

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

AVALIAÇÃO NUMÉRICA DO EFEITO DE PROMOTORES DE
TURBULÊNCIA EM UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO SOBRE O SEU
COMPORTAMENTO TÉRMICO

por

Bernardo da Rocha Barcelos

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Outubro de 2018

AVALIAÇÃO NUMÉRICA DO EFEITO DE PROMOTORES DE
TURBULÊNCIA NA ENTRADA DE UMA CÂMARA DE COMBUSTÃO
SOBRE O SEU COMPORTAMENTO TÉRMICO

por

Bernardo da Rocha Barcelos

Engenheiro Mecânico

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

Mestre em Engenharia

Área de concentração: Energia

Orientador: Prof. Dr. Felipe Roman Centeno

Aprovada por:

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva, URI

Profa. Dr. Leticia Jenisch Rodrigues, UFRGS

Prof. Dr. Cirilo Seppi Bresolin, UFRGS

Prof. Dr. Eduardo André Perondi
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 18 de Outubro de 2018

AGRADECIMENTOS

A minha esposa, pelo incentivo, paciência e compreensão nesse longo período em que me dediquei quase que exclusivamente para a conclusão do mestrado.

Ao Professor Felipe R. Centeno, por todo seu apoio, ajuda e orientação para a conclusão deste estudo.

Aos meus colegas de trabalho que me deram suporte e contribuições ao longo das disciplinas.

A UFRGS e seu corpo docente pela oportunidade de aprendizado.

RESUMO

Este trabalho estuda numericamente os efeitos do emprego de promotores de turbulência nas entradas de ar e de combustível (metano) sobre o comportamento térmico de uma câmara de combustão. São resolvidas equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia, espécies químicas gasosas e fuligem, e variância da flutuação de temperatura em coordenadas cilíndricas axissimétricas. O modelo de combustão é o *Eddy Break-Up* – Arrhenius, com reação de combustão em duas etapas. O modelo de turbulência é o $k-\varepsilon$ padrão. A modelagem das interações turbulência-radiação (TRI - do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*) considera a correlação combinada entre coeficiente de absorção e temperatura e a autocorrelação de temperatura. O termo fonte de calor radiativo é calculado com o método de ordenadas discretas, considerando o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG – do inglês: *weighted-sum-of-gray-gases*) com correlações recentes. Para estudar o comportamento de um promotor de turbulência, foi alterado o parâmetro de intensidade de turbulência (IT) de ambas as correntes na entrada da câmara (ar e combustível), sendo utilizados valores de 3%, 6%, 15% e 20%, levando em consideração dois cenários de estudo: a transferência de calor radiativa na câmara de combustão e a influência das interações turbulência-radiação (TRI). Os resultados obtidos com o primeiro cenário estudado mostraram que os campos de temperatura e do termo fonte de calor radiativo, assim como a transferência de calor para a parede da câmara e a fração radiativa sofreram variações importantes com o aumento da intensidade de turbulência; em casos extremos (comparando intensidades de turbulência de 3% e de 20%) a taxa de transferência de calor por radiação na parede da câmara teve aumento de 68,2 kW (aumento de 54,2%). No cenário de estudo que compara o efeito das interações TRI, verifica-se um papel importante sobre o campo de temperaturas, no qual a temperatura máxima diminuiu com o aumento da intensidade do promotor de turbulência quando se consideraram as interações TRI; observou-se também que a transferência de calor radiativa aumentou quando as interações TRI foram consideradas (aumento na faixa de 20% para ambos valores de IT estudados), demonstrando assim a importância de considerar as interações TRI nos cálculos.

Palavras-chave: Promotores de turbulência; Radiação; Interações Turbulência-Radiação.

