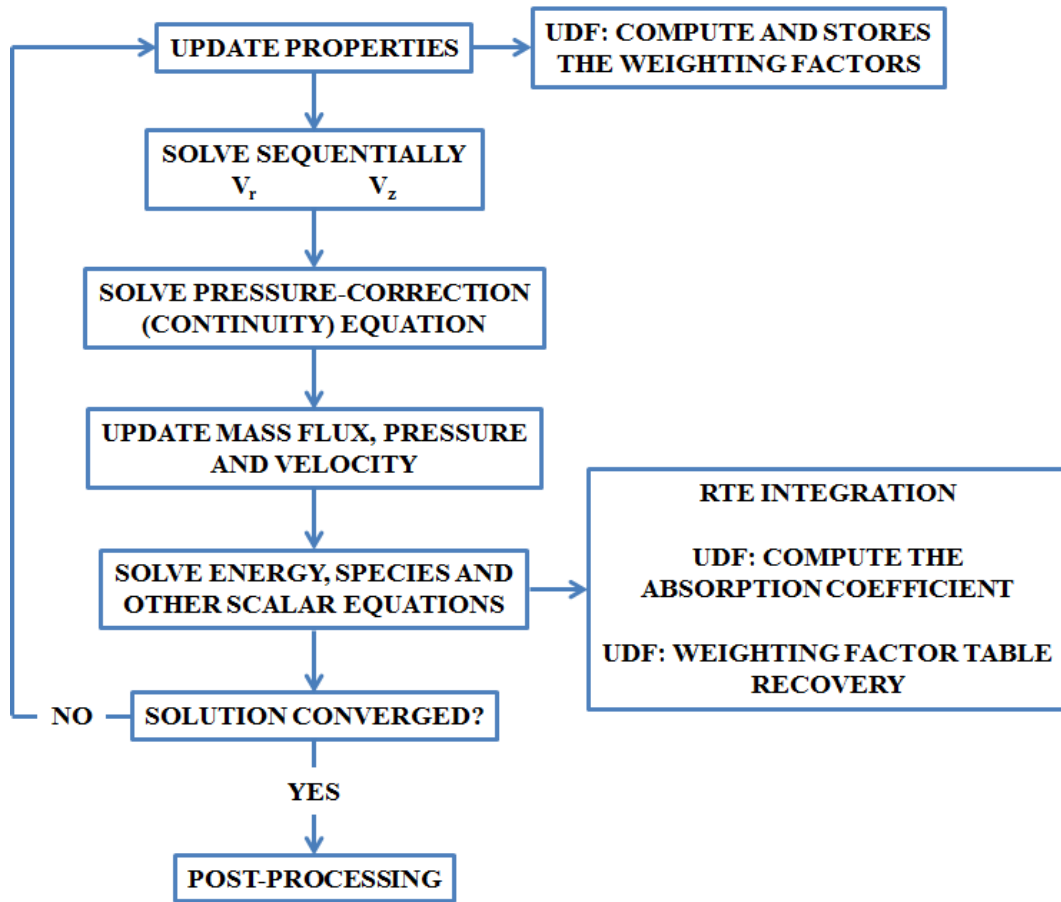


Figura 5.3 – Fluxograma da implementação do modelo WSGG [Rodrigues, 2016].

A Tabela 5.1 mostra a razão média das concentrações das espécies ao longo de todo o domínio e as correlações com que as simulações WSGG foram resolvidas, para as diferentes porcentagens de diluições simuladas em ambos os diluentes, CO₂ e N₂.

Tabela 5.1 - Razão média das concentrações das espécies no domínio e correlações utilizadas.

Chamas	Diluição %	Razão média das concentrações no domínio	Correlações utilizadas
PC0050C10	10	1,746	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$
PC0050C20	20	1,515	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,5$
PC0050C40	40	1,086	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$
PC0050C50	50	0,885	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$
PC0050N10	10	1,983	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$
PC0050N20	20	1,970	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$
PC0050N40	40	1,939	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$
PC0050N50	50	1,916	$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$

5.5 Implementação da integração LBL no *Fluent*

A implementação da integração LBL no *Fluent*, assim como para o modelo WSGG, foi realizada através de rotinas de usuários (UDF's). Como mencionado anteriormente, o software fornece funções pré-definidas para que o usuário consiga alterar parâmetros de forma eficiente e confiável. Assim como para o modelo WSGG, a implementação da integração LBL fez uso desse recurso.

Desse modo, para a implementação do LBL foram necessárias duas macros de definição de funções gerais do *solver*, e duas para modificação de parâmetros de modelos.

Para o cálculo da RTE (Equação 5.1) no método LBL, é necessário determinar os valores dos coeficientes de absorção espectrais (κ_η), considerando cada intervalo de número de onda disponível, diferentemente do modelo WSGG onde os coeficientes de absorção (κ_i) já são dados pelas correlações do modelo (Equação 5.2). Para isso foi utilizada uma UDF que permite especificar o coeficiente de absorção, para cada número de onda, dentro do intervalo de $\eta = 0$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$, em função da temperatura (*DEFINE_GRAY_BAND_ABS_COEFF*) [Ansys, 2011b].

$$\frac{dI_\eta}{dS} = -\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{\eta,b} \quad (5.1)$$

$$\frac{dI_i}{dS} = -\kappa_i I_i + \kappa_i a_i I_b \quad (5.2)$$

O procedimento de cálculo, implementado na UDF, necessário para se determinar os coeficientes de absorção espectrais é apresentado no Capítulo 3, Seção 3.7. Conforme visto, para o cálculo dos coeficientes de absorção espectrais se faz necessária a leitura dos valores de seção transversal de absorção ($C\eta$). Como explicado no Capítulo 3, esses valores de $C\eta$ calculados para a faixa de temperaturas de 200K a 2200K e para frações molares específicas, são armazenados em um arquivo de texto, denominado *database*. A leitura das *databases* é realizada através de uma UDF macro geral (*DEFINE_ON_DEMAND*). Essa macro é executada antes da inicialização da solução e não pode ser acessada durante o processo iterativo.

Uma segunda UDF macro (*DEFINE_EXECUTE_AT_END*) foi implementada com a função de, ao final de cada iteração, buscar e armazenar os valores de C_η lidos pela UDF *DEFINE_ON_DEMAND* e interpolá-los em função de cada número de onda e da temperatura em cada volume de controle, armazenando os valores em uma variável global onde estes são posteriormente recuperados pela rotina UDF que calcula os coeficientes de absorção espectrais.

A equação da RTE do *Fluent* equivale a RTE dada para o modelo WSGG (Equação 5.2) onde não é considerada a integração espectral [Ansys, 2011a]. Em vista disso, uma segunda UDF macro de mudança de parâmetros de modelos teve de ser utilizada para modificar o termo de emissão da RTE, a fim de se considerar essa variação espectral presente no LBL. A macro *-DEFINE_EMISSIVITY_WEIGHTING_FACTOR*, foi a escolhida. Essa UDF permite modificar o fator de ponderação da emissividade (a_i), no termo de emissão na Equação 5.2 [Ansys, 2011b]. Para tal modificação, foi utilizado um artifício matemático onde o termo de emissão da Equação 5.2 foi substituído por

$$a_i = \frac{I_{\eta,b}}{I_b} \quad (5.3)$$

onde $I_b = \sigma T^4 / \pi$ e $I_{\eta,b}$ é o cálculo da intensidade de radiação espectral de corpo negro pela distribuição de Planck, para cada número de onda η . Assim,

$$I_{\eta,b} = \left(\frac{2C_1\eta^3}{e^{(C_2\eta/T)} - 1} \right) d_\eta \quad (5.4)$$

Dessa forma, $a_i I_b = I_{\eta,b}$ a Equação 5.2 para o modelo WSGG se reduz à Equação 5.1 equivalente ao método LBL.

5.5.1 Validação da UDF construída para a integração LBL

Antes da aplicação da UDF escrita para método da integração linha-por-linha (LBL), na solução do problema da chama laminar difusiva de metano, uma verificação foi realizada fim de se assegurar que os resultados obtidos pela UDF no *Fluent* são corretos.

Essa verificação da UDF foi realizada para um problema 1D com meio não isotérmico e homogêneo preenchendo o espaço entre duas placas planas infinitas (tratadas como superfícies negras) separadas entre si por uma distância S .

A seguir, são apresentados os resultados para quatro perfis de temperatura: um perfil com temperatura constante a 1100K e as paredes a 400K (Equação 5.5); um perfil simétrico simples com paredes a 400K e um pico de 1400K (Equação 5.6); perfil com dupla simetria onde as paredes estão a 400K e o meio tem dois picos de 1800K (Equação 5.7); e o quarto perfil onde as paredes estão a 400K e 800K com um pico de 1800K (Equação 5.8). As frações molares das espécies participantes, neste caso dióxido de carbono (CO_2) e valor d'água (H_2O), foram mantidas a razões constantes de 0,1 atm (Equação 5.9), para todos os casos resolvidos.

$$T(s^*) = 1100K \quad (5.5)$$

$$T(s^*) = 400K + (1400K) \sin^2(\pi s^*) \quad (5.6)$$

$$T(s^*) = 400K + (1400K) \sin^{-2}(2\pi s^*) \quad (5.7)$$

$$T(s^*) = \begin{cases} 880K + (920K) \sin^2(2\pi s^*) \\ 400K + (1400K) \left\{ 1 - \sin^{3/2} \left[\frac{2}{3} \pi (s^* - 0.25) \right] \right\} \end{cases} \quad (5.8)$$

$$Y_{\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}}(s^*) = Y_{\text{H}_2\text{O}}(s^*) = 0,1 \quad (5.9)$$

onde $s^* = s/S$ para valor de S igual a 1,0 m. Os perfis de temperatura e concentração foram também implementados no software *Fluent* a partir de funções UDF. Entretanto o *Fluent* trabalha somente com geometrias 2D e 3D, assim um domínio bidimensional, $L \times S$ foi construído onde $L=100S$ simulando, portanto, uma geometria 1D. A Figura 5.4 representa graficamente os perfis de temperaturas testados.

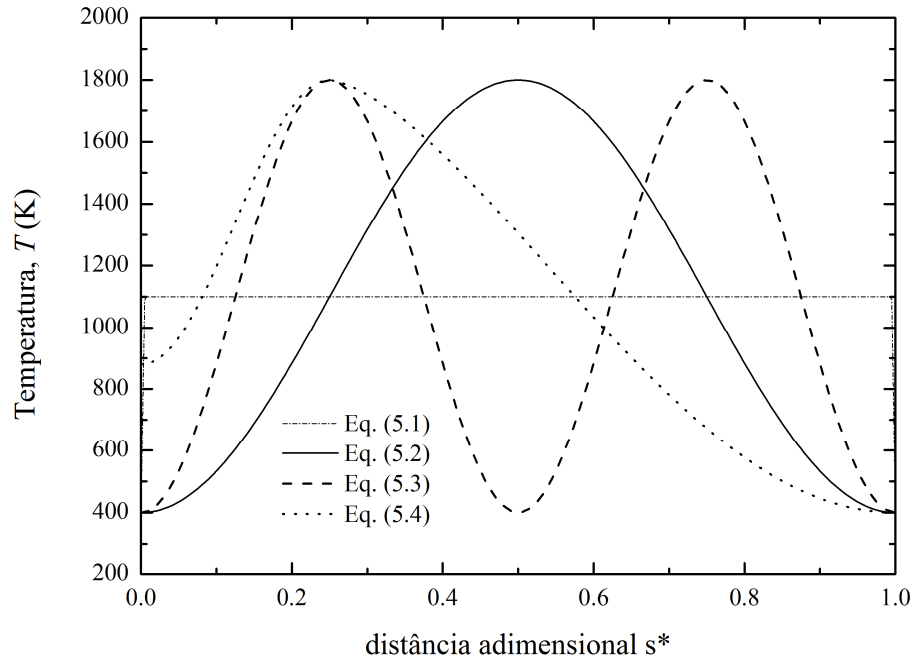


Figura 5.4 – Perfis de temperaturas referentes.

O parâmetro utilizado para a verificação do acoplamento das rotinas UDF com o *Fluent*, foi o termo fonte radiativo. Os resultados encontrados foram comparados com os resultados obtidos com uma rotina Fortran desenvolvida e consolidada pelo grupo de radiação para o método LBL [Dorigon et al., 2013; Cassol et al., 2014; Cassol et al., 2015]. O termo fonte é calculado pela equação

$$\dot{q}_R = \sum_{n_b} -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_R = \sum_{n_b} \int_{\eta} \left\{ 2\pi\kappa_{\eta} \left[\left(\int_{4\pi} I_{\eta} d\Omega \right) - 4\pi\kappa_{\eta} I_{\eta b} \right] \right\} d\eta \quad (5.10)$$

onde n_b é o número de gases, que correspondem ao número de linhas lidas na *database*, κ_{η} é o coeficiente de absorção espectral, I_{η} é intensidade de radiação espectral (W/m^2) e $I_{\eta b}$ é a intensidade radiativa de corpo negro ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{sr}$), vista na Equação 5.4. O $d\eta$ que aparece na equação corresponde ao valor de discretização da *database*, já explicado no Capítulo 3.

As soluções apresentadas a seguir, foram realizadas para uma *database* com 20 intervalos de número de onda, os quais correspondem de $\eta = 0$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$, com um $d\eta = 500 \text{ cm}^{-1}$. Isso significa que o *Fluent* está calculando 20 valores de coeficiente de absorção κ_{η} em cada caso.

A Figura 5.5 apresenta os valores para o termo fonte calculados para as soluções do Fortran-LBL *versus* Fluent-LBL para cada um dos perfis de temperatura mostrado anteriormente. Em adição, a Tabela 5.2 mostra os desvios máximos e médios entre as soluções, calculados a partir da Equação 5.11.

$$\text{desvio}_{q_R}(x) = \frac{\left| \dot{q}_R^{(x)}{}_{LBL, Fortran} - \dot{q}_R^{(x)}{}_{LBL, Fluent} \right|}{\max \left| \dot{q}_R^{(x)}{}_{LBL, Fortran} \right|} \times 100\% \quad (5.11)$$

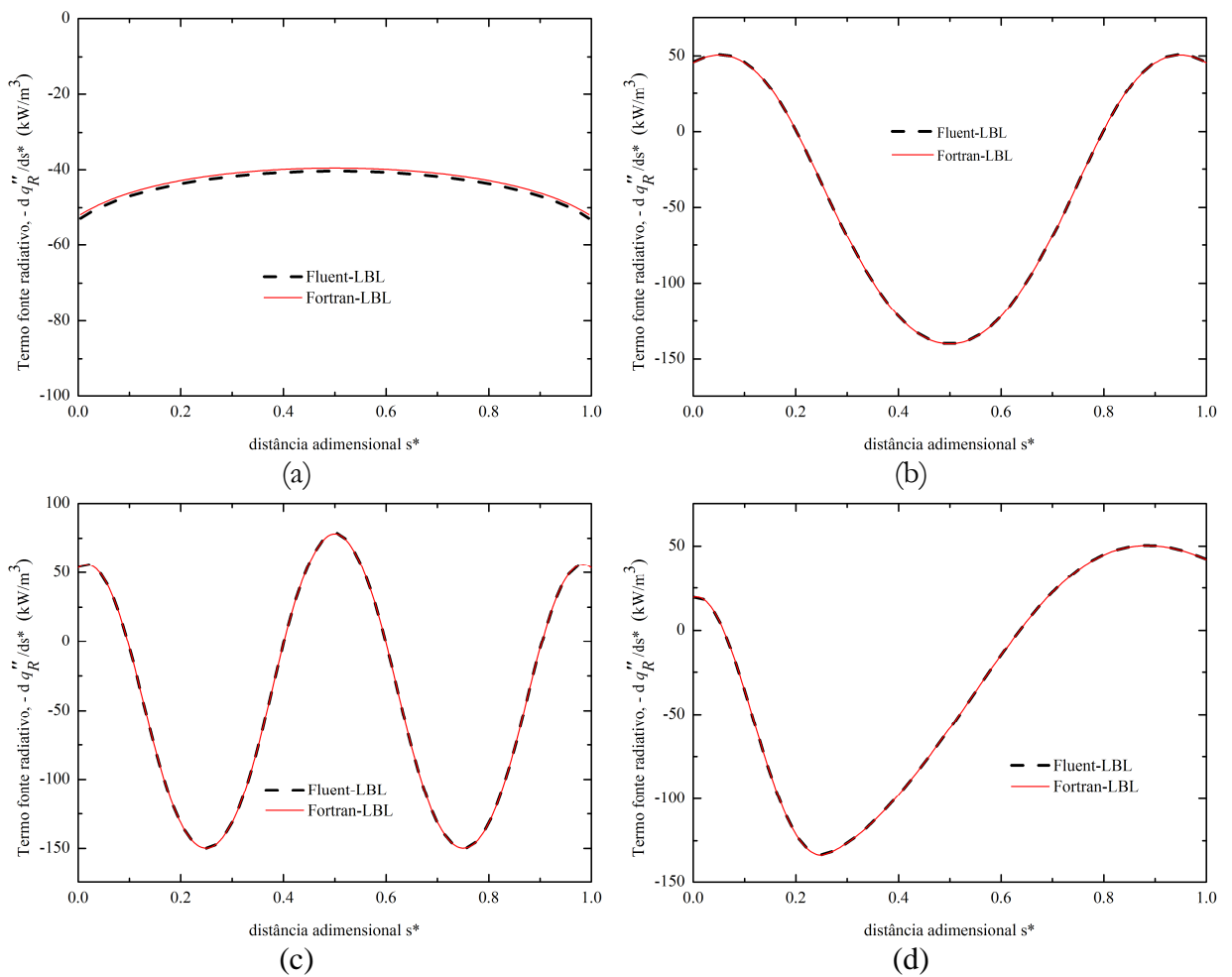


Figura 5.5 – Termo fonte radiativo para os perfis de temperatura: (a) Equação 5.5, (b) Equação 5.6, (c) Equação 5.7 e (d) Equação 5.8.

Tabela 5.2 – Desvio máximo e médio em relação à solução LBL-Fortran para o termo fonte radiativo, para os perfis de temperaturas mostrados.

Perfil de temperatura	Desvio máximo %	Desvio médio %
Equação. 5.5	2,516	2,103
Equação 5.6	1,244	0,276
Equação 5.7	1,277	0,172
Equação 5.8	0,463	0,182

Os resultados obtidos entre a comparação da solução no Fortran com a solução do *Fluent* apresentaram resultados bastante satisfatórios com desvios menores de 2,5 % entre as plataformas. Isso demonstra que a UDF desenvolvida para o LBL está bem consolidada e pode-se passar para a etapa de simulação da chama laminar com diluição de CO₂ e N₂.

Outros valores de discretizações ($d\eta$) das *databases* também foram testados e todas as soluções apresentaram resultados satisfatórios, como os apresentados acima.

5.5.2 Ferramentas utilizadas para obtenção da solução LBL

Devido à capacidade computacional disponível, para as simulações da chama laminar difusiva de metano com domínio bidimensional e axissimétrico utilizando a UDF-LBL no *Fluent*, foi possível somente a leitura de *databases* com 50 intervalos de números de onda, e conseqüentemente, o cálculo de 50 valores de coeficientes de absorção em cada simulação. Portanto, para as soluções do LBL com *databases* maiores de 50 valores a solução teve de ser obtidas em etapas. Por exemplo, para a solução completa de uma *database* com 3000 valores de números de onda foram realizadas 60 simulações. Ao final, os dados obtidos em cada uma das simulações foram somados. O tempo para cada simulação foi de aproximadamente 15 horas, utilizando-se um computador Octa-Core de 3,60 GHz e 16 GB de memória RAM.

A Tabela 5.3 a seguir mostra os valores de discretizações adotado para as simulações da chama. A construção das *databases* considerando esses intervalos foi apresentada no Capítulo 3, Seção 3.10.3.

Tabela 5.3 – Discretizações das *databases*.

Número de intervalos (NP) da <i>database</i>	Valores de d_η para cada intervalo	Simulações necessárias
20	$d_\eta = 500 \text{ cm}^{-1}$	1
50	$d_\eta = 200 \text{ cm}^{-1}$	1
100	$d_\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$	2
200	$d_\eta = 50 \text{ cm}^{-1}$	4
500	$d_\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$	10
1000	$d_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$	20
3000	$d_\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$	60
30000	$d_\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$	600

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, primeiramente são apresentados os perfis de temperatura, concentração de CO_2 e N_2 para diferentes diluições. São apresentados os resultados de fluxos de calor radiativo obtidos com as simulações numéricas da chama laminar não pré-misturada de metano, para várias razões de diluição de CO_2 e N_2 . Os efeitos de radiação térmica foram tratados com o método da integração LBL, e pelo modelo WSGG, ambos implementados no software *Fluent* por meio de UDFs. Diferentes discretizações das *databases* utilizada nos cálculos com o método LBL foram testados. Os resultados para o fluxo de calor radiativo são também comparados com os dados experimentais obtidos por Machado, 2015.

Num segundo momento é apresentada uma análise da discretização das *databases* utilizadas na solução da integração LBL. Essa análise foi feita para um o problema 1D empregando um código próprio em Fortran.

É importante ressaltar que os resultados apresentados para a solução com o LBL no *Fluent* foram obtidos de forma desacoplada. Os perfis de temperatura e concentrações das espécies participantes, usados nas simulações com o método LBL, foram obtidos a partir da solução WSGG.