ABSTRACT

This work analyses numerically the effects of the use of turbulators on air and fuel (methane) inputs on the thermal behavior of a combustion chamber. The combustion model is Eddy Break-Up – Arrhenius, with two steps for the combustion reaction. Turbulence is modeled by standard $k-\varepsilon$ model. Consideration of TRI (Turbulence-Radiation Interactions) effects is made through a methodology that considers both cross-correlation between absorption coefficient and temperature and temperature self-correlation. The radiative heat source term is calculated with the discrete ordinates method, considering the weighted-sum-of-gray-gases model (WSGG) correlations. To study the behavior of a turbulators, the turbulence intensity (TI) parameter of both currents at the entrance of the chamber (air and fuel) was changed, using values of 3%, 6%, 15% and 20%, taking into account the radiative heat transfer in the combustion chamber and the influence of the turbulence-radiation interactions (TRI). The results obtained with the first scenario showed that the fields of temperature and the term radiative heat source, as well as the transfer of heat to the wall of the chamber and the radiative fraction were varied with increasing intensity of turbulence in extreme cases (comparing with turbulence intensities of 3% and 20%) the rate of heat transfer radiation in the wall of the chamber had an increase of 68,2 kW (increase 54,2%) . In the scenario that compares the TRI interactions, it is found that they play an important role on the temperature field, in which the maximum temperature decreased with the increase of the intensity of the turbulence promoter when considering the TRI interactions, it is also observed that the transfer of radiative heat increased when TRI interactions were considered (increase in the range of 20% for both TI values studied), thus demonstrating the importance of considering TRI interactions in calculations.

Keywords: Turbulators; Radiation; Turbulence-Radiation Interactions.

INDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação	1
1.2	Revisão da Literatura	2
1.3	Contribuição do trabalho	4
1.4	Organização da dissertação.....	5
2	EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS	6
2.1	Conservação de massa	6
2.2	Conservação de quantidade de movimento	6
2.2.1	Modelagem da turbulência	7
2.3	Conservação de espécies químicas	11
2.3.1	Determinação do campo de fuligem	13
2.4	Conservação de energia	14
3	MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA	16
3.1	Poder emissivo e intensidade de radiação do corpo negro	16
3.2	Intensidade de radiação em meios participantes.....	19
3.2.1	Atenuação da intensidade de radiação devido à absorção	20
3.2.2	Aumento da intensidade de radiação devido à emissão.....	21
3.2.3	Equação de transferência radiativa - ETR	23
3.3	Modelagem do coeficiente de absorção dos gases	23
3.3.1	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza.....	24
3.4	Modelagem do coeficiente de absorção da fuligem	26
3.5	Modelagem das Interações Turbulência-Radiação	27
4	MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES	31
4.1	Método de volumes finitos	31
4.2	Método de ordenadas discretas	36
4.3	Detalhes da metodologia de solução.....	41
5	APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA ESTUDADO.....	43
5.1	O problema abordado	43
5.2	Condições de contorno	45

5.3	Propriedades termofísicas	46
6	VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO	48
6.1	Estudo de convergência de malha.....	48
6.2	Balanco de energia no domínio	50
6.3	Comparação com dados experimentais da literatura	51
7	RESULTADOS E DISCUSSÕES	54
7.1	Efeito dos promotores de turbulência sobre a transferência de calor radiativa na câmara de combustão.....	54
7.2	Efeito dos promotores de turbulência sobre as interações turbulência-radiação (TRI)	62
8	CONCLUSÕES.....	71
8.1	Sugestões de trabalhos futuros.....	72
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Figura ilustrativa de uma câmara de combustão. [Göke et. Al, 2014].....	2
Figura 3.1	Intensidade de radiação a partir de uma fonte em dAs que incide em uma área dA1.....	17
Figura 3.2	Variação do fluxo de energia com a distância da fonte [Adaptado de Siegel e Howell, 2002]	19
Figura 3.3	Intensidade incidente normalmente sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha [Siegel e Howell, 2002].....	20
Figura 3.4	Geometria utilizada para dedução do aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante [Adaptado de Siegel e Howell, 2002].....	22
Figura 4.1	Volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional [Centeno, 2014].....	32
Figura 4.2	Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica [Adaptado de Menart, 2000].....	39
Figura 4.3	Volume de controle e cossenos diretores para os cálculos DOM [Adaptado de Centeno, 2014].....	40
Figura 5.1	Representação esquemática da câmara de combustão. (a) Geometria (b) Condições de Contorno.....	43
Figura 6.1	Malha com 48×140 volumes utilizada nos cálculos [Adaptada de Centeno, 2014].....	50
Figura 6.2	Perfis de temperatura na linha de centro da câmara de combustão.....	52
Figura 6.3	Perfis de frações mássicas de CH ₄ na linha de centro da câmara de combustão	52
Figura 6.4	Perfis de frações mássicas de CO ₂ na linha de centro da câmara de combustão.....	52
Figura 6.5	Perfis de frações mássicas de O ₂ na linha de centro da câmara de combustão.....	53
Figura 6.6	Perfis de frações mássicas de CO na linha de centro da câmara de combustão.....	53
Figura 7.1	Termo fonte de calor radiativo com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	55

Figura 7.2	Campos de temperatura com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	56
Figura 7.3	Perfis de temperatura na direção axial ao longo da linha de centro da câmara com promotores de turbulência de (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	57
Figura 7.4	Campos de frações molares de H ₂ O com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	58
Figura 7.5	Campos de frações molares de CO ₂ promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	58
Figura 7.6	Campo de fração volumétrica de fuligem com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	59
Figura 7.7	Perfis de fração volumétrica de fuligem na direção axial na linha de centro da câmara com promotores de turbulência: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	59
Figura 7.8	Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão com promotores de turbulência: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%.....	61
Figura 7.9	Termo fonte de calor radiativo: (a) Desconsiderando as interações TRI com IT 6%, (b) Considerando as interações TRI com IT 6%, (c) Desconsiderando as interações TRI com IT 20%, (d) Considerando as interações TRI com IT 20%.....	63
Figura 7.10	Campos de temperatura: (a) Desconsiderando as interações TRI com IT 6%, (b) Considerando as interações TRI com IT 6%, (c) Desconsiderando as interações TRI com IT 20% (d) Considerando as interações TRI com IT 20%.....	63
Figura 7.11	Figura 7.11- Perfis axiais de temperatura e de frações molares temporais médias de CH ₄ , CO ₂ , H ₂ O, O ₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara para os casos estudados.	65
Figura 7.12	Fração volumétrica da fuligem para os casos estudados.....	66
Figura 7.13	Figura 7.13– Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão para os cenários estudados	68
Figura 7.14	Campos de energia cinética turbulenta para os diferentes cenários:.....	70

Figura 7.15 Campos do valor rms das flutuações de temperatura, $\sqrt{T'^2}$ (a) com TRI, IT = 6%; (b) com TRI, IT = 20%. 70

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013].....	25
Tabela 3.2	Coeficientes do modelo WSGG para fuligem [Cassol, 2013].....	27
Tabela 4.1	Identificação da variável genérica, ϕ , coeficiente difusivo, Γ_ϕ , e termos fontes, $\overline{\dot{S}^\phi}$, das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta [Centeno, 2014].....	33
Tabela 4.2	Cossenos diretores para a aproximação S6 para geometria bidimensional	38
Tabela 5.1	Entalpia molar de formação padrão a 298,15 K e 1 atm [Turns, 2000].	47
Tabela 5.2	Parâmetros de cada reação para cálculo da taxa pelo modelo de Arrhenius [Turns, 2000; Nieckele et al., 2001; Silva, 2005; Silva et al., 2007, Centeno, 2014].	47
Tabela 6.1	Fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO ₂ e H ₂ O para diferentes malhas.....	48
Tabela 6.2	Índice de convergência de malha para as variáveis: fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO ₂ e H ₂ O.....	49
Tabela 6.3	Análise do balanço de energia na câmara de combustão	50
Tabela 7.1	Temperatura máxima na chama e temperatura média em todo o domínio nos cenários estudados	56
Tabela 7.2	Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os promotores de turbulência estudados	60
Tabela 7.3	Taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.	62
Tabela 7.4	Temperatura máxima na chama nos cenários estudados.....	64
Tabela 7.5	Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os cenários estudados	67
Tabela 7.6	Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa..	69

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CFD	dinâmica de fluidos computacional
CW	modelo do número de onda cumulativo
DNS	simulação numérica direta
DOM	método de ordenadas discretas
E-A	modelo <i>Eddy Break-Up</i> – Arrhenius
ETR	equação de transferência radiativa
GC	modelo de gás cinza
GCI	índice de convergência de malha
GN	gás natural
HITEMP	banco de dados espectrais (para as espécies H ₂ O, CO ₂ , CO, NO e OH) obtidos em alta temperatura
HITRAN	banco de dados espectrais (39 espécies) obtidos em temperatura ambiente
LBL	linha-por-linha
LES	simulação de grandes escalas
OTFA	aproximação da flutuação opticamente fina
PDF	função densidade de probabilidade
RANS	modelagem clássica da turbulência com médias de Reynolds
rms	do inglês: <i>root mean square</i>
RTE	do inglês: <i>radiative transfer equation</i>
SIMPLE	método semi-implícito para acoplamento pressão-velocidade
SNB	modelo estatístico de banda estreita
TDMA	algoritmo para solução de matrizes tri-diagonais
TRI	interações turbulência-radiação
WSGG	modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza

LISTA DE SIMBOLOS

A	fator pré-exponencial na equação de Arrhenius, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{kmol}^{-1}$
A	área, m^2
a_j	coeficiente de ponderação do gás j no modelo WSGG
b	termo fonte no método de volumes finitos
b_j	coeficiente polinomial no modelo WSGG
C	seção-transversal de absorção, $\text{cm}^2 \cdot \text{molécula}^{-1}$
\bar{c}	concentração molar, $\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$
CH_4	metano
c_0	velocidade da luz no vácuo, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
$c_0, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$	coeficientes polinomiais no modelo GC
$C_{\mu}, C_{1,\varepsilon}, C_{2,\varepsilon}$	constantes do modelo $k-\varepsilon$
CO	monóxido de carbono
CO_2	dióxido de carbono
c_p	calor específico a pressão constante, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
C_T	constante do modelo de cálculo das interações TRI
C_{TRI1}	constante do modelo de cálculo das interações TRI
C_{TRI2}	constante do modelo de cálculo das interações TRI
C_s	constante no modelo de Khan e Greeves
D	coeficiente de difusão, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
D	condutância difusiva nas faces dos volumes de controle, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
D	diâmetro, m
dA	elemento de área, m^2
dV	elemento de volume, m^3
$d\omega$	elemento de ângulo sólido, sr
<i>desvio%</i>	desvio relativo percentual entre resultados distintos
E	poder emissivo, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$
E	energia de ativação na equação de Arrhenius, $\text{kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}$
<i>erro %</i>	erro relativo percentual entre resultados distintos
F	fluxo difusivo por unidade de massa nas faces dos volumes de controle, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
f_1, f_2	solução para malha 1 e 2, no cálculo do GCI

f_{rad}	fração radiativa,%
F_s	fator de segurança no cálculo do GCI
f_v	fração volumétrica
h	entalpia, $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
h	constante universal de Planck, $\text{J}\cdot\text{s}$
h^0	entalpia de formação na temperatura de referência, $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
\bar{h}^0	entalpia molar de formação na temperatura de referência, $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$
H_2O	vapor d'água
I	intensidade de radiação, $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}$
IT	intensidade de turbulência,%
K	coeficiente de extinção, m^{-1}
K_1, K_2	constantes do modelo <i>Eddy Break-Up</i>
k	condutividade térmica, $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
k	energia cinética turbulenta, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-2}$
k	constante universal de Boltzmann, $\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$
L	volume à direita do volume P
l	fronteira leste do volume P
l	comprimento característico da escala de turbulência, m
M	quantidade total de direções ordenadas
M	massa, kg
MM	massa molecular, $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$
N	volume acima do volume P
n	fronteira norte do volume P
n	coeficiente de dependência da temperatura, adimensional
N_2	nitrogênio
N_G	número de gases cinza considerados no modelo WSGG
N_L	número de Loschmidt, $\text{moléculas}\cdot\text{cm}^{-3}\cdot\text{atm}^{-1}$
Nu	número de Nusselt [$hL\cdot k^{-1}$]
O	volume à esquerda do volume P
o	fronteira oeste do volume P
O_2	oxigênio
P	ponto central do volume de controle
p	pressão, Pa

p	pressão parcial, Pa ou atm
p	ordem de convergência utilizada no cálculo do GCI
p^*	pressão modificada, Pa
p_{CO_2}	pressão parcial de CO_2 , atm
$p_{\text{H}_2\text{O}}$	pressão parcial de H_2O , atm
P_k	termo de produção ou dissipação da energia cinética turbulenta, $\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
Pr	número de Prandtl [$c_p\mu\cdot k^{-1}$]
Pr_t	número de Prandtl turbulento
p_s	pressão parcial da espécie participante, atm
pS	produto da pressão pelo caminho, atm·m
Q	taxa de energia, W
q	fluxo de calor, $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$
R	constante universal dos gases, $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
R	taxa líquida de reação, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
r	direção radial, m
r	expoente da razão de equivalência no modelo de Khan e Greeves
r	razão entre o número de volumes utilizada no cálculo do GCI
Re	número de Reynolds [$\rho VL\cdot\mu^{-1}$]
S	distância ou posição espacial, m
S	volume abaixo do volume P
s	direção de um feixe
s	fronteira sul do volume P
s	seção-transversal de espalhamento, $\text{m}^2\cdot\text{partícula}^{-1}$
Sc	número de Schmidt [$\nu\cdot D^{-1}$]
Sc_t	número de Schmidt turbulento
\dot{S}^ϕ	termo fonte genérico da equação de conservação da variável ϕ
$\overline{\dot{S}^h}$	termo fonte da equação da conservação de energia, $\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
S_{rad}	termo fonte de calor radiativo, $\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
S_{rea}	termo fonte das reações químicas, $\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
T	temperatura, K
T'^2	variância da flutuação da temperatura, K^2
u	velocidade axial, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

u^+	velocidade característica adimensional
u^*	velocidade de fricção, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
V	volume, m^3
v	velocidade radial, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
w	pesos das quadraturas no método DOM
w	velocidade angular, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
y	direção normal à superfície, m
y^+	dimensão característica adimensional
z	direção axial, m