6.1 Chamas diluídas com CO_2

6.1.1 Diluição de 50% de CO_2

Os campos de temperatura e frações molares das espécies participantes (CO_2 e H_2O) para a diluição de 50% de CO_2 são apresentados na Figura 6.1. A Figura 6.1 (a) mostra o campo de temperatura ao longo do domínio computacional. As temperaturas mais altas (máx. 1794 K) ocorrem no início do domínio, onde o combustível e o oxidante se encontram e ocorre, assim, a maior taxa de reação com menor troca térmica. A Figura 6.1 (b) mostra o campo de concentração de fração molar para o diluente CO_2 . O valor máximo ocorre na região de injeção de combustível e diluente; no restante do domínio há uma estabilização da concentração molar numa faixa entre 0,1 e 0,2. O perfil de H_2O , Figura 6.1 (c), mostra que a maior concentração de H_2O está localizada na região onde as temperaturas são mais elevadas.

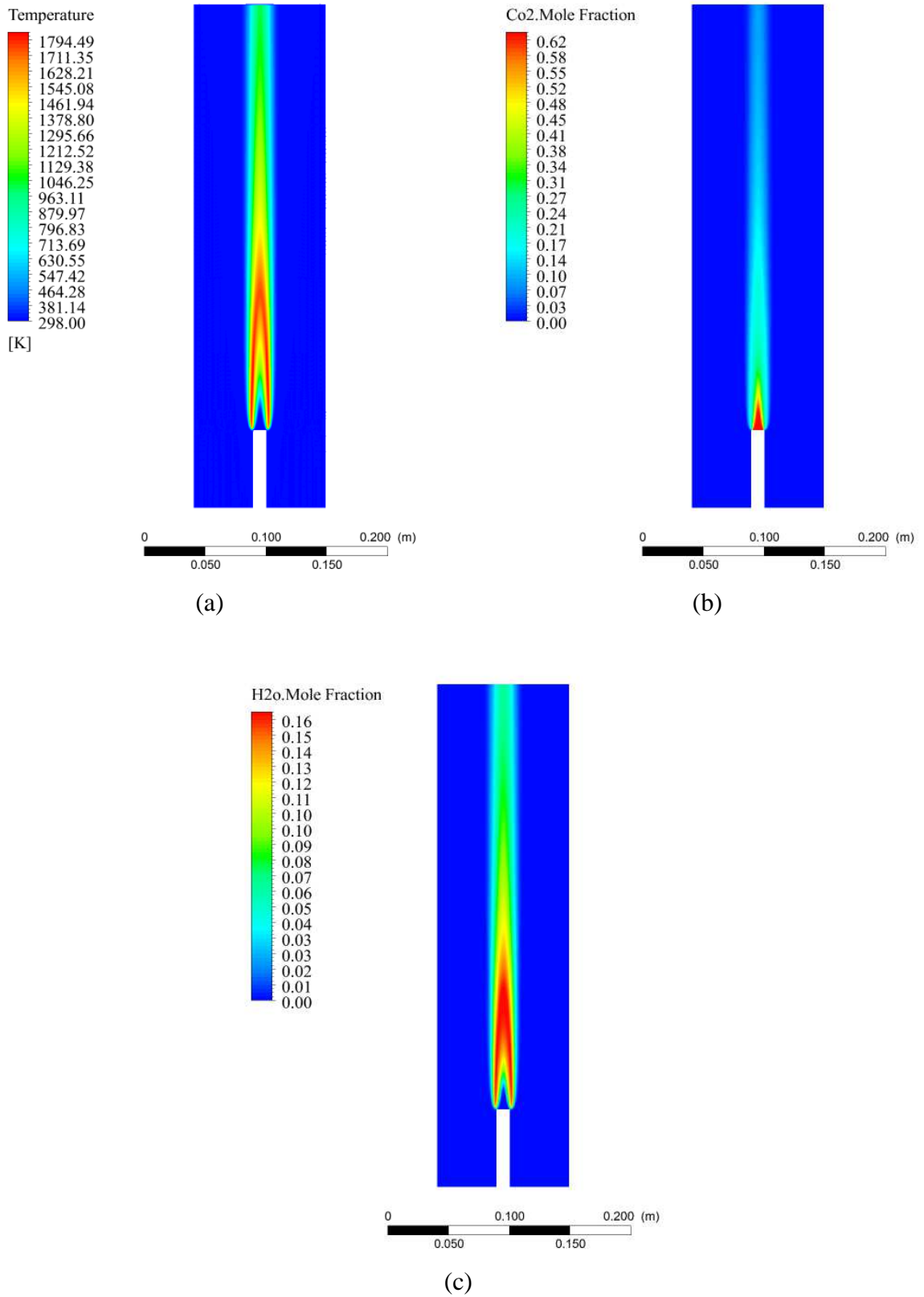


Figura 6.1 – (a) Perfil de temperatura; (b) Perfil de CO₂ com diluição de 50% e (c) Perfil de H₂O com diluição de 50%.

A Figura 6.2 apresenta os perfis de fração molar ao longo do domínio computacional para linhas axiais de CO₂ e H₂O. Pode-se perceber que a variação da fração molar respeita a taxa de diluição de 50% no eixo de simetria ($x, r=0,0$ m) e varia ao longo do domínio, conforme a combustão ocorre. O valor da posição “ x, r ” estabelece a fração molar a uma distância paralela axialmente ao eixo de simetria. Ao longo da posição axial, as variações das frações molares tendem a ser menos pronunciadas, adquirindo certa estabilidade com valores próximos de 0,1 e 0,2. É possível observar que a posição $x, r=0,01$ m encontra-se praticamente fora da região onde se dá a combustão, em vista dos valores estarem muito próximos de zero. Quando se analisa a fração molar de H₂O pode-se observar que no início do domínio a fração molar da espécie é mais pronunciada, semelhante ao que foi observado na Figura 6.1 (c).

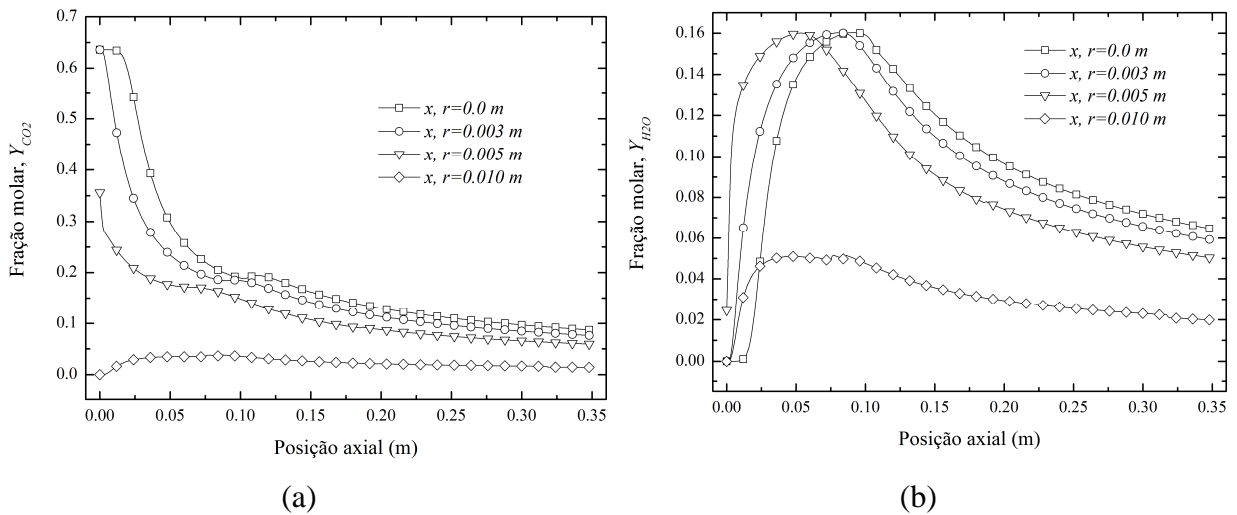


Figura 6.2 – Perfis de fração molar ao longo do domínio para linhas axiais: (a)CO₂ e (b)H₂O, para a diluição de 50% de CO₂.

Na sequência serão apresentados os resultados obtidos para o fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama (Equação 6.1), em unidade de kW/m², e para o termo fonte radiativo (Equação 6.2), em unidade de kW/m³. Assim,

$$\dot{q}_R''(x) = \sum_{\eta} \int_{\eta} \left\{ 2\pi\kappa_{\eta} \left[\left(\int_{4\pi} I_{\eta} d\Omega \right) \right] \right\} d_{\eta} \quad (6.1)$$

e

$$\dot{q}_R = \sum_{\eta} -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_R'' = \sum_{\eta} \int_{\eta} \left\{ 2\pi\kappa_{\eta} \left[\left(\int_{4\pi} I_{\eta} d\Omega \right) - 4\pi\kappa_{\eta} I_{\eta b} \right] \right\} d_{\eta} \quad (6.2)$$

Os desvios entre as soluções com os modelos WSGG, LBL e os dados experimentais foram calculados pela Equação 6.3, a seguir.

$$\text{desvio}_{q_R}''(x) = \frac{\left| \frac{q_R''(x)_{WSGG/Experimental} - q_R''(x)_{LBL}}{\max(q_R''(x)_{WSGG/Experimental})} \right|}{q_R} \times 100\% \quad (6.3)$$

Ao longo de toda a apresentação de resultados, serão utilizadas as notações de ζ_{max} e ζ_{avg} para os desvios máximo e desvios médio, respectivamente, para o fluxo de calor, em %.

A avaliação do fluxo de calor radiativo com diluição de 50% de CO₂ é apresentada a seguir. A Figura 6.3 mostra os resultados obtidos numericamente para várias discretizações da *database* para a solução LBL em comparação com a solução obtida pelo método WSGG. Nesse gráfico, mostra-se a posição e comprimento de chama L_f , medido experimentalmente. É possível observar que para a solução do LBL para as *databases* com $d\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ e $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ as curvas praticamente se sobrepõem, com desvio médio entre a solução WSGG de 4,24% para $d\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ e 4,14% para $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$. Nessa avaliação a *database* com $d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$ apresenta os resultados com maior discrepância com desvio médio próximo de 11%. A simulação com $d\eta = 0,33 \text{ cm}^{-1}$, caso mais refinado, apresenta a curva mais próxima da solução WSGG. O desvio médio em relação à simulação do WSGG ficou abaixo dos 3% e o desvio máximo foi de 4,29%. Todavia, a solução do caso para $d\eta = 0,33 \text{ cm}^{-1}$ demanda a realização de 600 simulações, visto que cada simulação corresponde a um intervalo de 50 números de onda, com isso pressupõe-se que a simulação para $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ já apresenta resultados confiáveis com desvio médio de 4,14%. Os valores dos desvios máximos e médios para todos os valores de discretizações testados podem ser vistos na Tabela 6.1.

É válido ressaltar os erros associadas aos próprios modelos simulados. O próprio HITEMP2010, utilizado na obtenção das *databases* para a solução LBL e nas correlações dos modelos WSGG, pode introduzir erros nos resultados finais, difíceis de serem mensurados. Os campos de temperatura e concentrações das espécies também podem induzir a erros.

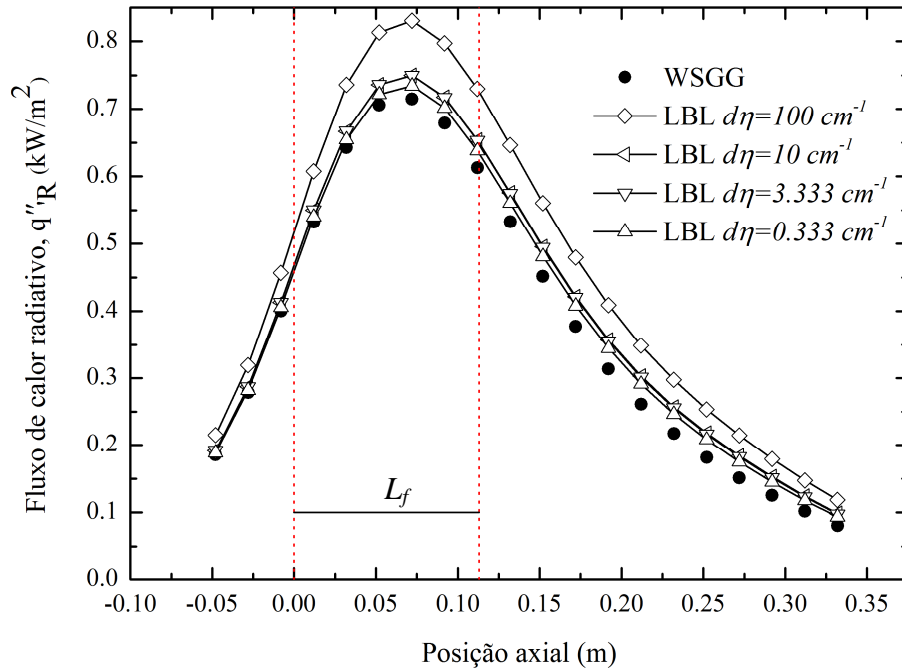


Figura 6.3 – Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de CO_2 em comparação com WSGG.

A Figura 6.4 apresenta a comparação entre as soluções LBL, para a maior discretização $d\eta = 0,33 \text{ cm}^{-1}$, a solução WSGG e os dados experimentais obtidos por Machado, 2015. Qualitativamente as curvas obtidas numericamente para o fluxo de calor radiativo, tanto para o WSGG quanto o LBL seguem a mesma tendência dos dados experimentais. O desvio máximo em relação aos dados experimentais, tanto para o método LBL como para o modelo WSGG ficaram próximos de 14%, sendo que o modelo WSGG apresentou um desvio médio de 7,22%, enquanto para o LBL obteve-se um desvio médio de 8,62%. Essa maior diferença pode ser observada logo após da metade do domínio, $x=0,15\text{m}$ (na região da pluma aquecida ascendente, fora do comprimento de chama visível). Uma possível explicação desse comportamento pode ser atribuída à condição de contorno de corpo negro (298K) para a parede mais externa da chama, imposta na solução numérica, que pode estar provocando um aumento no fluxo radiativo, em comparação com dados experimentais, devido à sua proximidade. Uma alternativa seria alongar o domínio a fim de minimizar essa influência, contudo com um aumento de tempo computacional e uma dificuldade adicional na convergência da solução numérica.

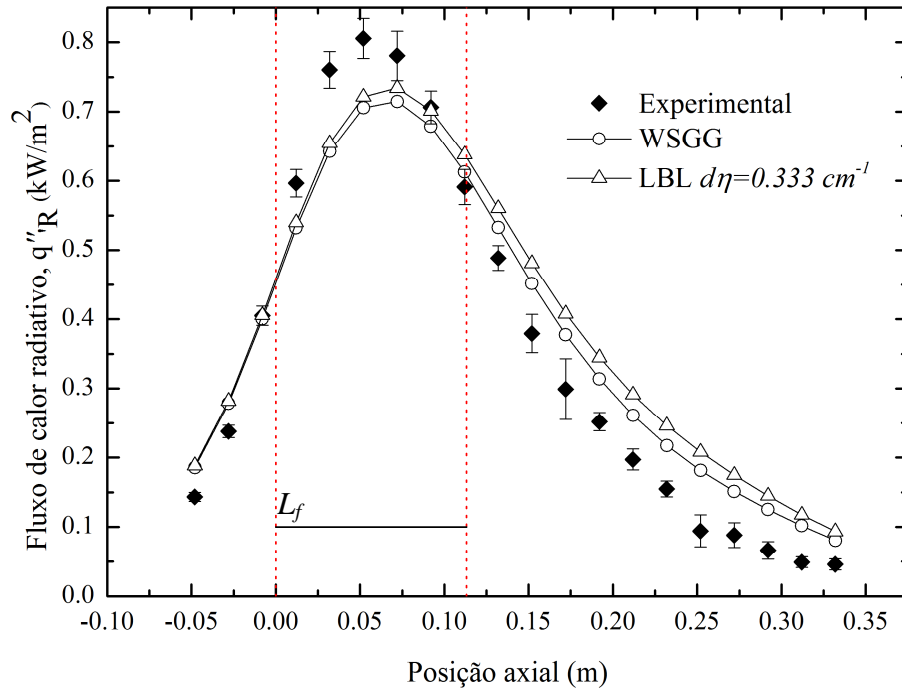


Figura 6.4 – Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de CO_2 : (a) comparação com WSGG, (b) comparação com medições.

A seguir são apresentados resultados utilizando o método da sobreposição (NCR-WSGG) proposto por Cassol, 2013, que considera as variações locais nas razões entre as concentrações das espécies participantes, H_2O e CO_2 , ao longo do domínio, em comparação com a abordagem tradicional do modelo WSGG, os dados experimentais e a solução LBL para o $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$. Em relação ao modelo WSGG tradicional, o método NCR-WSGG teve um desvio máximo de 11,80%. Entretanto, em relação ao método LBL, o NCR-WSGG teve um desvio máximo de 6,49%, valor muito semelhante ao desvio máximo do método tradicional do WSGG em relação ao LBL que foi de 6,00% para $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$. Entretanto, como pode ser observado na Figura 6.5, a abordagem NCR-WSGG se afasta da solução LBL na primeira metade do domínio, até aproximadamente $x = 0,15$, justamente na região onde se encontram as maiores temperaturas da chama e ocorrem as maiores trocas térmicas. Dessa forma pode-se dizer que a solução com o modelo tradicional do WSGG prediz o comportamento do fluxo de calor radiativo de forma mais eficiente.

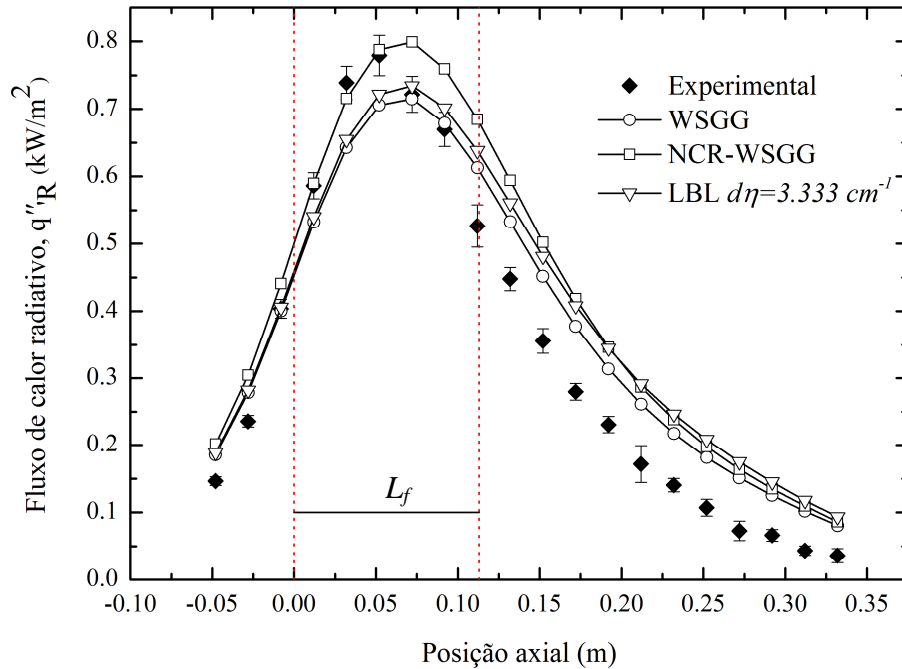


Figura 6.5 – Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de CO₂ entre solução LBL e abordagens distintas do WSGG.

A Tabela 6.1 apresenta os valores dos desvios máximos e médios, calculados pela Equação 6.3, entre as soluções LBL e WSGG; LBL e Experimental; e LBL e NCR-WSGG para todas as oito discretizações das *databases* simuladas no *Fluent*. Pode-se observar que a comparação da solução com o modelo WSGG para com método LBL com diferentes discretizações das *databases* não apresentaram uma diferença muito pronunciada entre elas a partir da discretização $d\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$, equivalente a uma *database* com 500 NP, tendo desvios médios menores de 5%.

Tabela 6.1 – Desvio máximo e médio de acordo com a discretização do LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções para diluição de 50% de CO₂.

	WSGG		NCR-WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
NCR-WSGG	11,80	5,70	-	-	15,22	8,42
WSGG	-	-	10,55	5,10	14,62	7,22
LBL $d\eta = 500 \text{ cm}^{-1}$	35,18	22,85	21,34	15,78	35,34	23,23
LBL $d\eta = 200 \text{ cm}^{-1}$	24,14	16,14	12,96	9,33	27,82	16,83
LBL $d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$	16,52	11,29	7,85	5,00	22,43	12,83
LBL $d\eta = 50 \text{ cm}^{-1}$	10,27	7,27	4,67	2,59	18,36	10,51
LBL $d\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$	6,96	4,87	5,65	2,79	15,84	9,50
LBL $d\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$	6,17	4,24	6,50	2,98	15,35	9,25
LBL $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$	6,00	4,14	6,49	2,92	15,16	9,15
LBL $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$	4,29	2,74	8,29	3,40	14,14	8,63

Em relação à solução experimental o caso mais refinado com o método LBL não mostrou uma melhora significativa para os desvios máximos e médios em relação à solução com o WSGG. Essa pouca variação quando se tem uma solução com um grau de refinamento maior, possivelmente, se dá devido à alta irregularidade dos espectros envolvidos na solução, que provavelmente acabam utilizando um valor médio, o qual compensa essas variações.

6.1.2 Influência dos intervalos espectrais no fluxo de calor radiativo

Foi feita uma avaliação da influência de bandas distintas no espectro total (de $\eta = 0$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$) no resultado final do fluxo de calor radiativo obtido para a chama com diluição de 50% de CO_2 . É mostrada uma avaliação considerando seis intervalos para o espectro que correspondem a uma faixa de valores para η . A Tabela 6.2 apresenta a faixa de valores de η correspondente ao intervalo no espectro e o valor, em porcentagem, que cada intervalo influencia no resultado do fluxo. Como podem ser observados, os três primeiros intervalos considerados, de $\eta = 0$ a $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$, correspondem a 99,12% do valor final do fluxo, o restante do espectro (de $\eta = 5000$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$) representa apenas 0,88%. A Figura 6.6 apresenta esses valores graficamente.