Símbolos Gregos

β	expoente da temperatura na equação de Arrhenius
β	constante do modelo de propriedades espectrais da fuligem
ΔT	variação de temperatura, K
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-3}$
ε	emissividade ou emitância, adimensional
ε_{12}	erro relativo entre as malhas 1 e 2, no cálculo do GCI
η	coeficiente estequiométrico
η	número de onda, cm^{-1}
φ	ângulo azimutal, rad
κ	coeficiente de absorção, m^{-1}
κ_j	coeficiente de absorção do gás j no modelo WSGG
μ	viscosidade dinâmica, $\text{Ns}\cdot\text{m}^{-2}$
μ_t	viscosidade turbulenta, $\text{Ns}\cdot\text{m}^{-2}$
ν	viscosidade cinemática, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
θ	ângulo polar, rad
ρ	massa específica, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
τ_w	tensão cisalhante na parede, Pa
τ	espessura óptica
ω	ângulo sólido, sr
Ψ	constante de ajuste de Nikuradse

ζ	fator de interpolação no método DOM
χ	variável utilizada para verificação de convergência assintótica no GCI

Super-índices

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

Sub-índices

a	energia absorvida
α	cada espécie química na câmara
α^*	espécie reagente no modelo <i>Eddy Break-Up</i>
CN	condição para o corpo negro
$comb$	combustível
$com TRI, sem TRI$	cálculos incluindo e desprezando as interações TRI
e	energia emitida
ent	condição na entrada
$form$	formação de fuligem
g	condição para a mistura gasosa
η	dependência espectral com relação ao número de onda
i	posição espectral
i	radiação incidente
ij	posição espectral correspondente à transição de nível energético i-j
j	cada gás cinza no modelo WSGG
k	cada reação química em que a espécie α participa
LBL	cálculo linha-por-linha
m	cada direção discreta no método DOM
m, n	cada gás cinza no modelo WSGG na mistura de gás (m) e fuligem (n)
$máx$	valor máximo
n, s, l, o	fronteiras norte, sul, leste e oeste do volume de controle
N	ordem da aproximação no método DOM

<i>ox</i>	oxidante
<i>oxid</i>	oxidação de fuligem
<i>p</i>	produtos da combustão no modelo <i>Eddy Break-Up</i>
<i>r</i>	direção radial
<i>rad</i>	radiação
<i>rea</i>	reações químicas
<i>ref</i>	condição de referência
<i>s</i>	espalhamento
<i>s</i>	fuligem
<i>TRI</i>	interações turbulência-radiação
<i>w</i>	referente à parede
<i>z</i>	direção axial

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

O estudo da eficiência do processo de combustão é impulsionado pela crescente demanda de energia, estima-se que ela representa cerca de 80% do processo de produção de energia no Brasil [Brasil, 2017], sendo parte da energia utilizada em transportes, produção de energia elétrica e de energia térmica, com isso destaca-se a importância de se conhecer profundamente esta ciência, com intuito de se aperfeiçoar seus modelos. O estudo para melhorias nos processos energéticos se tornou essencial para as empresas se manterem competitivas no mercado e o estudo de processos que envolvem combustão é importantíssimo para estas melhorias, além de resultar em uma diminuição de seus efeitos de emissão de gases poluentes.

A análise experimental da combustão é desafiadora, uma vez ser necessário a inclusão de inúmeras ferramentas e sensores que causam perturbação no comportamento do fluido. A análise numérica é uma ferramenta de grande valia para prever e analisar o comportamento de escoamentos, com ela sendo possível reduzir custos e tempo de projetos, além de possibilitar análises que não são possíveis através de experimentos.

Segundo Liñán e Willians, 1993, combustão é a ciência das reações químicas exotérmicas em escoamentos com transmissão de calor e massa.