Tabela 6.2 – Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de CO_2 e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.

Intervalo no espectro	Valores de η correspondente	%
1	de $\eta = 0$ a $\eta = 1666,5 \text{ cm}^{-1}$	13,45
2	de $\eta = 1666,83$ a $\eta = 3333,17 \text{ cm}^{-1}$	74,18
3	de $\eta = 3333,50$ a $\eta = 4999,83 \text{ cm}^{-1}$	11,49
4	de $\eta = 5000,17$ a $\eta = 6666,50 \text{ cm}^{-1}$	0,65
5	de $\eta = 6666,83$ a $\eta = 8333,17 \text{ cm}^{-1}$	0,22
6	de $\eta = 8333,50$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$	0,01

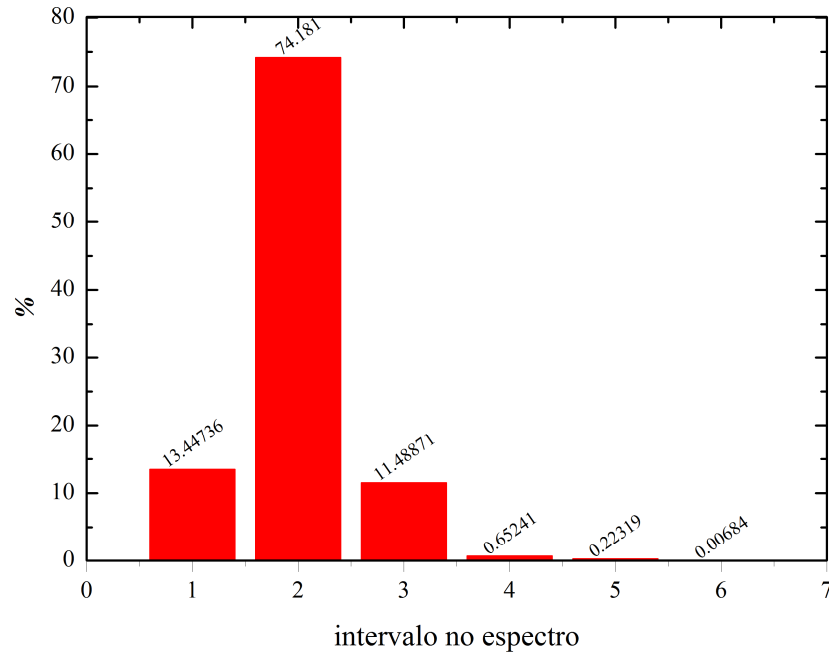


Figura 6.6 – Representação da porcentagem para cada intervalo do espectro para chama com diluição de 50% de CO₂ e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.

A mesma avaliação foi feita para o caso com e $d\eta = 3,333 \text{ cm}^{-1}$, a Tabela 6.3 mostra os valores que foram obtidos. Da mesma forma, o intervalo abrangendo de $\eta = 0$ a $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ representa 99,13% do valor final para o fluxo de calor radiativo, enquanto os intervalos de $\eta = 5000$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$ constituem apenas 0,88% do fluxo de calor.

Após análise dos resultados para as duas discretizações, é possível estabelecer um padrão, onde os valores de η mais relevantes para análise da radiação estão contidos no intervalo de $\eta = 0$ a $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$. Com isso, seria possível estabelecer um refinamento maior para a região de maior interesse, ou mesmo desconsiderar o restante do espectro reduzindo tempo e custo computacional das simulações em 50%.

Tabela 6.3 – Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de CO₂ e $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$.

Intervalo no espectro	Valores de η correspondente	%
1	de $\eta = 0$ a $\eta = 1666,5 \text{ cm}^{-1}$	14,11
2	de $\eta = 1666,83$ a $\eta = 3333,17 \text{ cm}^{-1}$	73,5
3	de $\eta = 3333,50$ a $\eta = 4999,83 \text{ cm}^{-1}$	11,52
4	de $\eta = 5000,17$ a $\eta = 6666,50 \text{ cm}^{-1}$	0,64
5	de $\eta = 6666,83$ a $\eta = 8333,17 \text{ cm}^{-1}$	0,22
6	de $\eta = 8333,50$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$	0,01

6.1.1 Avaliação do termo fonte radiativo, para diluição de 50% de CO₂

A Figura 6.7 apresenta a comparação dos valores para o termo fonte radiativo, calculado pela Equação 6.1, entre as soluções LBL, para $d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$, 10 cm^{-1} e $3,33 \text{ cm}^{-1}$, e a solução WSGG ao longo da linha de simetria da chama. Assim como o para os fluxos, a discretização mais grosseira apresenta os piores resultados. As curvas para $d\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ e $3,33 \text{ cm}^{-1}$ se sobrepõem o que corrobora com o resultado de que a solução com $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ já apresenta um nível de convergência confiável, assim como para os valores de fluxo radiativo que apresentaram essa mesma tendência.

O termo fonte corresponde ao negativo do divergente do fluxo radiativo, indicando o balanço entre a energia que é emitida e a energia que é absorvida pelo meio participante. Portanto, valores negativos indicam que naquele ponto o meio emite mais radiação que absorve e valores positivos indicam a predominância da absorção sobre a emissão.

A diferença no comportamento da curva observada com solução WSGG no início do domínio para com as curvas das soluções com o método LBL se dá, possivelmente, pela elevada concentração de CO₂ na região de entrada do combustível, devido à diluição, como pode ser visto na Figura 6.1 (b) do campo de concentração molar. Em vista dessa alta concentração de CO₂ as correlações para razões constantes, utilizadas na solução do WSGG, acabam subestimando o real comportamento do termo fonte radiativo nessa região. Essas variações das espécies químicas ao longo do domínio são ressaltadas na Figura 6.2.

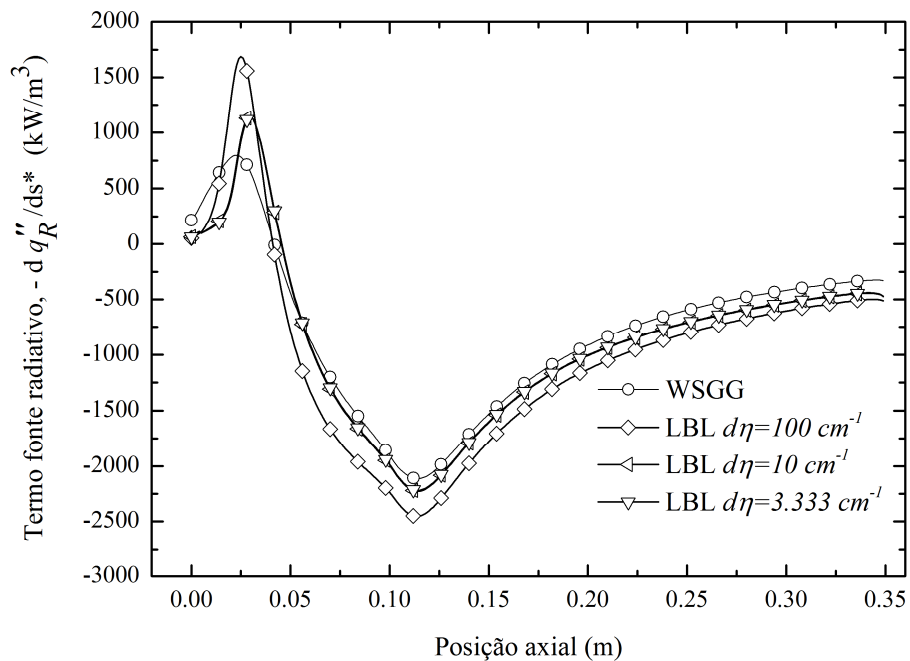
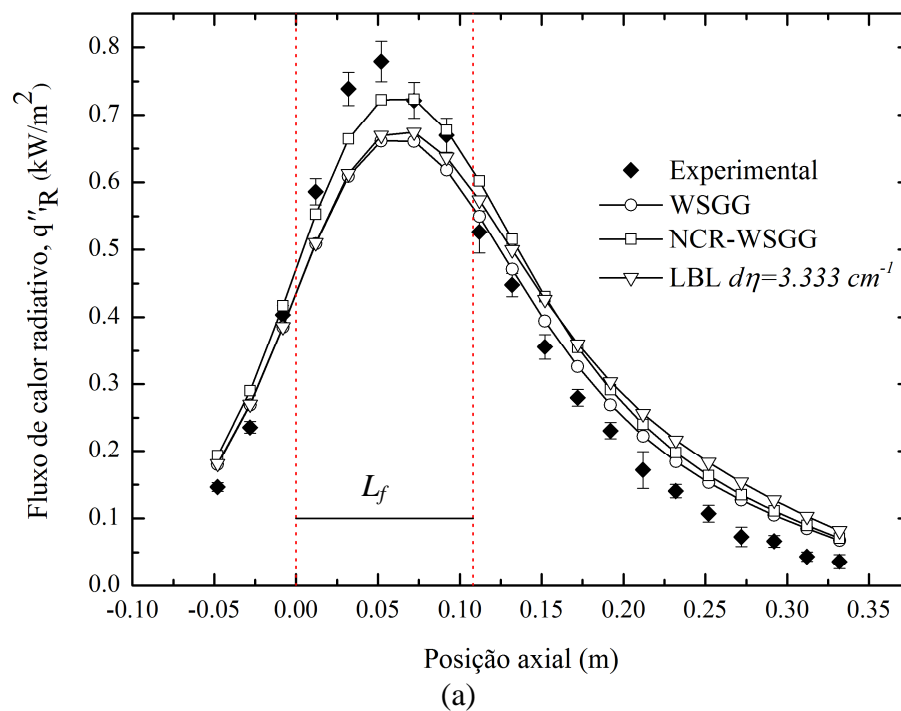
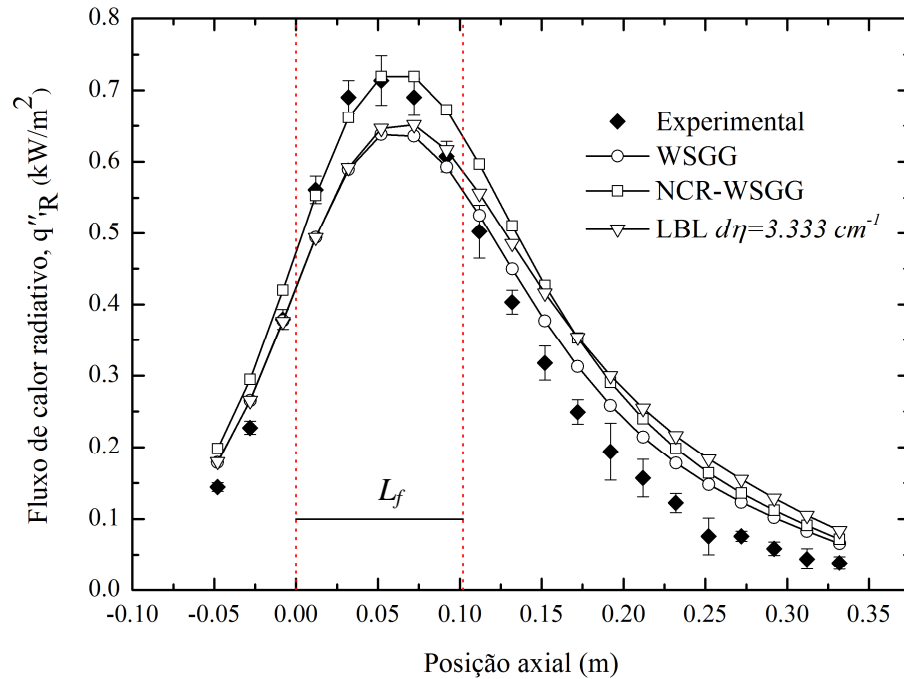


Figura 6.7 – Termo fonte de calor radiativo para diluição de 50% de CO₂.

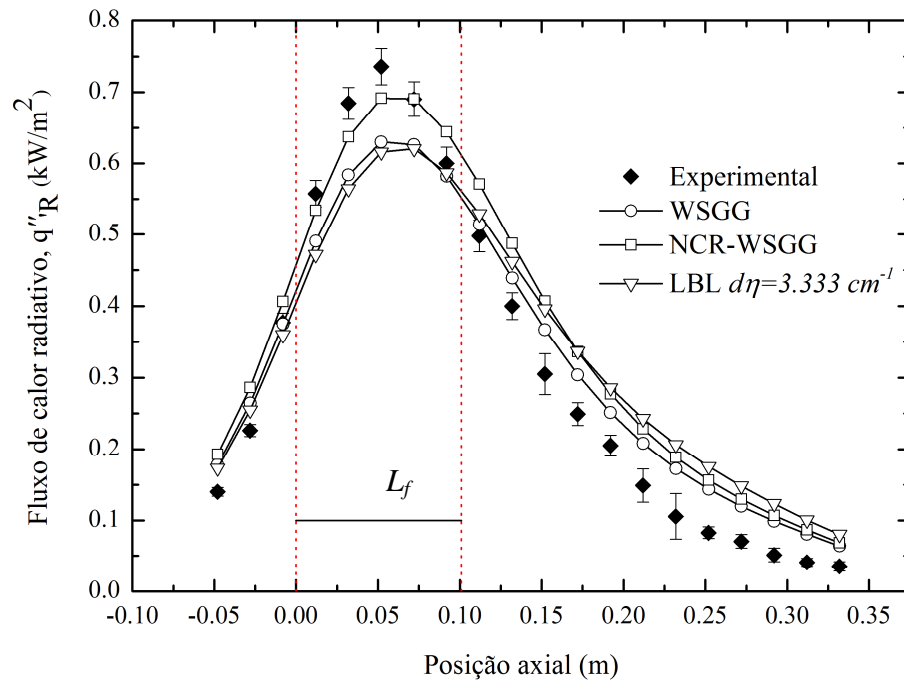
6.1.2 Outras diluições de CO₂: 40%, 20% e 10%

A Figura 6.8, a seguir, apresenta um comparativo dos resultados obtidos com o modelo WSGG com o NCR-WSGG, os dados experimentais e com o método LBL para uma discretização de $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$. Devido a limitações de tempo e demanda computacional optou-se por testar outras porcentagens de diluição somente para a *database* com $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ (NP=3000) a qual demanda a realização de 60 simulações no *Fluent*. Quanto maior o grau de refinamento da *database* a solução LBL tende a ser cada vez mais acurada, porém, como foi observada na avaliação mostrada anteriormente, a solução para do método com $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ apresentou resultados satisfatórios. São apresentados os gráficos do fluxo de calor radiativo para a diluição de 40% de CO₂ (Figura 6.8(a)), 20% de CO₂ (Figura 6.8(b)) e 10% de CO₂ (Figura 6.8(c)).





(b)



(c)

Figura 6.8– Fluxo calor radiativo para diluição de CO₂: (a) 40% (b) 20% e (c) 10%.

Dos gráficos apresentados, pode-se concluir que tanto o método LBL quanto o modelo WSGG, em todas as diluições, apresentaram uma concordância congruente entre eles, com desvios médios entre os métodos abaixo de 4%, resultados estes semelhantes aos já apresentados para a diluição de 50%. Os desvios máximos e médios entre as soluções, em relação ao método LBL podem ser vistos em maiores detalhes na Tabela 6.4. Também

observa-se em relação aos dados experimentais que as soluções LBL e WSGG se comportam de forma semelhante, com desvios máximos em na ordem de 15%. A Tabela 6.5 apresenta os valores dos desvios máximos e médios da solução WSGG em relação às soluções NCR-WSGG e os dados experimentais de Machado, 2015.

Com a solução utilizando o método NCR-WSGG identificou-se desvios ligeiramente mais elevados para com a solução LBL do que a solução utilizando o modelo tradicional do WSGG, conforme apresentado na Tabela 6.6. Entretanto, para os dados experimentais, o método NCR-WSGG para todas as diluições apresentou os menores desvios. Os maiores valores calculados dos desvios são para a diluição de 10% de CO₂, caso onde existe uma maior formação de fuligem devido à baixa porcentagem do diluente.

Tabela 6.4 – Desvio máximo e médio em relação ao LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções.

LBL $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$	WSGG		NCR-WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
40%	5,19	2,87	7,38	3,30	16,15	8,24
20%	6,46	3,56	10,15	4,29	15,09	9,49
10%	5,49	3,30	11	4,60	16,32	9,38

Tabela 6.5 – Desvio máximo e médio em relação ao WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.

WSGG	NCR-WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
40%	8,68	4,13	16,65	6,41
20%	11,62	5,69	14,15	6,90
10%	14,76	6,38	14,34	6,82

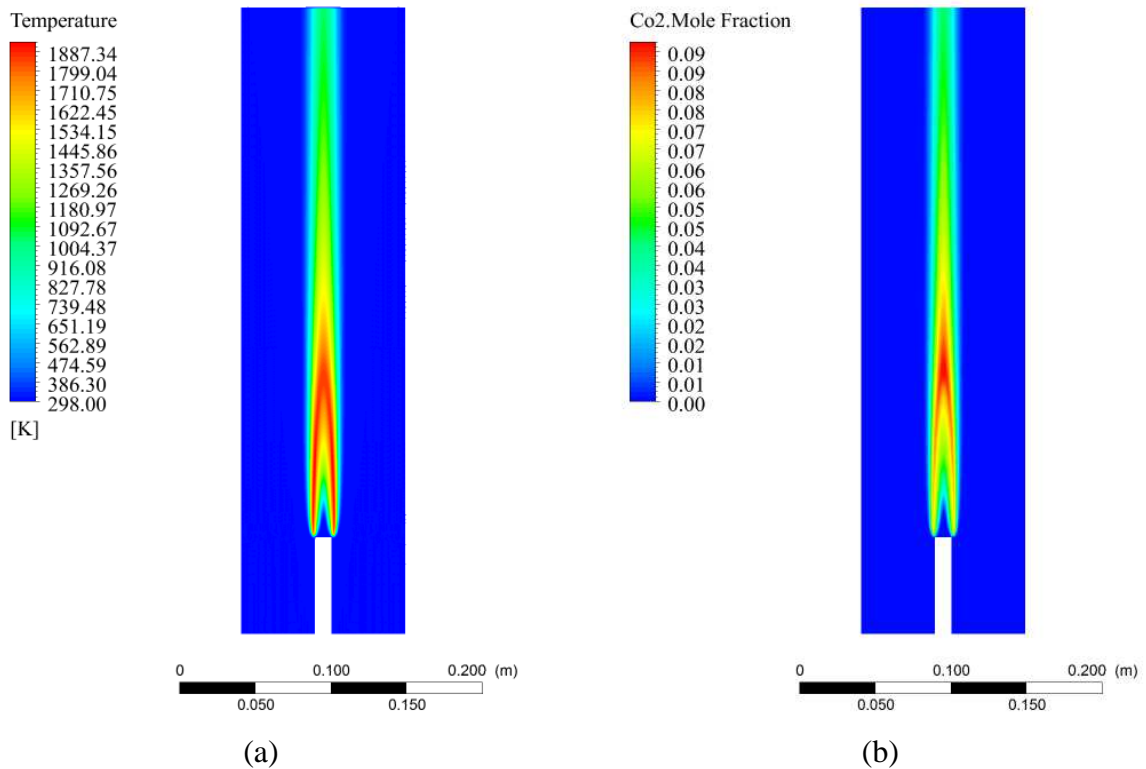
Tabela 6.6 – Desvio máximo e médio em relação ao método NCR-WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.

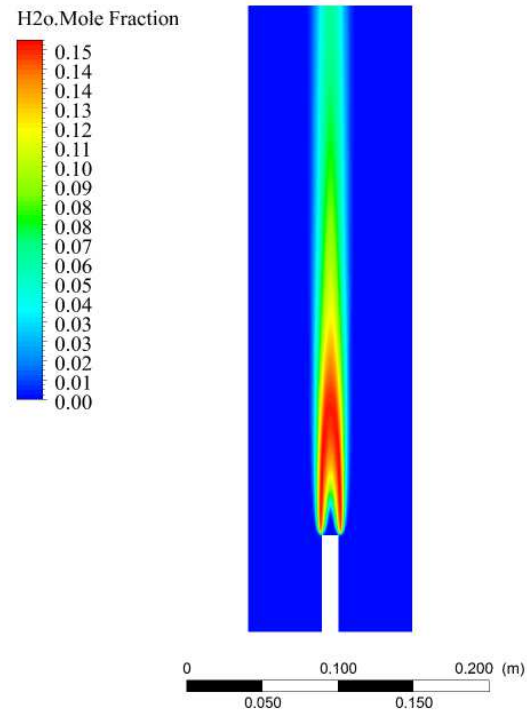
NCR-WSGG	WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
40%	9,50	4,52	9,72	4,52
20%	13,11	6,42	15,29	6,42
10%	10,21	5,04	13,88	5,04

6.2 Chamas diluídas com N_2

6.2.1 Diluição de 50% de N_2

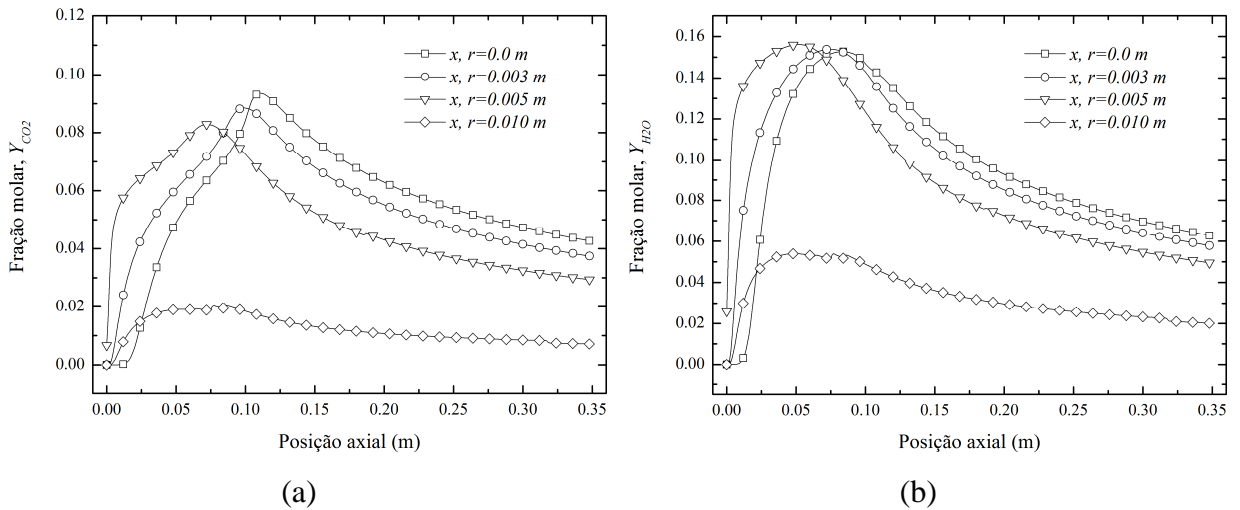
Os perfis de temperatura, concentração de CO_2 e de H_2O da solução numérica com diluição de 50% de N_2 podem ser vistos na Figura 6.9 a seguir. A maior temperatura é observada próximo ao local de entrada do combustível e oxidante. Essa região dá início à combustão, com a formação e destruição das espécies químicas impostas pelo modelo de cinética química. As temperaturas para a diluição de N_2 são maiores (1887 K) que as encontradas para a diluição de CO_2 (Figura 6.1 (a)). Os perfis de CO_2 e H_2O , Figuras 6.9 (b) e (c) respectivamente, apresentam na região um pouco mais afastada da entrada de combustível e oxidante os maiores valores de frações molares.





(c)

Figura 6.9 – (a) Perfil de temperatura; (b) Perfil de CO_2 com diluição de 50% e (c) Perfil de H_2O com diluição de 50%.



(a)

(b)

Figura 6.10 – Perfis de fração molar ao longo do domínio para linhas axiais: (a) CO_2 e (b) H_2O , para a diluição de 50% de N_2 .

A Figura 6.10 apresenta os perfis de fração molar ao longo do domínio computacional para linhas axiais de CO_2 e H_2O . Consta-se que no início do domínio a fração molar das

espécies é nula. A partir do momento que se dá a combustão as espécies químicas são formadas, atingem seu valor máximo e então decaem até um ponto de estabilidade. A Figura 6.10 mostra que existe uma variação nas concentrações nas espécies participantes ao longo do domínio, e conseqüentemente a razão das espécies não se mantêm constante, o que acaba divergindo das correlações utilizadas no modelo WSGG, as quais a razão é considerada constante. Uma das causas de erros intrínsecos, difíceis de serem mensurados, ao modelo WSGG pode ser atribuída a essa não homogeneidade nas razões das espécies participantes ao longo do domínio computacional.

A Figura 6.11 mostra os resultados obtidos numericamente para o fluxo de calor radiativo com diluição de 50% de N_2 para várias discretizações das *databases* da solução LBL em comparação com a solução obtida pelo método WSGG. Quando se analisa a solução LBL em relação à solução WSGG para a *database* mais grosseira ($d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$) o desvio máximo e o médio da solução com diluição de N_2 é de 10,72% e 6,83%. Quando o refino passa de $d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$ para $d\eta = 3.333 \text{ cm}^{-1}$ os desvios máximos e médios diminuem em aproximadamente 40%, conforme pode ser visto na Tabela 6.7. No entanto quando o refino passa de $d\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$ para $d\eta = 3.333 \text{ cm}^{-1}$ os desvios mantêm-se praticamente os mesmos, com as curvas se sobrepondo. Comparando a discretização $d\eta = 3.333 \text{ cm}^{-1}$ para com a $d\eta = 0.333 \text{ cm}^{-1}$ os resultados não apresentam uma melhora expressiva, que justifique a demanda computacional necessária na obtenção da solução para $d\eta = 0.333 \text{ cm}^{-1}$.

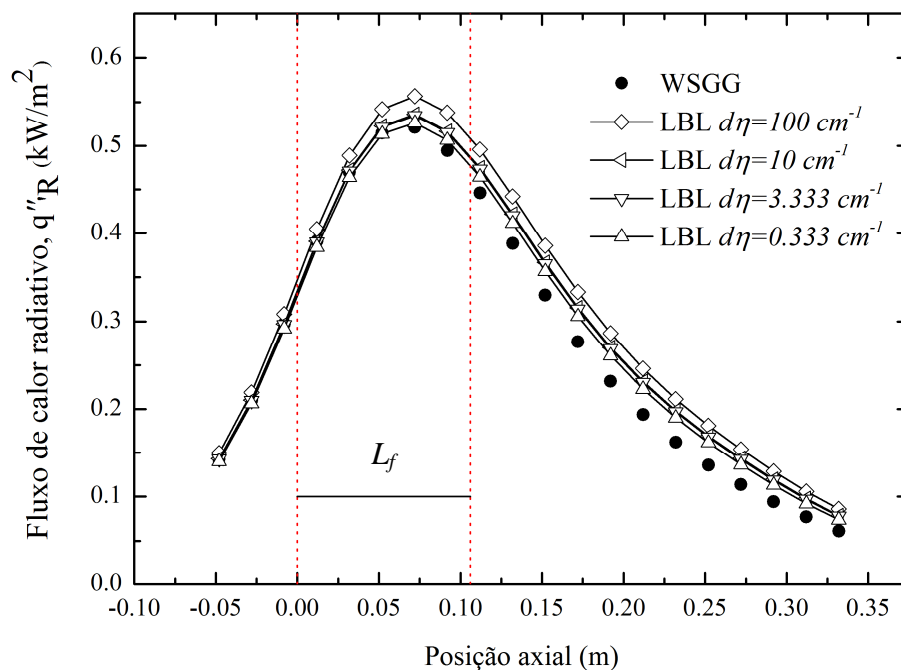


Figura 6.11 – Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de N_2 em comparação com WSGG.

Em relação à solução experimental, Figura 6.12, o caso mais refinado os valores dos desvios máximos e médios não mostraram uma melhora significativa, conforme a Tabela 6.7. Esse comportamento é o mesmo encontrado para a diluição de CO₂.

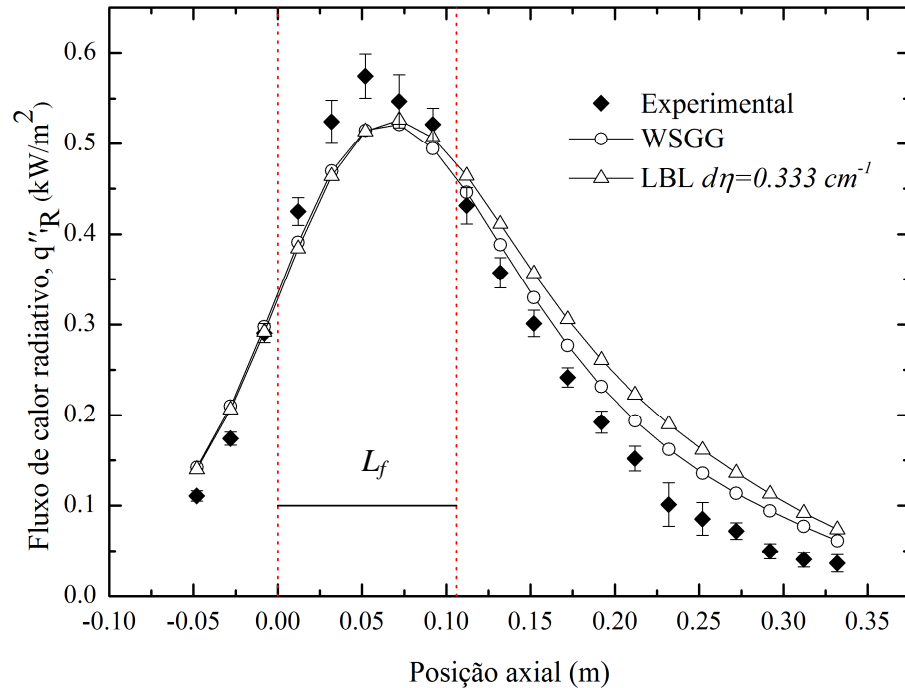


Figura 6.12 – Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de N₂ em comparação com medições

A Figura 6.13 acrescenta à discussão os dados obtidos com o modelo NCR-WSGG. O comportamento da solução com o NCR-WSGG é semelhante ao apresentado para a diluição de CO₂. Analisando os resultados com método NCR-WSGG em relação à solução LBL observa-se que os valores dos desvios não variam muito para as várias discretizações testadas. A Tabela 6.7 apresenta estes valores.

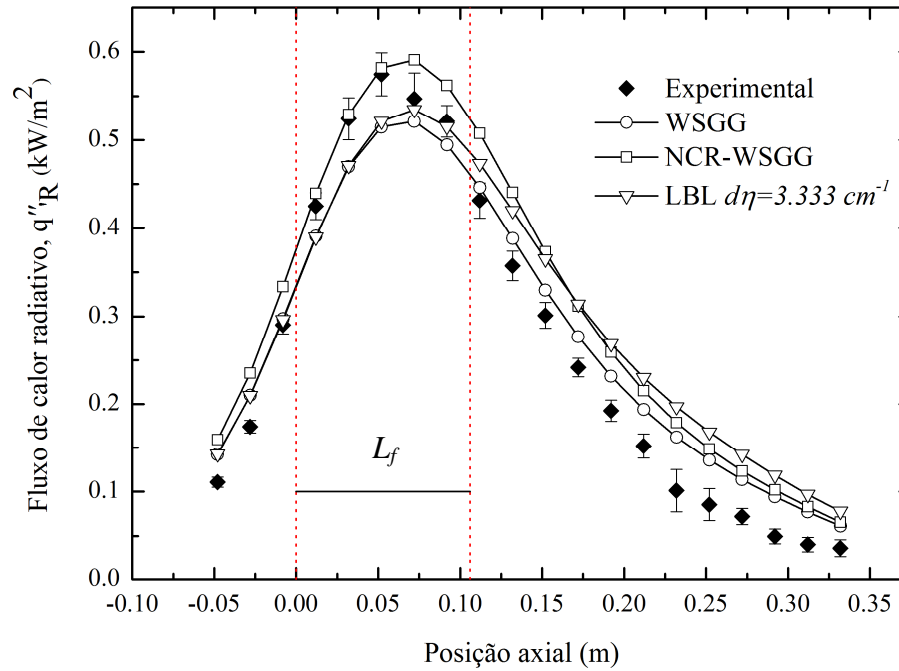


Figura 6.13 – Fluxo calor radiativo para diluição de 50% de N₂ entre solução LBL e abordagens distintas do WSGG.

A Tabela 6.7 mostra os desvios máximos (ζ_{max}) e médios (ζ_{avg}) calculados a partir da Equação 6.3 em relação aos dados experimentais, em relação ao modelo WSGG e ao NCR-WSGG.

Tabela 6.7 – Desvio máximo e médio de acordo com a discretização do LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções para diluição de 50% de N₂.

	WSGG		NCR-WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
NCR-WSGG	13,35	6,61	-	-	14,54	8,80
WSGG	-	-	11,78	5,83	10,57	6,30
LBL $d\eta = 500 \text{ cm}^{-1}$	15,47	10,57	8,56	4,57	22,24	12,74
LBL $d\eta = 200 \text{ cm}^{-1}$	13,36	8,84	7,10	4,26	20,78	11,71
LBL $d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$	10,79	6,83	6,79	4,19	19,15	10,54
LBL $d\eta = 50 \text{ cm}^{-1}$	8,86	5,24	8,69	4,37	17,87	9,66
LBL $d\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$	7,69	4,30	9,72	4,50	17,05	9,25
LBL $d\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$	7,42	4,09	9,97	4,54	16,84	9,17
LBL $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$	7,12	3,89	10,23	4,57	16,60	9,07
LBL $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$	5,64	3,07	11,52	4,81	15,41	8,59

Os resultados para o WSGG apresentaram uma concordância satisfatória até mesmo para discretizações menos refinadas da *database* com desvios médios de no máximo 10%. Observa-se que a partir da discretização de $d\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$ (NP=500) os desvios apresentam

pouca variação. Os desvios do resultado do LBL em relação aos dados experimentais apresentaram uma variação mais acentuada, a qual pode ser atribuída às incertezas de medições associadas ao problema.

6.2.2 Influência dos intervalos espectrais no fluxo de calor radiativo para diluição de N_2

Similarmente ao caso com diluição de 50% de CO_2 , o intervalo de $\eta = 0$ a $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ tem predominância no valor total para o fluxo de calor radiativo, onde os três primeiros intervalos considerados, de $\eta = 0$ a $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ correspondem a 98,54% do valor final do fluxo, o restante do espectro (de $\eta = 5000$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$) representa apenas 1,464%. A Tabela 6.8 apresenta com maiores detalhes esses valores e a Figura 6.14 apresenta esses valores graficamente.

Para o caso com $d\eta = 3,333 \text{ cm}^{-1}$ a maior influência também se encontra no intervalo de $\eta = 0$ a $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ com o equivalente a 98,56% do valor do fluxo de calor radiativo encontrado. E o restante do espectro com o equivalente a 1,44% do fluxo de calor, conforme apresentado na Tabela 6.9. Da mesma forma, o tempo e custo computacionais envolvidos para as simulações dos casos considerando somente o intervalo até $\eta = 5000 \text{ cm}^{-1}$ reduzir-se-iam pela metade.

Tabela 6.8 – Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de N_2 e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.

Intervalo no espectro	Valores de η correspondente	N_2 -30000 %
1	de $\eta = 0$ a $\eta = 1666,5 \text{ cm}^{-1}$	17,37
2	de $\eta = 1666,83$ a $\eta = 3333,17 \text{ cm}^{-1}$	67,05
3	de $\eta = 3333,50$ a $\eta = 4999,83 \text{ cm}^{-1}$	14,12
4	de $\eta = 5000,17$ a $\eta = 6666,50 \text{ cm}^{-1}$	1,05
5	de $\eta = 6666,83$ a $\eta = 8333,17 \text{ cm}^{-1}$	0,40
6	de $\eta = 8333,50$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$	0,01

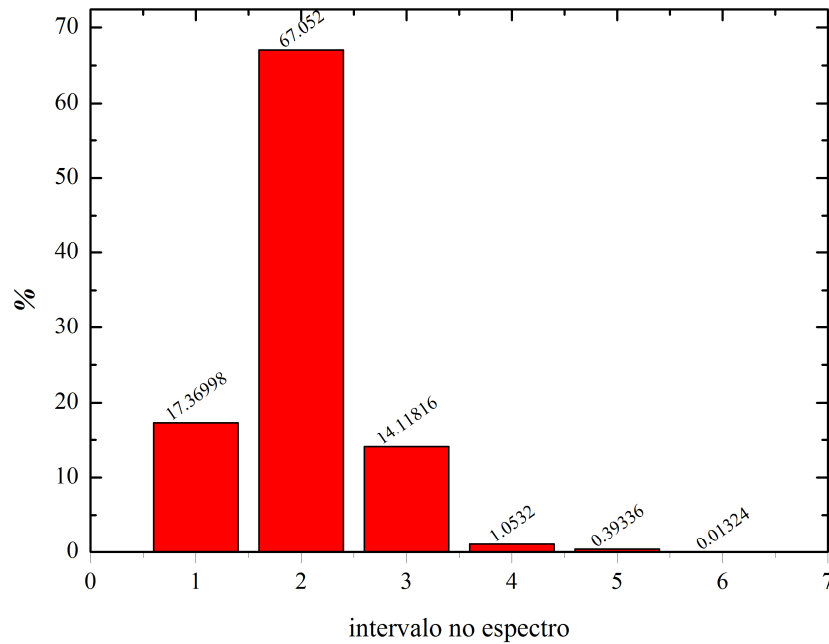


Figura 6.14 – Representação da porcentagem para cada intervalo do espectro para chama com diluição de 50% de N_2 e $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$.

Tabela 6.9 – Influência de cada intervalo espectral para o fluxo de calor radiativo na chama com diluição de 50% de N_2 e $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$.

Intervalo no espectro	Valores de η correspondente	%
1	de $\eta = 0$ a $\eta = 1666,5 \text{ cm}^{-1}$	18,13
2	de $\eta = 1666,83$ a $\eta = 3333,17 \text{ cm}^{-1}$	66,43
3	de $\eta = 3333,50$ a $\eta = 4999,83 \text{ cm}^{-1}$	14,00
4	de $\eta = 5000,17$ a $\eta = 6666,50 \text{ cm}^{-1}$	1,03
5	de $\eta = 6666,83$ a $\eta = 8333,17 \text{ cm}^{-1}$	0,39
6	de $\eta = 8333,50$ a $\eta = 10000 \text{ cm}^{-1}$	0,02

6.2.3 Avaliação do termo fonte radiativo, para diluição de 50% de N_2

A Figura 6.15 apresenta a comparação dos valores calculados (Equação 6.1) para o termo fonte radiativo entre as soluções LBL para $d\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$, 10 cm^{-1} e $3,33 \text{ cm}^{-1}$ e a solução WSGG ao longo da linha de simetria da chama. As curvas obtidas para o termo fonte radiativo com diluição de N_2 com o método LBL, em todas as discretizações aqui analisadas, praticamente se sobrepõem com a curva da solução com WSGG para a região inicial do domínio, diferentemente do que acontece com a diluição de CO_2 . Acredita-se que isso ocorre devido ao fato de que a concentração de CO_2 está mais bem distribuída ao longo do domínio, como pode ser visto nas Figuras 6.9(b) e 6.10 e, portanto, as correlações utilizadas para o cálculo do modelo WSGG atendem melhor a esta condição, a Figura 6.10 mostra os valores

de fração molar para as espécies participantes ao longo do domínio. Os valores negativos encontrados mostram uma predominância da emissão do meio sobre a absorção para toda a chama.

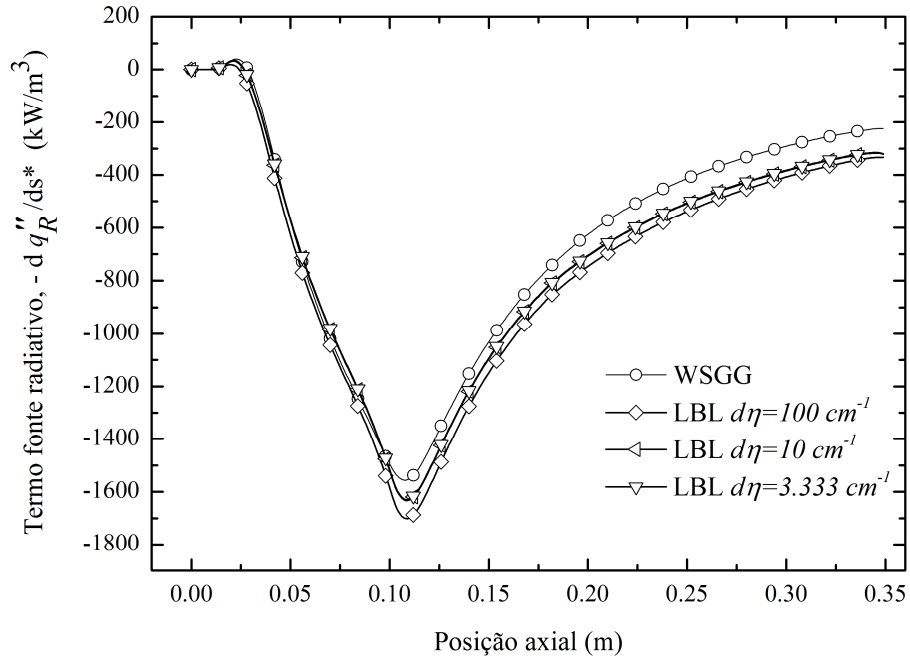


Figura 6.15 – Termo fonte de calor radiativo para diluição de 50% de N_2 .

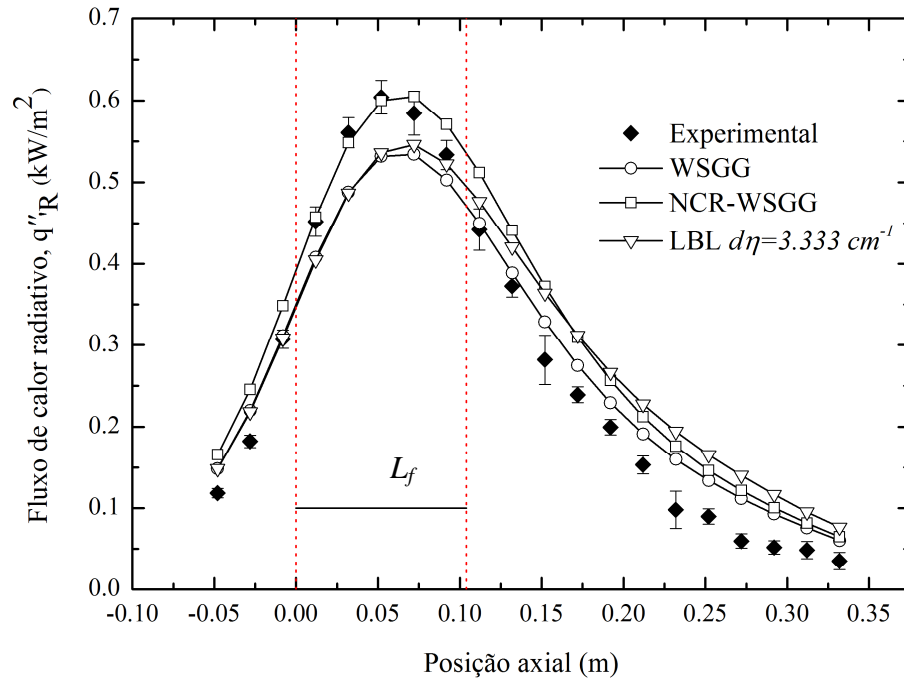
6.2.4 Outras diluições de N_2 : 40%, 20% e 10%

A Figura 6.16 apresenta os valores para o fluxo de calor radiativo para as chamas com diluição de 40% de N_2 (Figura 6.16(a)), 20% de N_2 (Figura 6.16 (b)) e 10% de N_2 (Figura 6.16(c)), com o modelo WSGG o método NCR-WSGG, os dados experimentais e com o método LBL para uma discretização de $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$. Assim como para os casos com diluição de CO_2 , somente a *database* com $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ (NP=3000) foi analisada para estas porcentagens.

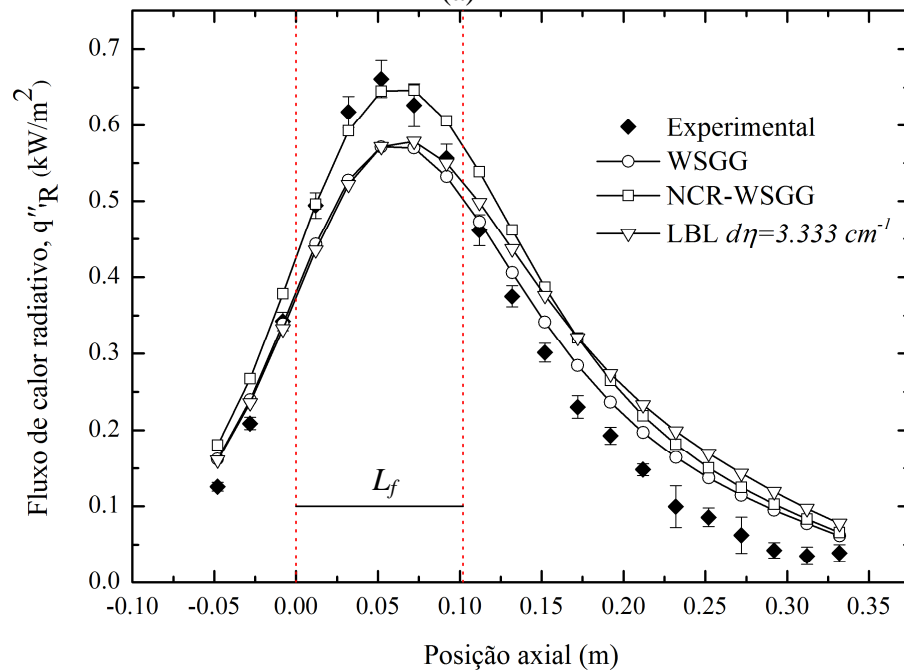
As soluções para o WSGG e o método LBL apresentam boa consonância principalmente para o início do domínio para as três porcentagens de diluição, com desvios médios entre os métodos abaixo de 4%. Na região do meio para o fim do domínio o comportamento das curvas foi o mesmo observado com as diluições de CO_2 . A ocorrência dessa disparidade nessa região de pluma aquecida pode ser atribuída, assim como para a diluição de CO_2 , a condição de contorno imposta para a simulação no *Fluent*

Quanto à convergência para com os dados experimentais as soluções LBL e WSGG se comportam de forma semelhante, com desvios máximos na ordem de 15% e médios em torno

de 9% para a solução LBL e 7% para com a solução WSGG. Quanto menor a porcentagem de diluente mais pronunciado são os desvios entre as soluções. Isso porque quanto menor a porcentagem de diluente maior é a formação de fuligem, o que acaba afetando diretamente os valores da radiação medidos experimentalmente.



(a)



(b)

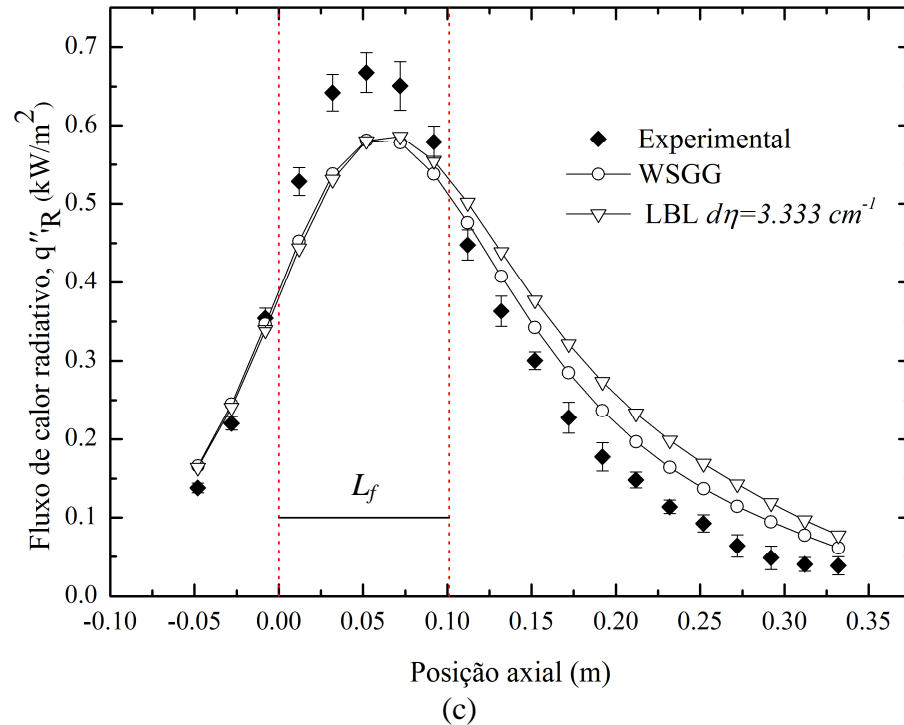


Figura 6.16 – Fluxo calor radiativo para diluição de N₂: (a) 40% (b) 20% e (c) 10%.

Observando o comportamento da solução obtida para o método NCR-WSGG com as demais soluções, pode se dizer que o método NCR-WSGG prediz bem os dados experimentais na região dos maiores valores de fluxo, $x = 0,05\text{m}$. Entretanto, para a região final do domínio o método NCR-WSGG não é capaz de precisar os dados experimentais. Essa divergência na região do meio para o fim do domínio acaba culminando em desvios máximos elevados. Porém em razão da primeira parte do domínio, onde os resultados são melhores, os desvios médios acabam sendo baixos. Novamente a solução para a diluição de 10% apresentou os desvios mais pronunciados, como pode ser visto na Tabela 6.10.

Os valores dos desvios máximos e médios da solução LBL com $d\eta = 3,33\text{ cm}^{-1}$ em relação às soluções do WSGG, NCR-WSGG e os dados experimentais de Machado, 2015, são mostrados na Tabela 6.10. Já a Tabela 6.11 apresenta os valores dos desvios máximos e médios da solução WSGG em relação às soluções NCR-WSGG e os dados experimentais de Machado, 2015. E, por fim, a Tabela 6.12 apresenta os valores dos desvios máximos e médios da solução NCR-WSGG em relação às soluções WSGG e os dados experimentais de Machado, 2015.

Tabela 6.10 – Desvio máximo e médio de acordo com a discretização do LBL para fluxo de calor radiativo entre as soluções.

LBL $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$	WSGG		NCR-WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
40%	6,94	3,78	10,56	4,63	15,96	9,02
20%	6,47	3,57	11,34	4,80	14,98	9,37
10%	6,35	3,53	11,52	4,83	16,60	9,87

Tabela 6.11 – Desvio máximo e médio em relação ao WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.

WSGG	NCR-WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
40%	11,70	5,73	12,02	6,35
20%	11,82	5,72	13,60	6,77
10%	11,82	5,68	15,54	7,26

Tabela 6.12 – Desvio máximo e médio em relação ao NCR-WSGG para fluxo de calor radiativo entre as soluções.

NCR-WSGG	WSGG		Experimental	
	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{avg}(\%)$
40%	13,31	6,52	14,90	7,91
20%	13,37	6,45	13,64	8,21
10%	13,33	6,42	15,13	8,13

6.3 Cálculo da fração radiante X_r para as chamas diluídas de CO_2 e N_2

A fração radiante definida como a fração da energia total que é liberada pela chama e que é transferida para o meio por radiação foi obtida de acordo com a Equação 4.1. A fração radiante é um parâmetro importante em relação aos efeitos da diluição na transferência radiativa. A Figura 6.17 apresenta graficamente a fração radiante medida experimentalmente, para o método LBL e para as duas abordagens do modelo WSGG em função do percentual de diluição para a diluição de CO_2 e N_2 . Os mesmos pontos para os quais foram feitas as medidas experimentais do fluxo de calor radiativo foram utilizados para obtenção de X_r .

Os valores obtidos a partir da simulação numérica para a fração radiante são superiores aos valores obtidos experimentalmente para todos os casos estudados, indicando que a perda radiativa para a solução numérica é superestimada em relação ao experimento. Ainda, NCR-WSGG apresentou valores superiores aos obtidos com o WSGG tradicional e o

método LBL. Para as chamas com diluição de N_2 o aumento do percentual de diluição faz com que a fração radiante diminua em contrapartida para as chamas com diluição de CO_2 o aumento do percentual de diluente faz com que a fração radiante aumente.

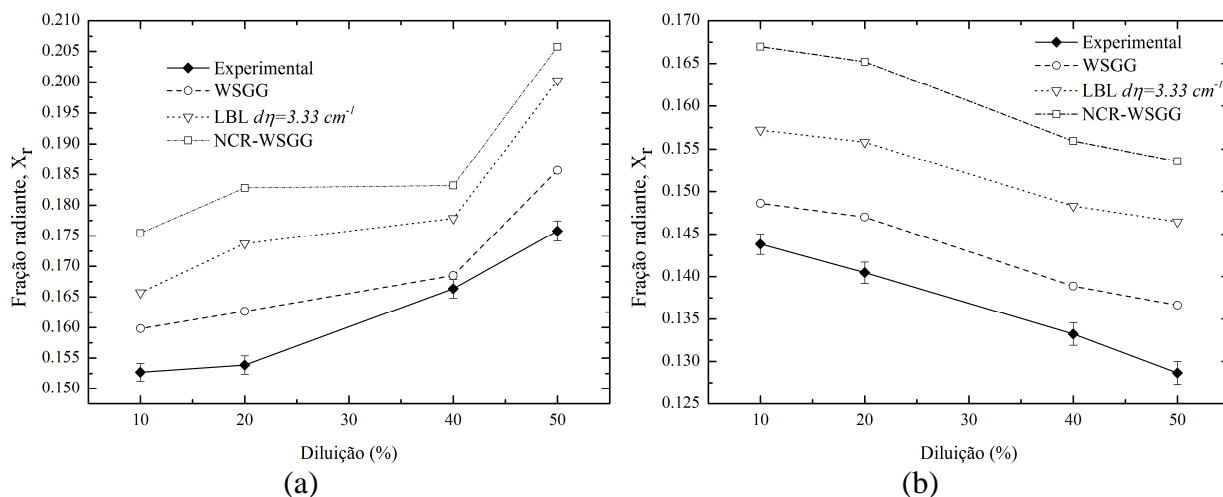


Figura 6.17 – Fração radiante em função do percentual de diluição para as chamas diluídas com (a) CO_2 e (b) N_2 .

As Tabelas 6.13 e 6.14 apresentam os valores calculados para a fração radiante nas chamas diluídas com CO_2 e N_2 , respectivamente, para as soluções numéricas e os dados experimentais.

Tabela 6.13 – Fração radiante para diluição de CO_2 .

	Diluição de CO_2			
	50%	40%	20%	10%
Experimental	17,58	16,63	15,39	15,27
LBL	20,01	17,79	17,37	16,57
WSGG	18,57	16,85	16,26	15,98
NCR-WSGG	20,58	18,32	18,28	17,55

Tabela 6.14 – Fração radiante para diluição de N_2 .

	Diluição de N_2			
	50%	40%	20%	10%
Experimental	12,87	13,32	14,04	14,38
LBL	14,65	14,83	15,58	15,72
WSGG	13,66	13,89	14,70	14,86
NCR-WSGG	15,36	15,59	16,52	16,69

6.4 Avaliação da discretização das *databases* na solução de um problema 1D

Em vista de limitações computacionais uma nova avaliação da independência da solução LBL em relação à discretização das *databases* foi proposta. Para tal, foi utilizado uma rotina Fortran para a solução de um problema 1D, já desenvolvida pelo grupo de radiação na UFRGS.

O problema 1D, aqui avaliado, é o mesmo em que a UDF para o LBL foi verificada e validada. A geometria do problema compõe-se de duas placas planas infinitas paralelas com meio participante entre elas, conforme a Figura 6.18, formando um sistema unidimensional. As superfícies das placas são tratadas como corpos negros. O termo fonte radiativo e o fluxo de calor radiativo foram calculados pelas, já apresentadas, Equações 6.1 e 6.2 respectivamente.

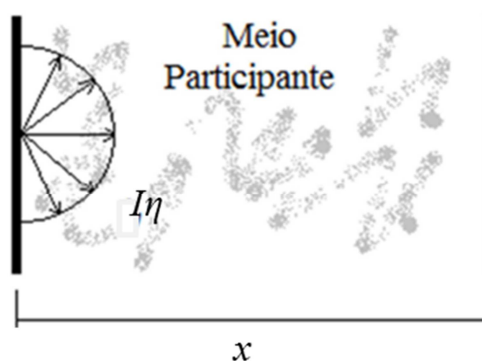


Figura 6.18– Representação da geometria utilizada [adaptada de Dorigon, 2012].

Os perfis de temperatura e concentração molar utilizadas nessa avaliação são os mesmos utilizados no Capítulo 5, Seção 5.5.1, para validação da UDF do LBL, Equações 5.6, 5.7 e 5.8.

As Equações 6.3 e 6.4 calculam os desvios máximos e médios entre as soluções com diferentes discretizações para fluxo de calor, q_R'' , e para o termo fonte de calor, \dot{q}_R , respectivamente.

Os valores obtidos para os desvios máximos e médios foram calculados em relação à solução para o $d\eta = 0,066 \text{ cm}^{-1}$, equivalente a $NP=150000$. É importante ressaltar que as soluções para as demais discretizações testadas foram obtidas a partir dessa resolução de $NP=150000$, assim como as *databases* utilizadas na solução da chama no *Fluent*. Assim,

$$desvio_{q_R}''(x) = \frac{\left| q_{R(LBL_{150000})}''(x) - q_{R(LBL)}''(x) \right|}{\max \left| q_{R(LBL_{150000})}''(x) \right|} \cdot 100\% \quad (6.3)$$

e

$$desvio_{q_R}'(x) = \frac{\left| q_{R(LBL_{150000})}'(x) - q_{R(LBL)}'(x) \right|}{\max \left| q_{R(LBL_{150000})}'(x) \right|} \cdot 100\% \quad (6.4)$$

A rotina Fortran possibilita a avaliação da solução para *databases* com um grau de refino maior que as *databases* que foram utilizadas para a solução no *Fluent*. Dessa forma, a Tabela 6.15, a seguir, relaciona o número de intervalos da *database* e o valor de d_η correspondente. Os valores em destaque são os mesmos que foram utilizados para a simulação da chama no *Fluent*.

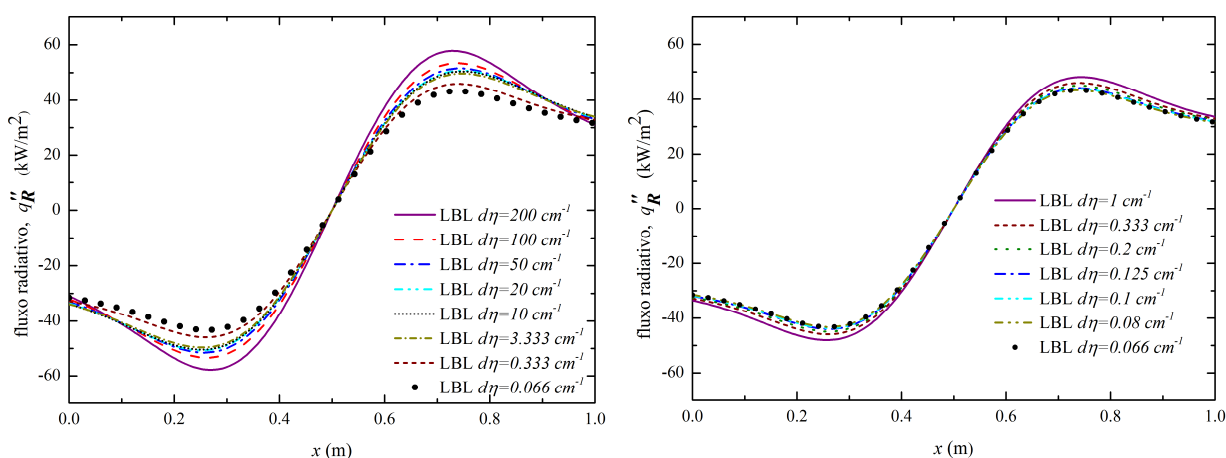
Tabela 6.15 – Discretizações das *databases* utilizadas no Fortran.

Número de intervalos (NP) da <i>database</i>	Valores de d_η para cada intervalo
50	$d_\eta = 200 \text{ cm}^{-1}$
100	$d_\eta = 100 \text{ cm}^{-1}$
200	$d_\eta = 50 \text{ cm}^{-1}$
500	$d_\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$
1000	$d_\eta = 10 \text{ cm}^{-1}$
3000	$d_\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$
30000	$d_\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$
10000	$d_\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$
50000	$d_\eta = 0,2 \text{ cm}^{-1}$
80000	$d_\eta = 0,125 \text{ cm}^{-1}$
100000	$d_\eta = 0,1 \text{ cm}^{-1}$
125000	$d_\eta = 0,08 \text{ cm}^{-1}$
150000	$d_\eta = 0,066 \text{ cm}^{-1}$
200000	$d_\eta = 0,05 \text{ cm}^{-1}$

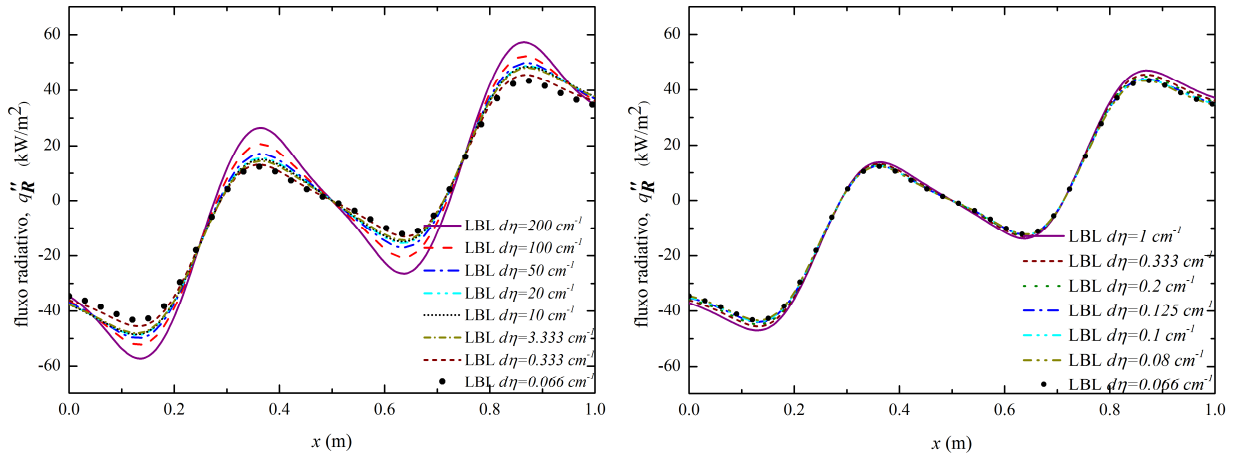
A Figura 6.19 apresenta um comparativo para os diferentes valores de discretizações das *databases* utilizadas na solução com o método LBL, para o fluxo de calor radiativo para os três perfis de temperatura já apresentados. Os gráficos da esquerda mostram a solução do problema 1D, resolvida no Fortran, para os mesmos valores $d\eta$ que foram simuladas as solução 2D. Já a coluna da direita apresenta os resultados para discretizações de $d\eta$ menores das que foram possíveis de simular no caso 2D no *Fluent*. A solução para $d\eta = 0,066 \text{ cm}^{-1}$ foi estabelecida como *benchmark* para análise dos resultados.

De maneira geral, os resultados para as discretizações menos refinadas, para os três perfis de temperatura, são relativamente discrepantes, o que já era esperado. Para o maior valor de $d\eta$ (200 cm^{-1}) os desvios máximo e médio chegam a 34% e 20%, aproximadamente, para todos os perfis de temperatura. Já para um $d\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$, esses desvios reduzem pela metade. Analisando os desvios de $d\eta = 1 \text{ cm}^{-1}$ para com o $d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$, verifica-se uma redução em quase 50% entre os valores. Outro ponto que vale salientar é que a partir de $d\eta = 0,125 \text{ cm}^{-1}$ os desvios entre a soluções são praticamente irrisórios, menores de 1% para os desvios máximos e 0,5% para os desvios médios. Os valores para os desvios máximos e médios são apresentados na Tabela 6.16 para o perfil de temperatura simétrico (Equação 5.6), na Tabela 6.17 para o perfil de temperatura com dupla simetria (Equação. 5.7), e a Tabela 6.18 para o perfil de temperatura assimétrico (Equação 5.8).

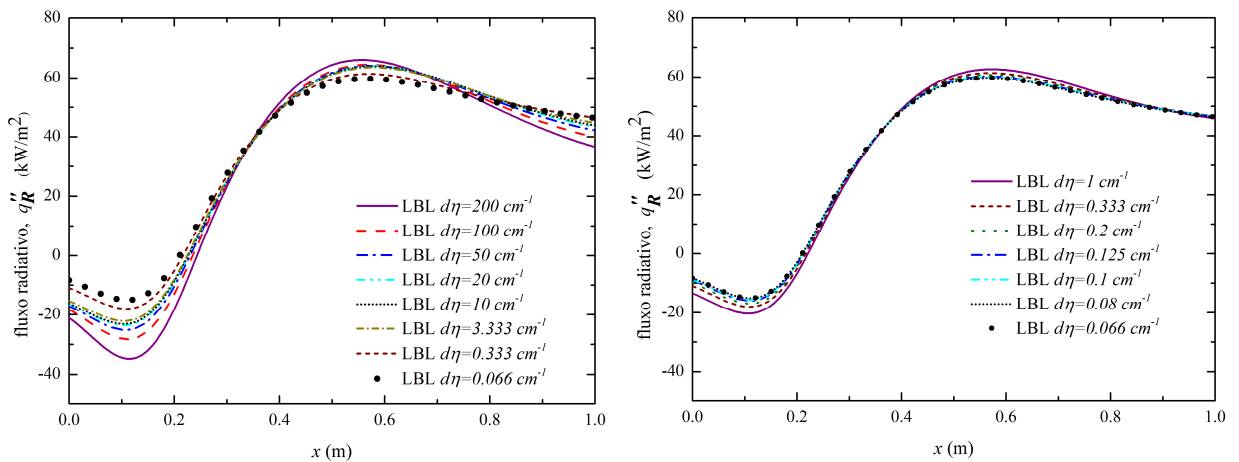
A Tabela 6.16 mostra os valores de desvios máximo e médio para o perfil de temperatura simétrico (Equação. 5.6), a Tabela 6.17 para o perfil de temperatura com dupla simetria (Equação. 5.7), e a Tabela 6.18 para o perfil de temperatura assimétrico (Equação 5.8), para o fluxo de calor e o termo fonte radiativo.



(a) Perfil simétrico Equação 5.6



(b) Perfil com dupla simetria Equação 5.7



(c) Perfil assimétrico Equação 5.8

Figura 6.19 – Fluxo de calor radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.

A Figura 6.20 apresenta uma comparação para os diferentes valores de discretizações das *databases* para o termo fonte de calor radiativo para os três perfis de temperatura, já apresentados. Da mesma forma que para o fluxo, os gráficos da esquerda mostram a solução do problema 1D, resolvida no Fortran, para os mesmos $d\eta$ que foram utilizados na solução 2D. A coluna da direita apresenta os resultados para discretizações de $d\eta$ menores das que foram possíveis de realizar no problema 2D do *Fluent*. Novamente, a solução para $d\eta = 0,066 \text{ cm}^{-1}$ foi estabelecida como *benchmark*.

O termo fonte de calor radiativo comporta-se de forma análoga aos resultados já analisados para o fluxo de calor. As menores discretizações apresentam os maiores desvios entre a solução estabelecida como *benchmark* ($d\eta = 0,066 \text{ cm}^{-1}$) para os três perfis de temperatura. Quanto maior a discretização melhor a precisão dos resultados. Entretanto

quanto maior a discretização maior é o tempo computacional despendido na obtenção da solução.

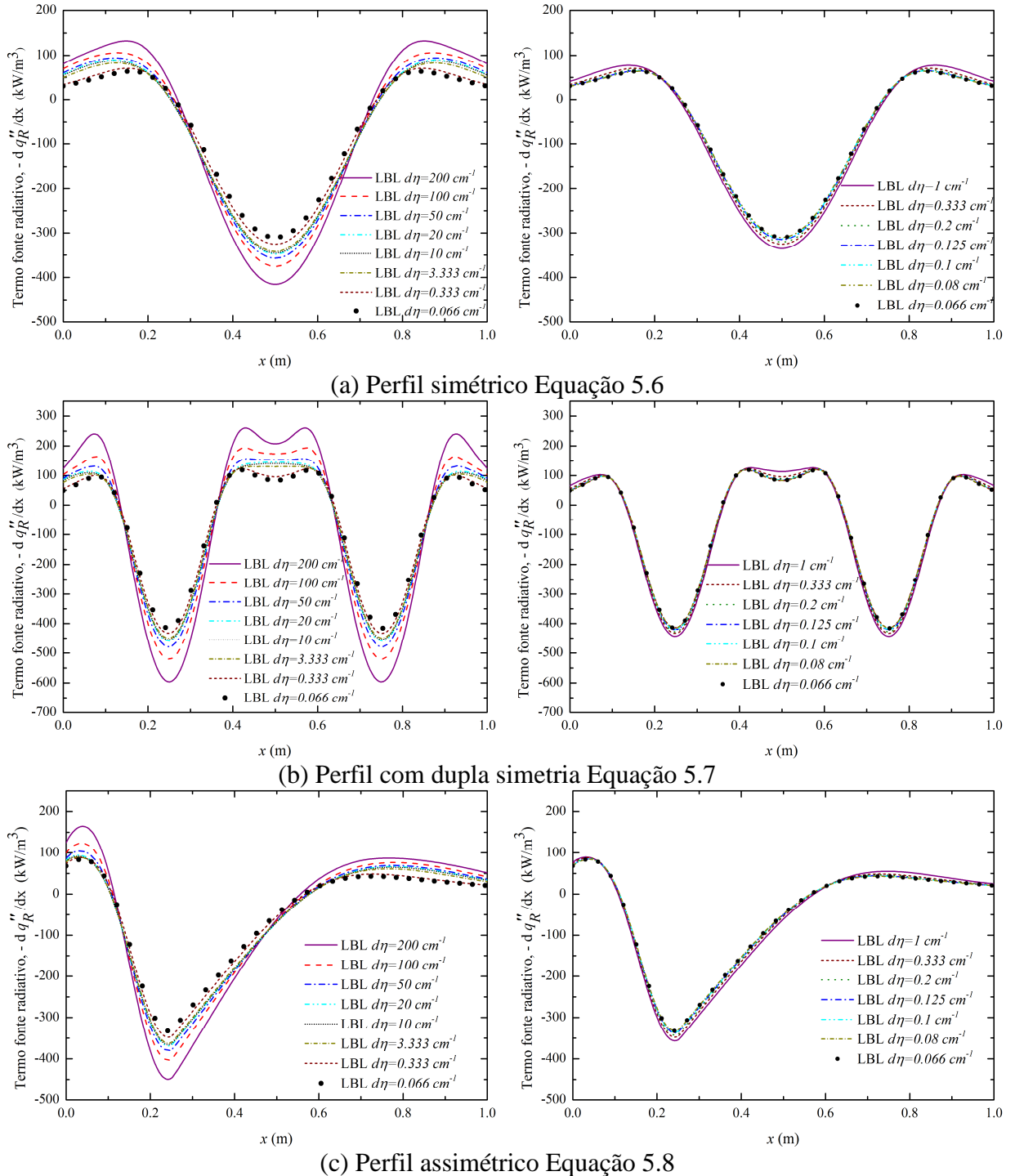


Figura 6.20 – Termo fonte radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.

Tabela 6.16 – Desvio máximo e médio em relação a discretização do LBL para fluxo e termo fonte para o Perfil simétrico Equação 5.6.

NP	$d\eta$ (cm ⁻¹)	Fluxo		Termo fonte	
		Máximo	Médio	Máximo	Médio
200000	0,05	0,39	0,29	0,35	0,15
150000	0,0666	-	-	-	-
125000	0,08	0,15	0,07	0,07	0,04
100000	0,1	1,16	0,85	1,06	0,45
80000	0,125	1,73	1,25	1,56	0,69
50000	0,2	3,85	2,74	3,26	1,57
30000	0,333	6,18	4,28	4,95	2,63
10000	10	11,36	7,62	8,09	5,06
3000	3,333	15,36	10,12	10,21	7,06
1000	10	17,19	11,18	11,36	8,15
500	20	17,78	11,48	12,17	8,67
200	50	19,18	12,37	15,13	9,82
100	100	23,28	14,50	21,03	12,81
50	200	33,74	19,74	33,92	19,43

Tabela 6.17 – Desvio máximo e médio em relação a discretização do LBL para fluxo e termo fonte para o Perfil duplo simétrico Equação 5.7.

NP	$d\eta$ (cm ⁻¹)	Fluxo		Termo fonte	
		Máximo	Médio	Máximo	Médio
200000	0,05	0,34	0,17	0,31	0,12
150000	0,0666	-	-	-	-
125000	0,08	0,14	0,06	0,08	0,04
100000	0,1	1,03	0,54	1,00	0,41
80000	0,125	1,51	0,79	1,43	0,63
50000	0,2	3,21	1,70	2,90	1,34
30000	0,333	4,94	2,64	4,29	2,22
10000	10	8,59	4,63	7,28	4,11
3000	3,333	11,29	6,12	11,38	5,74
1000	10	12,44	6,86	13,85	6,82
500	20	12,85	7,28	15,02	7,58
200	50	14,95	8,74	16,85	10,20
100	100	20,42	12,29	25,52	16,23
50	200	32,79	18,87	43,60	27,76

Tabela 6.18 – Desvio máximo e médio em relação a discretização do LBL para fluxo e termo fonte para o Perfil assimétrico Equação 5.8.

NP	$d\eta$ (cm ⁻¹)	Fluxo		Termo fonte	
		Máximo	Média	Máximo	Média
200000	0,05	0,3	0,16	0,34	0,11
150000	0,0666	-	-	-	-
125000	0,08	0,08	0,04	0,07	0,03
100000	0,1	0,91	0,45	1,02	0,34
80000	0,125	1,36	0,66	1,47	0,51
50000	0,2	3,04	1,43	3,05	1,15
30000	0,333	4,92	2,21	4,55	1,92
10000	10	9,08	3,89	7,23	3,69
3000	3,333	12,37	5,29	9,03	5,23
1000	10	14,02	5,99	10,08	6,07
500	20	14,73	6,28	10,92	6,45
200	50	16,94	7,03	14,37	7,45
100	100	22,07	8,78	21,27	9,86
50	200	33,08	12,59	35,19	15,03

A Figura 6.21 mostra uma comparação para o fluxo de calor radiativo para os três perfis de temperatura estudados. Para essa comparação foi gerada uma *database* para um NP maior (NP=200000) do que a vinha sendo utilizada como referência (NP=150000), com o propósito de mostrar que a solução com NP=150000 já está independente. Os valores dos desvios máximos atestam essa afirmação, uma vez que os valores são inferiores a 0,4% para todos os perfis de temperatura.

As curvas para os $d\eta= 0,333$ cm⁻¹ e $d\eta= 3,33$ cm⁻¹ foram escolhidas para serem apresentadas, pois foram as implementadas na solução da chama no *Fluent*. As curvas para as discretizações menos refinadas mostram uma diferença mais significativa principalmente na região da parede. O caso para $d\eta= 3,33$ cm⁻¹ tem desvios médio de 5,29% em relação à solução com $d\eta= 0,066$ cm⁻¹, enquanto o caso para $d\eta= 0,333$ cm⁻¹ tem um desvio médio de 2,21%.

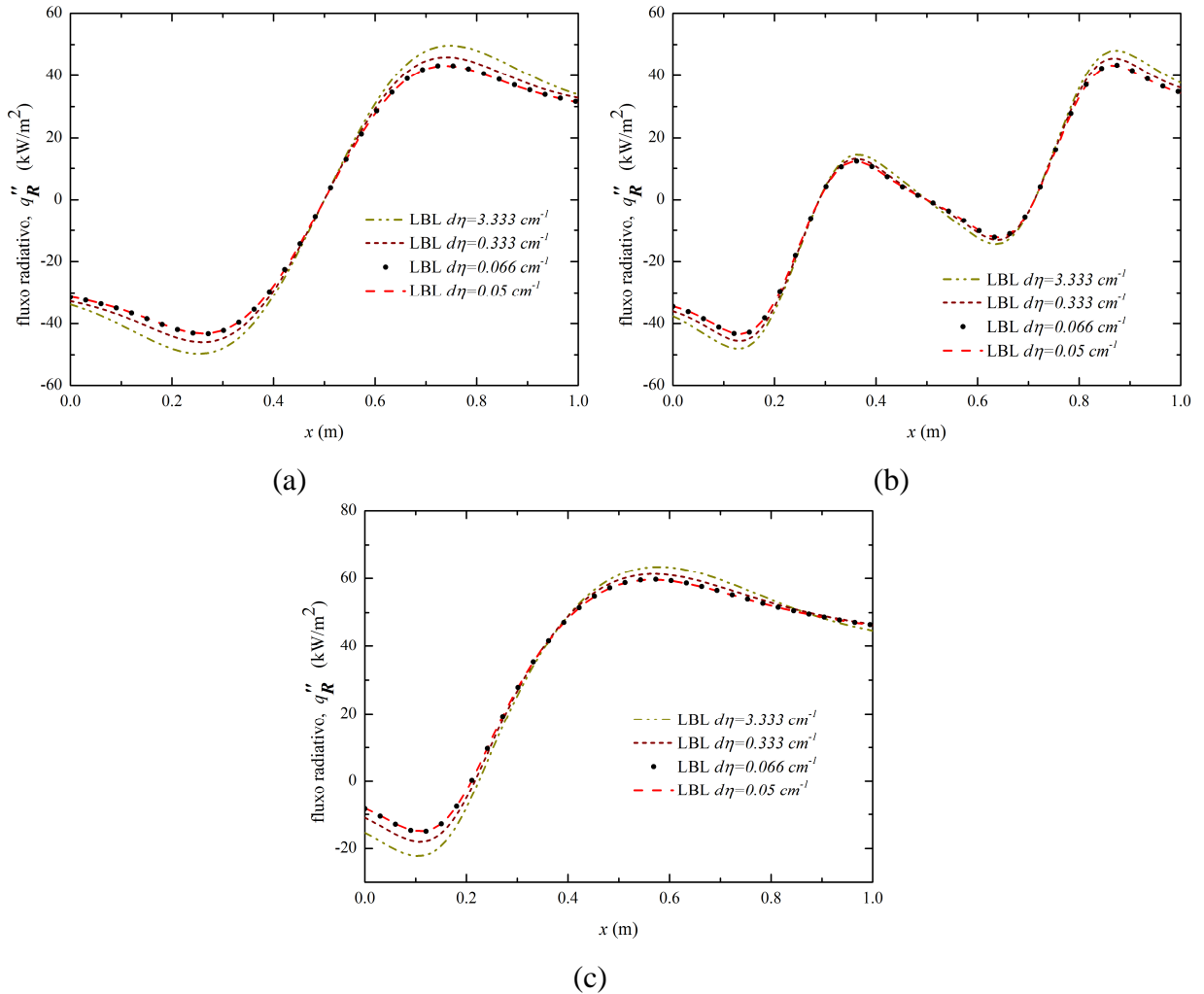


Figura 6.21 – Fluxo de calor radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.

Os valores para os termos fontes considerando os três perfis de temperatura são mostrados na Figura 6.22. O comportamento da solução para o termo fonte é correlato ao comportamento analisado para o fluxo de calor. No entanto além da região próxima a parede, nos picos de temperatura dos perfis, as solução apresentam um maior discordância, principalmente para $d\eta = 3,33$ cm⁻¹. Como já mostrado, os valores para os desvios máximos e médios são apresentados nas Tabelas 6.16, 6.17 e 6.18 para cada perfil de temperatura.

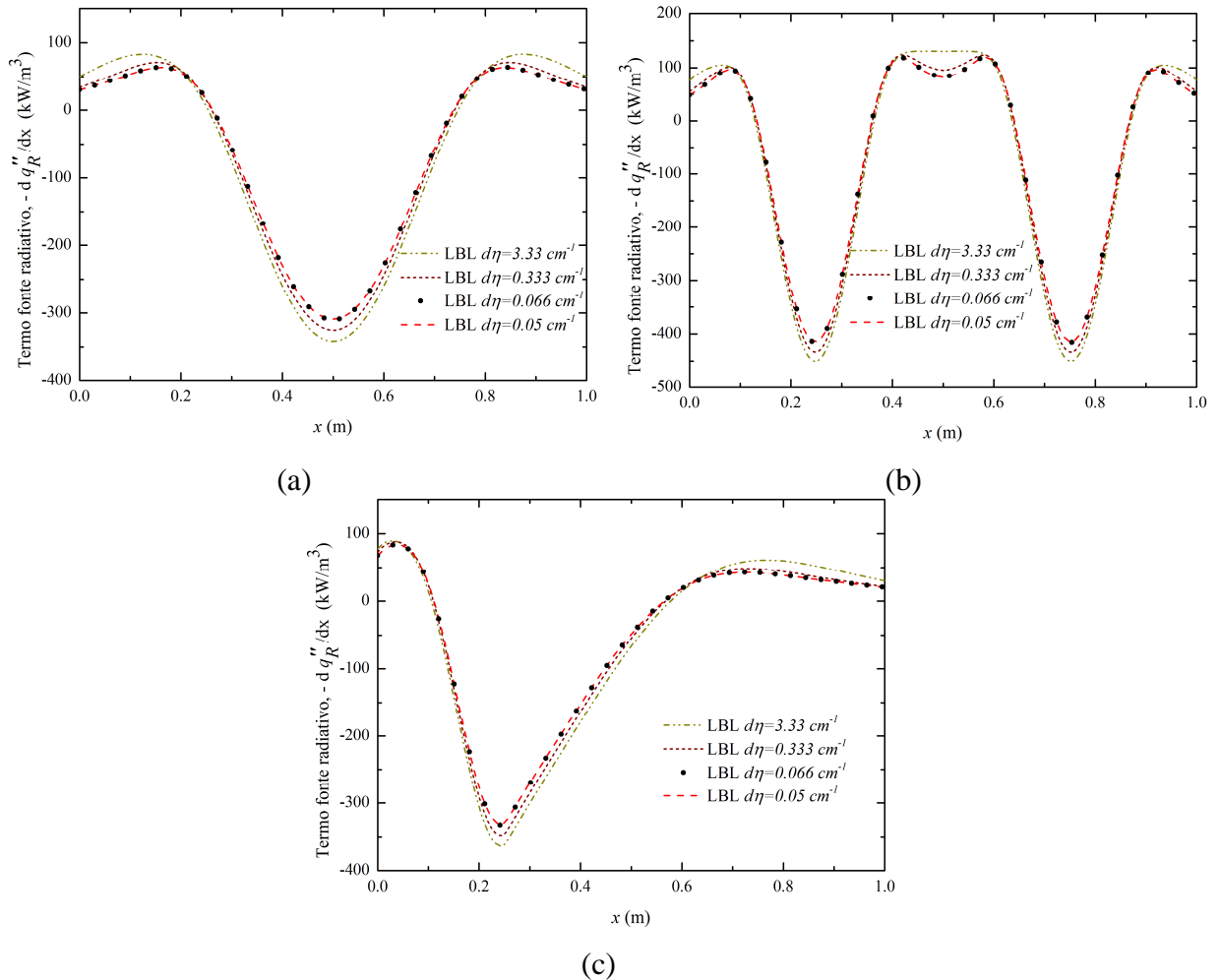


Figura 6.22 – Termo fonte radiativo para diferentes discretizações com o método LBL. Para os perfis de temperatura (a) Equação 5.6, (b) Equação 5.7e (c) Equação 5.8.

6.4.1 Avaliação da independência das *databases* para a solução LBL 2D x 1D

A Figura 6.23 mostra a variação do desvio médio (%) em relação ao tamanho (NP) das *databases* para os intervalos testados nas duas plataformas (Fortran 1D e *Fluent* 2D) de NP=20 até NP=30000. Os valores para o desvio médio utilizados nessa avaliação do problema 1D foram obtidos considerando o perfil de temperatura simétrico correspondente a Equação 5.6. A solução de referência para obtenção dos desvios foi calculada em relação ao caso mais refinado (NP= 30000) para ambos os problemas 1D e 2D.

O intuito dessa avaliação é mostrar que o comportamento da convergência da solução para a chama 2D no *Fluent*, é semelhante à convergência da solução encontrada para o problema 1D no Fortran, em relação ao tamanho das *databases* utilizadas na solução do método LBL. Analisando o comportamento das curvas é possível verificar que a convergência

em ambas as soluções apresentam a mesma tendência. Dessa forma, se fosse possível, no momento, a realização de uma simulação no 2D no *Fluent* para valores de NP maiores de 30000 a solução, teoricamente, se aproximaria da solução *benchmark* ideal.

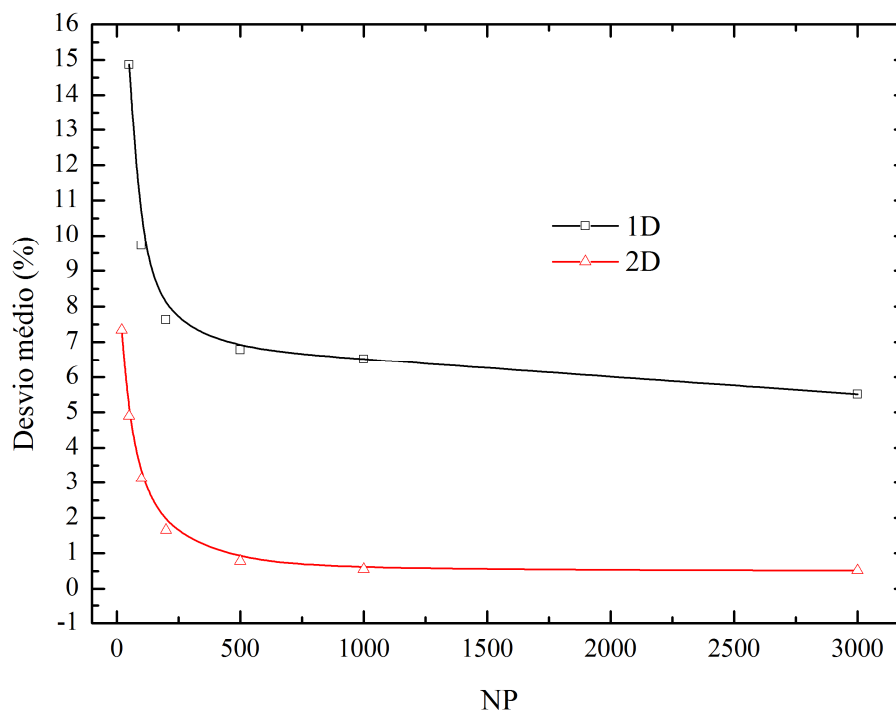


Figura 6.23 – Desvio médio em relação ao NP das *databases*.

É possível observar para o NP de 1000 o ganho para com o caso com NP de 3000 no problema 2D não é representativo. O tempo envolvido para obtenção da solução com NP 30000, no caso 600 simulações, não justifica, no momento, essa melhora apresentada em relação ao NP 3000, onde são necessárias somente 60 simulações, via *Fluent*. Visto que o desvio em relação ao caso mais refinado, com 30000 pontos em comparação com o caso com 3000 pontos é somente de 0,51%.

A Tabela 6.19 apresenta os desvios encontrados em relação à solução com NP=30000 para as soluções 1D e 2D.

Tabela 6.19 – Desvio médio em relação ao NP=30000 das soluções LBL para fluxo.

NP	$d\eta$ (cm ⁻¹)	<i>Desvio Médio (%)</i>	
		1D	2D
30000	0,333		
3000	3,333	5,51	0,51
1000	10	6,51	0,55
500	20	6,78	0,77
200	50	7,63	1,64
100	100	9,72	3,12
50	200	14,86	4,89
20	200	43,19	7,34

7 CONCLUSÕES

A transferência de calor por radiação térmica, devido às altas temperaturas envolvidas, tende a ser o mecanismo dominante de transferência de calor em processos de combustão envolvendo gases participantes. A fim de se estudar a influência da radiação térmica nesses processos, chamas laminares difusivas de metano com diluição de dióxido de carbono e nitrogênio foram simuladas numericamente e comparadas com dados experimentais disponíveis para a análise do fluxo de calor radiativo. Vários níveis de diluição para as chamas foram estudados. O método das ordenadas discretas foi utilizado para a solução espacial da RTE. A cinética química foi resolvida utilizando um mecanismo skm-DRM19.

A solução espectral da RTE foi resolvida pelo método de integração linha-por-linha (LBL), considerado como *benchmark*, que corresponde à integração da equação da transferência radiativa considerando cada uma das linhas espectrais individualmente e suas características de emissão e absorção, foi implementado via UDF no software comercial Ansys *Fluent*. Os resultados com o LBL foram comparados com resultados obtidos pelo modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG), o qual considera que o espectro pode ser representado por um número finito de gases cinzas.

O modelo WSGG é bastante utilizado devido à sua grande eficiência computacional. Entretanto, as simplificações do método muitas vezes levam a erros intrínsecos difíceis de serem avaliados independentemente. Dessa forma, a solução obtida com o LBL foi empregada para se estimar os erros associados à solução com o uso do modelo WSGG.

Tanto para as chamas diluídas com CO₂ quanto com N₂, solução utilizando o método LBL apresentou resultados satisfatórios em relação ao método WSGG. Para a diluição de 50% de CO₂, as soluções analisadas a partir das discretizações de $d\eta = 20 \text{ cm}^{-1}$ apresentaram valores de desvios máximos, em relação à solução WSGG, menores de 7% e desvios médios menores de 5%. Para a solução mais refinada ($d\eta = 0,033 \text{ cm}^{-1}$ equivalente a *database* com NP=30000) o desvio médio encontrado foi de 2,74%. Quanto à solução com abordagem NCR-WSGG, o desvio médio para com a solução LBL foi de 3,40%. Em relação aos dados experimentais, as soluções WSGG e LBL se comportam de forma semelhante, com erros máximos em torno de 15%. Esses valores mais elevados em relação aos dados experimentais podem ser atribuídos a incertezas associadas às medições. O termo fonte radiativo para a

diluição de CO₂ também foi avaliado para várias discretizações, da mesma forma que os resultados para o fluxo, apresentaram uma concordância entre as soluções muito boa.

A partir da análise dos desvios, a solução com LBL para um $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ (NP=3000) foi definida para a realização das demais diluições (40%, 20% e 10%). Para todas as diluições, a solução LBL em relação à solução do modelo WSGG apresentou valores de desvios máximos menores de 6% e médios próximos a 3%. Em relação a abordagem NCR-WSGG, os desvios máximos foram um pouco superiores, em torno de 10%. Todavia, os desvios médios ficaram em torno de 4%. Quanto aos resultados experimentais, os desvios máximos e médios foram muito semelhantes aos encontrados para a diluição de 50% em todos os casos.

Analisando-se os resultados para as chamas diluídas com N₂, foi possível observar um comportamento similar aos encontrados para a diluição de CO₂. Da mesma forma, a partir do estudo da discretização da *database* para a diluição com 50%, foi estabelecido que a solução para $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ apresenta resultados satisfatórios, com desvios médios empregando-se o modelo WSGG de 3,89%; de 4,57% para o método NCR-WSGG e de 9,07% para com os dados experimentais. A avaliação do termo fonte para a diluição de 50% também apresentou resultados adequados com a escolha do $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$. A solução com maior discretização ($d\eta = 0,33 \text{ cm}^{-1}$) apresentou valores de desvios médios muito próximos aos da solução com uma menor discretização: 3,07% em relação à solução WSGG; de 4,81% em relação ao método NCR-WSGG; e de 8,59% com a solução experimental.

As diluições de 40%, 20% e 10% de N₂ para a discretização de $d\eta = 3,33 \text{ cm}^{-1}$ apresentaram desvios médios menores de 4% e máximos menores de 7% para todas as diluições em relação ao modelo WSGG.

Com base nessas avaliações, pode-se dizer que a solução a qual foi implementada para o LBL, no *Fluent*, consegue prever o comportamento da radiação térmica, para o problema proposto, de forma consistente. Assim, a partir dos resultados com o método LBL foi possível aferir os resultados obtidos com o modelo WSGG, o que provou que a despeito das simplificações o WSGG pode ser utilizado para prever a radiação térmica em problemas de combustão de forma consistente, como mostrado neste trabalho.

Em relação à avaliação da discretização das *databases* para o problema 1D no Fortran, foi possível observar que, quanto maior a discretização, menor os desvios encontrados. Quando se analisa a convergência do problema 1D em relação à solução para a chama 2D no *Fluent*, para diferentes discretizações das *databases*, as soluções apresentam uma tendência

semelhante. Entretanto, os desvios obtidos com a simulação de NP=30000 ($d\eta = 0,333 \text{ cm}^{-1}$) quando comparada à simulação de NP=3000 ($d\eta = 3,333 \text{ cm}^{-1}$) no *Fluent* não justificam, no momento, o custo computacional envolvido. Isso se deve ao fato de que a solução para NP=30000 demanda 600 simulações, enquanto a solução para NP=3000 requer apenas 60, sendo que cada simulação demora aproximadamente 15 horas para convergir.

7.1 Trabalhos Futuros

- Acréscimo de mais uma *database* para mais uma fração molar de H₂O;
- Incluir modelagem da fuligem;
- Estudo utilizando campos gerados pelo chem1d para uma chama *counterflow*, onde é possível alterar sistematicamente as escalas da chama, mas sempre preservando os perfis de temperatura e frações molares;
- Incluir a espécie de CO no cálculo do coeficiente de absorção na solução do RTE;
- Expandir a solução para valores maiores de discretizações.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ansys, Fluent 2011a. “**Theory Guide**”, *Ansys Inc.*

Ansys, Fluent 2011b. “**UDF Manual**”, *Ansys Inc.*

Abdul-Sater, H., e Krishnamoorthy G. An assessment of radiation modeling strategies in simulations of laminar to transitional, oxy-methane, diffusion flames, **Applied Thermal Engineering**, vol.61, p. 507-518, 2013

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

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

Bedir, H., T'ien, J. S., e Lee, H. Comparison of different radiation treatments for a one-dimensional diffusion flame, **Combustion Theory and Modelling**, vol. 1, p. 395-404, 1997.

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

Bhuiyan, A. A., e Naser, J. Numerical modelling of oxy fuel combustion, the effect of radiative and convective heat transfer and burnout, **Fuel**, vol. 139, p. 268-284, 2015.

Bordbar, M. H., Wechel, G., e Hyppänen, T. A line by line based weighted sum of gray gases model for inhomogeneous CO₂-H₂O mixture in oxy-fired combustion. **Combustion and Flame**, vol 161, p. 2435–244, 2014.

Brittes, R. **Proposição de um método híbrido em projetos inversos de cavidade radiante**, Dissertação de mestrado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2011.

Brittes, R., Centeno, F. R, Ziemniczak, A., e França, F. H. R., “WSGG model correlations to compute non-gray radiation from carbon monoxide in combustion applications”, **Journal of Heat transfer**, vol. 139, p. 863-873, 2017.

Bucart, A., e McBride, B. 1994. **Ideal gas thermodynamic data for combustion and air-pollution use**. Technical report, 1993.

Cao, S., Ma, B., Bennett, B.A.V., Giassi, D., Stocker, D. P., Takahashi, R., Long, M.B., e Smooke, M. D. A computational and experimental study of coflow laminar methane/air diffusion flames: Effects of fuel dilution, inlet velocity, and gravity. **Proceedings of the Combustion Institute**, vol. 35, p. 897–903, 2015.

Cassol, F., Brittes, R., França, F. H. R., e Cardoso, C. A. L. **Soot particulate medium influence in radiation heat transfer using gray gas model**. 14th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Rio de Janeiro, RJ, 2012.

Cassol, F. **Geração de soluções benchmark e avaliação de modelos de radiação térmica em processos de combustão**. Tese de doutorado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2013.

Cassol, F., Brittes, R., França, F. H. R., e Ezekoye, O. O., “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**, vol.79, p. 796-806, 2014.

Cassol, F., Brittes, R., Centeno, F. R., Silva, C. V., e 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**, vol. 37, p. 163-172, 2015.

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

Centeno, F. R., Cassol, F., Vielmo, H. A., França, F. H. R., e da Silva, C. V. Comparison of different WSGG correlations in the computation of thermal radiation in a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane–air flame, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, vol. 35, p. 419-430, 2013.

Centeno, F. R. **Modelagem da radiação térmica em chamas turbulentas da combustão de metano em ar**, Tese de doutorado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2014.

Centeno, F. R., da Silva, C.V., e 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**, vol. 79, p. 405-414, 2014.

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

Centeno, F. R., Brittes, R., França, F. H. R., e da Silva, C. V. Application of the WSGG model for the calculation of gas-soot radiation in a turbulent non-premixed methane-air flame inside a cylindrical combustion chamber, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 93, p. 742-753, 2016.

Centeno, F. R., Brittes, R., Rodrigues, L. G. P., Coelho, F. C., e França, F. H. R., “Evaluation of the WSGG model against line-by-line calculation of thermal radiation in a non-gray sooting medium representing an axisymmetric laminar jet flame”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Vol. 124, p. 475-483, 2018.

Chen, Z., Qin, X., Xu, B., Ju, Y., e Liu, F. Studies of radiation absorption on flame speed and flammability limit of CO₂ diluted methane flames at elevated pressures **Proceedings of the Combustion Institute**, vol.31, p. 2693-2700, 2007

Choi, S. K., Kim, J., Chung, S.H., e Kim, J.S. Structure of the edge of flame in a methane-oxygen mixing layer, **Combustion Theory Model** vol. 13, p. 39–56, 2009.

Chu, H., Liu, F., e Zhou, H. Calculations of gas thermal radiation transfer in one-dimensional planar enclosure using LBL and SNB models. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 54, p. 4736–4745, 2011.

Chu, H., Gu, M., Consalvi, J., Liu, F., e Zhou, H. Effects of total pressure on non-grey gas radiation transfer in oxy-fuel combustion using the LBL, SNB, SNBCK, WSGG, and FSCK methods. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 172, p. 24–35, 2016.

Chu, H., Ren, F., Feng, Y., Gu, M., e Zheng, S. A comprehensive evaluation of the non gray gas thermal radiation using the line-by-line model in one- and two-dimensional enclosures. **Applied Thermal Engineering**, vol.124, p. 362–370, 2017.

Coelho, P. J., Teerling, O.J., e Roekaerts, D. Spectral radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous turbulent jet diffusion flame, **Combustion and Flame**, vol. 133, pp. 75 - 91, 2003.

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

Coelho, P., Costa, M. **Combustão**, Edições Orion, 2007.

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

Coelho, P. J. Turbulence-radiation interaction: from theory to application in numerical simulations, **Journal of Heat Transfer**, vol. 134, p. 031001-(1:13), 2012.

Coelho, F. R., e França, F. H. R. WSGG correlations based on HITEMP2010 for gas mixtures of H₂O and CO₂ in high total pressure conditions. **International Journal of Heat and Mass Transfer** vol. 127. p. 105–114, 2018.

Colomer, G., Costa, M., Cònsul, R., e Oliva, A. Three-dimensional numerical simulation of convection and radiation in a differentially heated cavity using the discrete ordinates method **International Journal of Heat and Mass Transfer** vol. 47, p. 257–269, 2004.

Colomer, G., Cònsul, R., e Oliva, A. Coupled radiation and natural convection: Different approaches of the SLW model for a non-gray gas mixture, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 107, p. 30-46, 2007.

Crnomarkovic, N., Sijercic, M., Belosevic, S., Tucakovic, D., e Zivanovic, T. Numerical investigation of processes in the lignite-fired furnace when simple gray gas and weighted sum of gray gases models are used, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 56, p. 197-205, 2013.

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

Denison, M. K., e Webb B. W. Development and application of an absorption-line blackbody distribution function for CO₂, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 38, p. 1813-1821, 1995a.

Denison, M. K., e Webb B. W. The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model in non isothermal nonhomogeneous media, **Journal of Heat Transfer**, vol. 117, p. 359- 365, 1995b.

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

Denison, M. K., e Webb, B. W. A spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers. **Journal of Heat Transfer**, vol.115, p.1004-1011, 1993b.

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

Dorigon, L. J. **Determinação de coeficientes do modelo da soma-ponderada-dos-gases-cinzass a partir do banco de dados HITEMP 2010**. Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre, RS, 2012.

Dorigon, L. J, Duciak, G, Brittes, R, Cassol, F, Galarça, M., e 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**, vol.64, p. 863-873, 2013.

Frenklach, M., Wang, H., Yu, C., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R., Davidson, D. F., Chang, E. J., Smith, G. P., Golden, D. M., Gardiner, W. C., e Lissianski, V. **GRI-Mechanism**, 1994.

Fuentes, A., Henríquez, R., Nmira, F., Liu, F., e Consalvi, J. Experimental and numerical study of the effects of the oxygen index on the radiation characteristics of laminar coflow diffusion flames. **Combustion and Flame**, vol. 160, p. 786–795, 2013.

Galarça, M. M., Maurente, A., Vielmo, H. A., e França, F. H. F. Correlations for the weighted-sum-of-gray-gases generated from the absorption-line blackbody distribution function, Proceedings of ENCIT 2008, Belo Horizonte, MG, 2008.

Galarça, M. M., Mossi, A., e França, F. H. F. A Modification of the cumulative wavenumber method to compute the radiative heat flux in non-uniform media, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 112, p. 384-393, 2011.

Galletti, C., Parente, A., Derudi, M., Rota, R., e Tognotti, L. Numerical and experimental analysis of NO emissions from a lab-scale burner fed with hydrogen-enriched fuels and operating in MILD combustion, **International Journal of Hydrogen Energy** vol. 34, p. 8339 – 8351, 2009

Garten, B., Hunger, F., Messig, D., Stelzner, B., Trimis, D., e Hasse, C. Detailed radiation modeling of a partial-oxidation flame, **International Journal of Thermal Sciences**, vol. 87, p. 68-84, 2015.

Guo, J., Li, X., Huang, X., Liu, Z., e Zheng, C. A full spectrumk-distribution based weighted-sum-of-gray-gases model for oxy-fuel combustion. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 90, p. 218–226, 2015.

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

Hirshfelder, J., Curtiss, C., e Bird, R. Molecular theory of gases and liquids. Vol 26. Wiley New York, 1954.

Hoerlle, C.A. **Estudo numérico de chamas laminares difusivas de CH₄ diluidas com CO₂ empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica *flamelet-generated manifold***, Dissertação de mestrado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2015.

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

Hottel, H. C, e Sarofim, A. F. **Radiative Tranfer**. Ed. McGraw-Hill, New York, 1967.

Houf, W., e Schefer, R. Predicting radiative heat fluxes an flammability envelopes from unintended releases of hydrogen, **International Journal of Hydrogen Energy**, vol. 32, p. 136-151, 2007.

Howell, J. R., Siegel, R., e Mengüç, M. P. Thermal Radiation Heat Transfer. Taylor & Francis, New York, 2011.

Hu, Y., Li, H., Yan, J. Numerical investigation of heat transfer characteristics in utility boilers of oxy-coal combustion, **Applied Energy** vol. 130, p. 543–551, 2014.

Incropera F. P., e DeWitt, D. P. **Fundamental of heat and mass transfer**, 6th edn John Willev & Sons, New York, 2008.

IEA. **Key Energy Statistics**. International Energy Agency, 2016.

Johansson, R., Andersson, K., Leckner, B., e Thunman, H. Models for gaseous radiative heat transfer applied to oxy-fuel conditions in boilers. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 53, p. 220–230, 2010.

Johansson, R., Leckner, B., Andersson, K., e 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**, vol. 158, p. 893–901, 2011.

Jones, W., e Lindstedt, R. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion, **Combustion and Flame**, vol. 73, p. 233-249, 1988.

Kang, S.H., e Yoo, C. S. A modification of the narrow band-based WSGG regrouping method for computation time reduction in non-gray gas radiation analysis. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 111, p. 1314–1321, 2017.

Kangwanpongpan, T., França, F. H. R., da Silva, R. C., Schneider, P.S., e 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**, Vol. 55, p. 7419-7433, 2012.

Kazakov, A., e Frenklach, M. **Reduced reaction sets based on GRI-Mech 1.2**, 1994.

Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M.E., e Miller, J.A. **Sandia report SAND86-8246**, 1986.

Konnov, A. Implementation of the NCN pathway of prompt-NO formation in the detailed reaction mechanism, **Combustion and Flame**, vol. 156, p. 2093-2105, 2009.

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

Lammers, F. A., e de Goey, L. P. H. The influence of gas radiation on the temperature decrease above a burner with a flat porous inert surface, **Combustion and Flame** vol.136, p. 533–547, 2004.

Liu, F., Guo, H., e Smallwood, G.J. Effects of radiation model on the modeling of a laminar coflow methane/air diffusion flame , **Combustion and Flame**, vol. 138, p. 136-154, 2004.

Liu, F., Guo, H., Smallwood, G. J., e Gülder, O. The chemical effects of carbon dioxide as an additive in an ethylene diffusion flame: implications for soot and NO_x formation, **Combustion and Flame**, vol. 125, p. 778-787, 2001.

Lu, T., e Law, C. K. A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry, **Combustion and Flame**, vol. 154, p. 761-774, 2008.

Lutz, A. E. **A numerical study of thermal ignition / Sandia Report SAND88 / 8228**. Technical report, Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1988.

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

Machado, I. M. Peng, F. B., Caetano, N. R., Pereira, F. M., e Pagot, P. R. Measurements of radiation from methane diffusion flames diluted with CO₂, **Proceedings of ENCIT 2014**, Belem, PR-Brazil, 2014.

Machado, I. M. **Caracterização experimental da radiação térmica emitida por chamas não pré misturadas de metano diluídas com CO₂**, Dissertação de mestrado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2015.

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

Maurenente, A., Vielmo, H. A., e 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 & Radiative Transfer**, vol. 109, p. 1758-1770, 2008.

Marakis, I., Papapavlou, C. H., e Kakaras, E. A parametric study of radiative heat transfer in pulverized coal furnaces **International Journal of Heat and Mass Transfer** vol. 43, p. 2961–2971, 2000.

McBride, B. J., Gordon, S., e Reno, M. A. **Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species**, NASA Technical Memorandum 4513, 1993.

Miller, J. e Bowman, C. Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion, **Progress in Energy and Combustion Science**, vol. 15, p. 287-338, 1989.

Miller, J., Kee, R., Smooke, M., e Gear, J. **The combustion of the structure and extinction limit of a methane-air stagnation point diffusion flame**. Technical report, The Combustion Institute, 1984.

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

Modest, M. F. The Weighted-Sum-of-Gray-Gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer. **Journal of Heat Transfer**, vol. 113, p. 650-656, 1991.

Modest, M. F. **Radiative Heat Transfer**. McGraw-Hill, New York, 1993.

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

Mossi, A., Barve, V., Galarça, M., Vielmo, H., França, F. H. R., e Ezekoye, O. Treatment of spectral effects in participating media radiation modelling, **Anais do 13th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, Uberlândia, MG, Brazil, 2010.

Nakod, P., Krishnamoorthy, G., Sami, M., e Orsino, S. A comparative evaluation of gray and non-gray radiation modeling strategies in oxy-coal combustion simulations, **Applied Energy** vol.54, p. 422-432, 2013.

Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P., Carneiro, J.E., e Sergaty, R. Models evaluations of combustion process in a cylindrical furnace”, **Anais do 2001 ASME International mechanical engineering congress and Expositions**, New York, NY, 2001.

Parente, A., Galletti, C., e Tognotti, L. A simplified approach for predicting NO formation in MILD combustion of CH₄-H₂ mixtures, **Proceedings of the Combustion Institute** vol.33, p. 3343-3350, 2011.

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

Pope, S. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation, 1997.

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

Rajhi, M.A., Ben-Mansour, R., e Habib, M. A., Nemitallah, M.A., e Andersson, K. Evaluation of gas radiation models in CFD modeling of oxy-combustion, **Energy Conversion and Management**, vol. 81, p. 83-97, 2014.

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

Rodrigues, L. G. P. **Aplicação do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza na simulação da transferência radiativa em chamas difusivas laminares de metano diluído com CO₂ e N₂**. Dissertação de mestrado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2016.

Rothman, L. S., Rinsland, C. P., Goldman, A., Massie, S. T., Edwards, D. P., Flaud, M., Perrin, A., Camy-Peyret, C., Dana, V., Mandin, Y., Chroeder, J., A. Mccann, Gamache, R. R., Wattson, R. B., Yoshino, K., Chance, K. V., Jucks, K. W., Brown, L. R., Nemtchinov, V., Varanasi, e P. The Hitran Molecular Spectroscopic Database and Hawks (Hitran Atmospheric Workstation): 1996 Edition, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 60, p. 665-710, 1998.

Rothman, L. S., Rinsland, C. P., Goldman, A., e Massie, S. T. The Hitran Molecular Spectroscopic Database and Hawks (Hitran Atmospheric Workstation): 2004 Edition, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 60, p. 665-710, 2005.

Rothman, L. S., Gordon, I. E., Barber, R. J., Dothe, H., Gamache, R. R., Goldman, A., Perevalov, V. I., Tashkun, S. A., e Tennyson, J. HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 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. L. G., e Wagner, G. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 130, p. 4-50, 2013.

Ruan, J., Kobayashi, H., Niioka, T., e Ju, Y. Combined effects of nongray radiation and pressure on premixed CH₄/O₂/CO₂ flames, **Combustion and Flame** vol. 124, p. 225–230, 2001.

Saji, C.B., Balaji, C.,e Sundararajan, T. Investigation of soot transport and radiative heat transfer in an ethylene jet diffusion flame, *International journal of heat and mass transfer*, vol. 51, pp.4287-4299., 2008.

Sankaran, R., Hawkes, E. R., Chen, J. H., Lu, T., e Law, C. K. Structure of a spatially developing turbulent lean methane-air Bunsen flame, **Proceedings of the combustion institute**, vol. 31, p. 1291-1298, 2007.

Santoro, R. J., Semerjian, H. G., e Dobbins, R. A. Soot particle measurements in diffusion flames, **Combustion Flame**, vol. 51, p. 203-218, 1983.

Schwer, L.E. Is your mesh refined enough? Estimating discretization error using GCI, LS-DYNA, Alemanha, 2008.

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

Sijerčić, M., Stevanović, Z., e Belosevic, S. Modeling of non-confined turbulent flow of two coaxial streams under combustion conditions. **Mech Eng**, vol.1, p.981-988, 2001.

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

Silva, C.V., Deon, D.L., Centeno, F. R., França, F. H. R., e Pereira, F.M. Assessment of combustion models for numerical simulations of a turbulent non-premixed natural gas flame inside a cylindrical chamber, **Combustion Science and Technology**, 190:9, 1528-1556, 2018.

Smith, T. F., Shen, Z. F., e Friedman, J. N. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. **Journal of Heat Transfer**, Vol. 104, p. 602-608, 1982.

Solovjov, V. P., e Webb, B. W. SLW modeling of radiative transfer in multicomponent gas mixtures. **Journal of Quantitative transfer in multicomponent gas mixtures**, vol. 65, p. 665-672, 2000.

Solovjov, V. P., e Webb B.W. An efficient method for modeling radiative transfer in multicomponent gas mixtures with soot, **Journal of Heat Transfer**, vol. 123, p. 450-457, 2001.

Solovjov, V.P., Lemonnier, D., e Webb B.W. The SLW-1 model for efficient prediction of radiative transfer in high temperature gases, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 112, p. 1205-1212, 2011.

Soufiani, A., e Djavdan, E. A Comparison between Weighted Sum of Gray Gases and Statistical Narrow-Band Radiation Models for Combustion Applications. **Combustion and Flame** vol.97, p.240-250, 1994.

Smith, T.F., Shen, Z.F., e Friedman, J.N. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. **Journal of Heat Transfer**, vol. 104, p.602-608, 1982.

Sun, Y., e Zhang, X. Contributions of gray gases in SLW for non-gray radiation heat transfer and corresponding accuracies of FVM and P1 method. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 121, p. 819–831, 2018.

Taylor, P.B., e Foster, P.J. The total emissivities of luminous and non-luminous flames. **Journal of Heat Transfer**, vol. 17, p.1591-1604, 1974.

Turns, S. R., Myhr, F. H., Bandaru, R. V., e Maund, E. R. Oxides of nitrogen emissions from turbulent jet flames: part II – fuel dilution and partial premixing effects, **Combustion Flame**, vol. 93, p. 255-269, 1993.

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

Trivic, D. N. 3-D radiation modeling of nongray gases-particles mixture by two different numerical methods, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 70, p. 298-312, 2014.

Verhoeven, L. M. **radical tar removal: numerical modeling of tar conversion in a partial combustion reactor**, Tese de doutorado, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 2011

Verhoeven, L. M., Ramaekers, W.J.S., van Oijen, J.A., e de Goey, L. P. H. Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds, **Combustion and Flame**, vol. 159, p. 230-241, 2012.

Versteeg, H. K., e Malalasekera, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. Pearson Education, 2007

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

Westbrook, C. K. e Dryer, F. L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, **Combustion science and technology**, vol. 27, p. 31-43, 1981.

Yin, C., Rosendahl, L. A., e Kær, K.S., Chemistry and radiation in oxy-fuel combustion: A computational fluid dynamics modeling study, **Fuel** vol. 90, p. 2519–2529, 2011

Yin, C. On gas and particle radiation in pulverized fuel combustion furnaces, **Applied Energy** vol.157, p. 554–561,2015.

Yin, C. Effects of moisture release and radiation properties in pulverized fuel combustion: A CFD modelling study, **Fuel** vol.165, p. 252–259, 2016.

Xue, H., Ho. J.C., e Cheng, Y.M. Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation. **Fire Saf J**, vol.36, p.37-54, 2001.

Zhang, J., Ito, T., Ito, S., Riechelmann, D., e Fujimori, T. Numerical investigation of oxy-coal combustion in a large-scale furnace: Non-gray effect of gas and role of particle radiation, **Fuel**, vol. 139, p. 87-93, 2015.

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

Ziemniczak, A. **Geração de novas correlações da soma-ponderada-de-gases-cinza para espécies individuais de gases participantes: H₂O, CO₂, CO e CH₄**. Dissertação de mestrado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2014.

APÊNDICE A – Estudo da Redução das *databases*

Os resultados, a seguir, mostram a comparação realizada para resultados obtidos com as duas abordagens de redução das *databases* apresentadas no Capítulo 3 seção 3.10.3. O problema utilizado nessa análise foi o da placa plana 1D, no Fortran, considerando os perfis de temperatura dados pelas Equações 5.6, 5.7 e 5.8 apresentadas no Capítulo 5, seção 5.5.1.

As figuras apresentam curvas com resultados gerados para *databases* reduzidas pelas duas abordagens, onde a *database* utilizada para o LBL-média aritmética deu-se pela Equação 3.25 e LBL - média ponderada pela Equação 3.26. Todas as *databases* utilizando este recurso de redução foram geradas considerando como $NP_{total}=150000$.

A Figura A.1 mostra o resultado para fluxo de calor radiativo, na coluna da esquerda, e termo fonte radiativo, na coluna da direita, utilizando *databases* reduzidas com $NP=20$. É possível observar os resultados obtidos considerando as duas técnicas de redução apresentam resultados coincidentes.

A Figura A.2 mostra o resultado para fluxo de calor radiativo, na coluna da esquerda e termo fonte, na coluna da direita, utilizando *databases* reduzidas com $NP=30000$. Da mesma forma que os resultados com reduções para 20 NP, ambas as soluções utilizando as *databases* com média ponderada e média aritmética não influem nos resultados finais.

Optou-se por apresentar resultados com a redução para dois valores extremos ($NP=20$ e $NP=30000$) a fim de garantir que mesmo nesses casos as respostas obtidas para as duas abordagens de redução se comportam de forma semelhante. Dessa forma, os resultados que dependem das *databases* reduzidas são independentes da técnica que foi utilizada na sua geração.

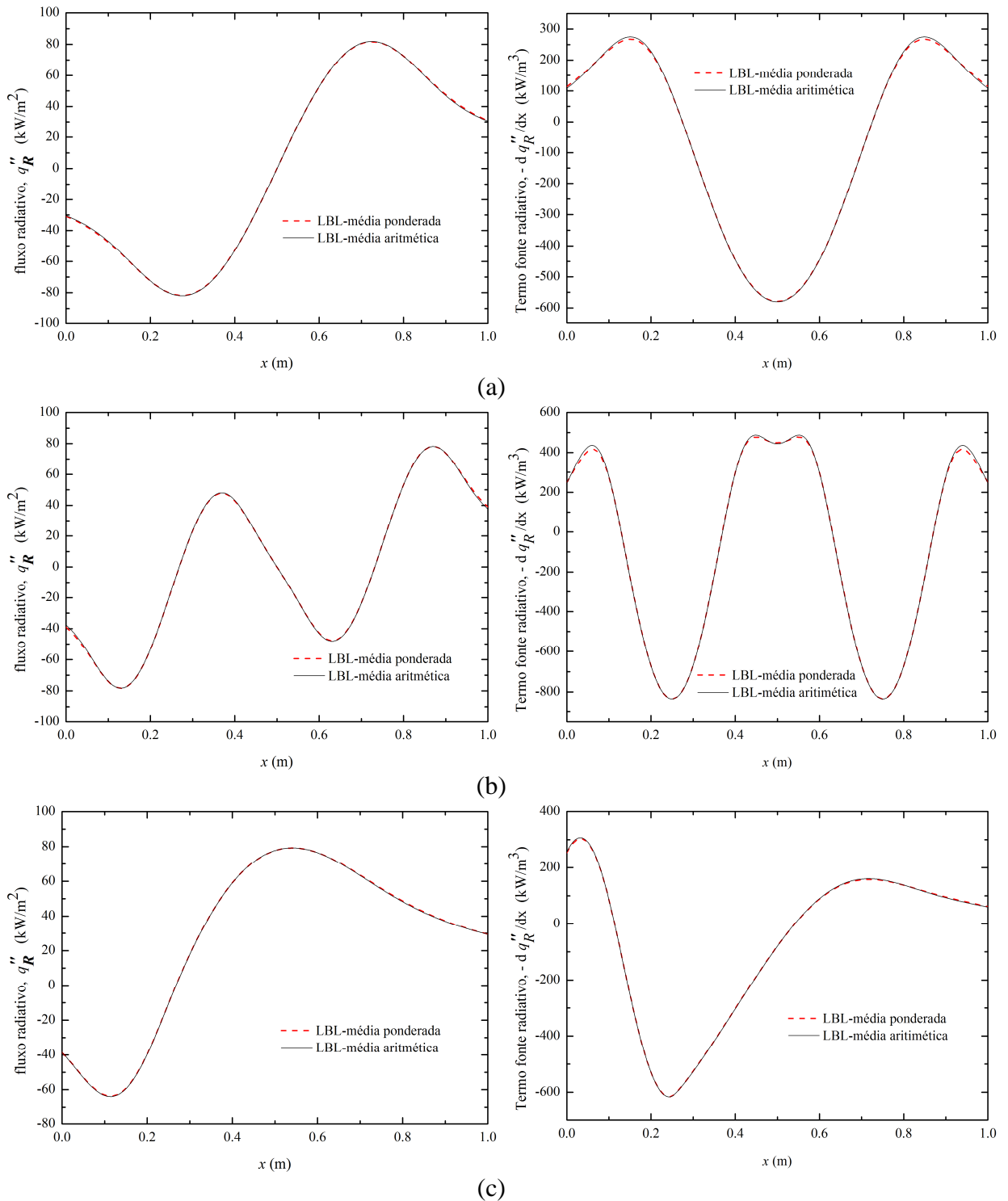


Figura A.1 – Fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo com $NP_{\text{reduzido}} = 20$ para duas abordagens de redução: para perfis de temperatura (a) simétrico, (b) dupla simetria e (c) assimétrico.

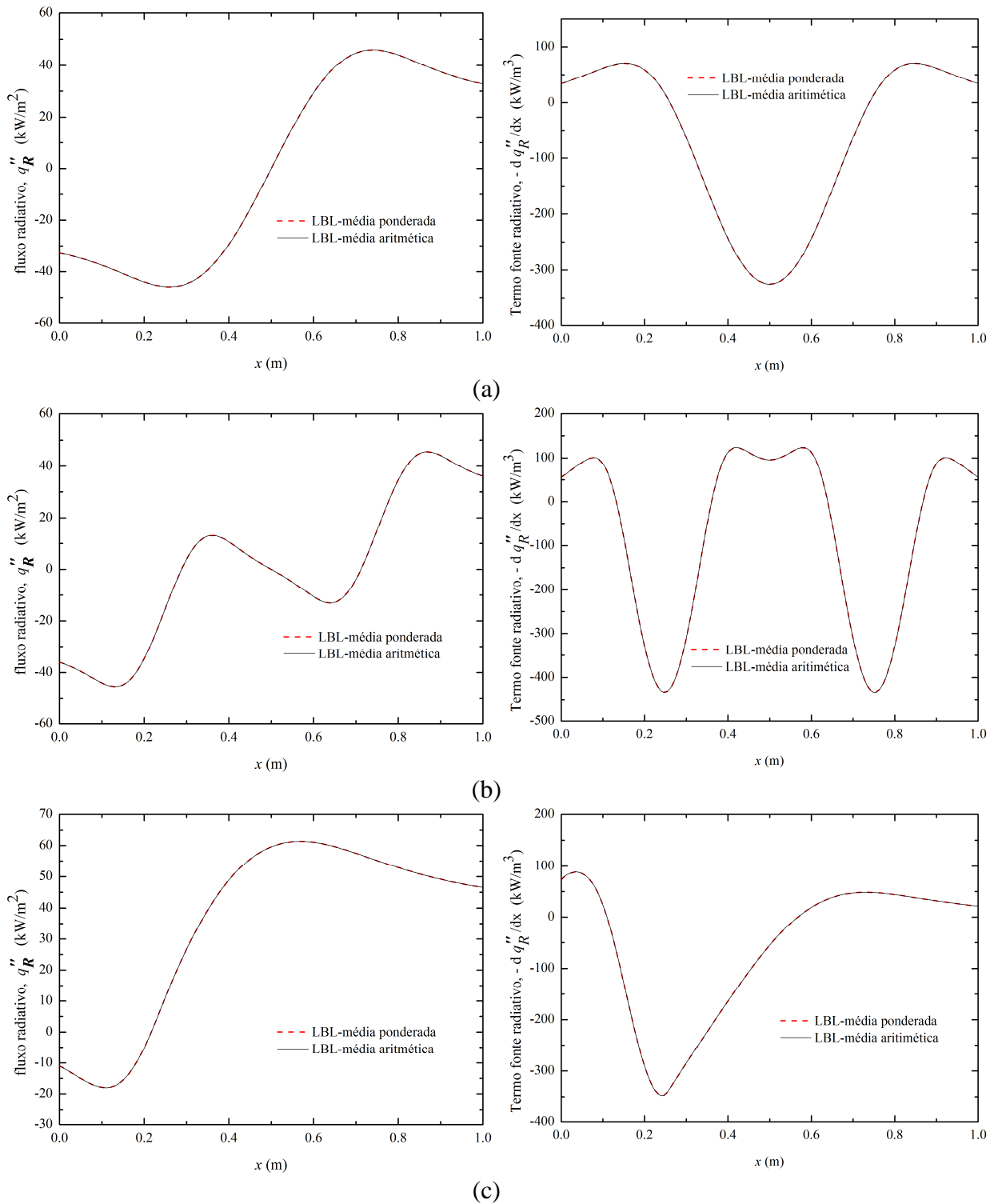


Figura A.2– (a) Fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo com $NP_{\text{reduzido}} = 30000$ para duas abordagens de redução: para perfis de temperatura (a) simétrico, (b) dupla simetria e (c) assimétrico.

APÊNDICE B – Estudo do GCI

B.1 GCI para a malha computacional

A metodologia de análise de convergência de malha GCI (*Grid Convergence Index*) foi empregada na análise de qualidade de malha. Proposta inicialmente por Roache, 1994 e atualizada em Celik et al., 2008.

O índice de convergência de malha (GCI) é estabelecido como uma porcentagem de erro, e fornece uma estimativa do quanto à solução numérica está convergindo para a solução exata. O método pode ser usado com um mínimo de duas malhas, mas fornecem uma melhor estimativa de erro quando usado com três soluções de malha, ou seja, infinitos números de células [Schwer, 2008].

Para o caso de três malhas construídas, uma razão de refinamento deve ser respeitada:

$$r = \frac{h_2}{h_1} \quad (\text{B.1})$$

onde r é uma constante que respeita uma relação de crescimento $h_1 < h_2 < h_3$. A taxa de convergência torna-se,

$$p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln r} \quad (\text{B.2})$$

sendo f_i o resultado calculado, onde o sub índice i representa a malha e r a razão de refino. Foi adotado um valor de $r = 1,875$, ou seja, a cada nível de refinamento o número de volumes de controle da malha aumenta na proporção de r .

A análise de um problema empregando dinâmica dos fluidos computacional requer uma malha suficientemente refinada na qual a solução seja restringida no intervalo da solução exata. Porém, mesmo sem um resultado analítico para obter a função exata (função onde o espaçamento da malha tende a zero), esta pode ser obtida através de uma generalização da extrapolação de Richardson, sem a necessidade da ordem de convergência possuir valor inteiro ($p \neq 2$). Assim a função exata é dada por

$$f_{exata} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (\text{B.3})$$

O erro relativo (E) entre duas malhas é definido como

$$E_{12} = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (\text{B.4})$$

Já o erro fracional, estimado para a malha mais refinada e para a malha mais grosseira, deve ser

$$E_{F\text{ fina}} = \frac{E}{r^p - 1} \quad (\text{B.5})$$

$$E_{F\text{ fina}} = \frac{Er^p}{r^p - 1} = r^p E_{F\text{ fina}} \quad (\text{B.6})$$

Finalmente o GCI para a malha mais refinada e mais grosseira das três malhas selecionadas na análise é estipulado por

$$GCI_{fina} = \frac{F_s |E|}{(r^p - 1)} \quad (\text{B.7})$$

$$GCI_{grossa} = \frac{F_s |E| r^p}{(r^p - 1)} \quad (\text{B.8})$$

onde F_s é um fator de segurança. Roache, 1994, recomenda que o fator de segurança seja $F_s=3,0$ para comparações de duas malhas e $F_s=1,25$ para comparações de três malhas.

Assim uma estimativa de resultado pode ser encontrada aplicando o GCI, obtendo um intervalo provável de resultado que a próxima malha resultaria

$$[f_1 (1 - GCI), f_1 (1 + GCI)] \quad (\text{B.9})$$

Uma vez obtidos os índices de convergência de malha GCI_{fina} e GCI_{grossa} , a convergência da solução para a faixa assintótica é calculada como

$$\chi = \frac{GCI_{grossa}}{r^p GCI_{fina}} \quad (B.10)$$

onde resultados próximos de 1 indicam soluções dentro da faixa assintótica de convergência.

Rodrigues, 2016, a fim de avaliar a qualidade da malha utilizada no problema, escolheu como variáveis de controle a temperatura máxima, as máximas frações molares de dióxido de carbono e vapor de água, e o fluxo de calor radiativo máximo. Três malhas em ordem decrescente de refinamento – I II e III – foram avaliadas:

Os valores que foram obtidos com a solução numérica para a temperatura e a concentração das espécies participantes podem ser vistos na Tabela B.1 e os valores calculados para as razões entre as malhas avaliadas na Tabela B.2. Dados os baixos valores encontrados para o GCI e de χ - próximo a 1, a malha I foi a escolhida.

Tabela B.1 – Valores numéricos para a temperatura e concentrações das espécies participantes para as três malhas adotadas.

Malha	Volumes	T_{max} (K)	$X_{CO_2,max}$	$X_{H_2O,max}$
I	70875	2134,694	0,10238	0,17432
II	37800	2135,645	0,10225	0,17378
III	20160	2151,151	0,10191	0,17208

Tabela B.2 – Valores calculados para o GCI e χ para a temperatura e para as concentrações das espécies participantes.

	T_{max}	$X_{CO_2,max}$	$X_{H_2O,max}$
GCI_{12} (%)	0,00363	0,10673	0,18095
GCI_{23} (%)	0,05929	0,26812	0,57051
χ	0,99955	1,00128	1,00311

B.2 GCI para o método das ordenada discretas(DOM) para solução do método LBL

O número θ de direções para a discretização angular do método das ordenadas necessárias para se obter uma solução independente foi avaliado utilizando o GCI. O fluxo de calor radiativo máximo foi adotado como parâmetro de análise. Nessa avaliação foi adotado

um fator de refinamento $r=2$. Os valores para o fluxo de calor radiativo podem ser vistos na Tabela B.3 e os valores calculados para o GCI e χ na Tabela B.4.

Tabela B.3 – Valores numéricos para o fluxo de calor radiativo para os três níveis de discretização angular.

Direções (θ)	q''_{\max} (W/m^2)
80	930,7771
40	930,6383
20	929,3707

Tabela B.4 – Valores calculados para o GCI e para χ o fluxo de calor radiativo

	q''_{\max}
GCI_{12} (%)	0,00002292
GCI_{23} (%)	0,00020935
χ	1,00014914

Dado aos baixos valores de GCI encontrados e a razão χ igual 1,00014 é possível estipular que 80 direções são suficientes, para reproduzir resultados adequados com o método LBL.