Uma câmara de combustão tem por finalidade promover a mistura entre o ar e combustível, de forma que a reação de combustão permaneça estável, na Figura 1.1, um exemplo ilustrativo de uma câmara de combustão.

A entrada de vazão de ar na câmara de combustão se inicia no difusor, ele permite reduzir a velocidade do escoamento, de forma a diminuir a perda de carga ao longo da câmara de combustão, o combustor é dividido em três principais zonas: Zona primária, onde o processo de combustão ocorre, sendo sua função ancorar a chama, garantindo, tempo, temperatura e turbulência suficiente para que ocorra a combustão completa da mistura ar-combustível, Zona secundária, região onde em que perdas por dissociação do escoamento podem ser recuperadas e a Zona de diluição que admite os gases provenientes da zona secundária e os combina com o ar utilizado para arrefecer as paredes do combustor.

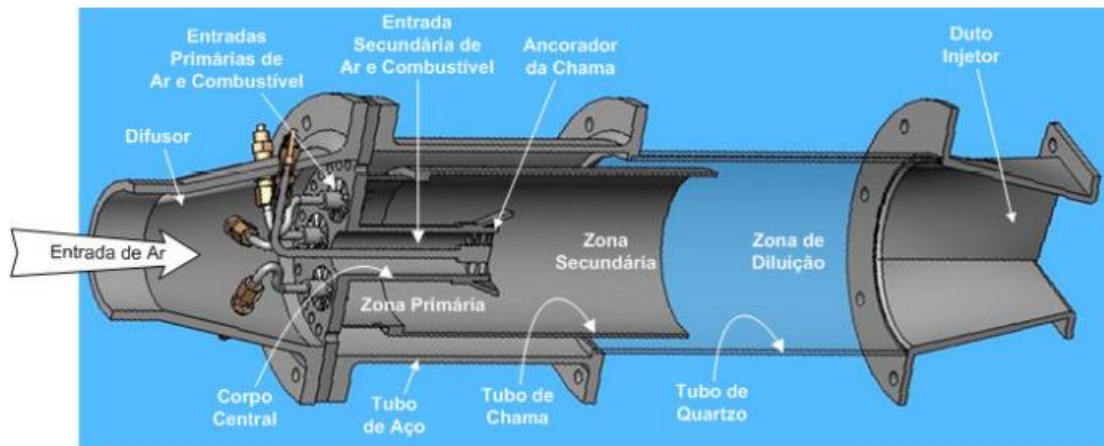


Figura 1.1 – Figura ilustrativa de uma câmara de combustão. [Ferreira, 2007]

O entendimento e o desenvolvimento de modelos matemáticos para análise da transferência de calor em problemas de combustão é de grande importância, uma vez que os parâmetros envolvidos na combustão são influenciados pela transferência de calor, e, conseqüentemente, o projeto e a otimização de sistemas de combustão dependem dos modelos.

Destaca-se ainda a abordagem complexa que será utilizada no presente estudo, uma vez que a análise numérica será realizada empregando modelagens acopladas para os diversos mecanismos de transporte que existem em uma chama turbulenta, tais como combustão, radiação e turbulência.

Sendo assim, o principal objetivo deste trabalho é analisar numericamente os impactos que a variação da intensidade de turbulência das correntes de entrada (combustível e oxidante) acarreta sobre o comportamento térmico de uma câmara de combustão.

1.2 Revisão da Literatura

O efeito da utilização de promotores de turbulência é caracterizado pela intensidade de turbulência nas correntes em que este equipamento estiver instalado, sendo o tratamento numérico dado através da variação deste parâmetro. Neste capítulo serão apresentados os trabalhos relacionados ao efeito da intensidade de turbulência em sistemas de combustão.

A intensidade de turbulência pode ser estudada de diferentes formas, dentre os trabalhos analisados foi verificado que grande parte estuda a utilização de promotores de turbulência para verificar o seu efeito sobre o comportamento da transferência de calor por convecção e

combustão.

Dentre as pesquisas realizadas foram encontrados trabalhos sobre os efeitos da intensidade da turbulência, como a taxa de evaporação em Sornek et al., 2000, no qual foi imposta uma grade na frente do bocal de pulverização com objetivo de alterar as características da turbulência, verificando-se que a evaporação mais rápida não levou necessariamente a uma combustão mais rápida e o combustível evaporado não queimou instantaneamente, embora as características de turbulência tenham sido alteradas.

Saqr, 2010, calcularam o efeito do aumento da intensidade de turbulência na corrente de ar sobre a formação de NO e de fuligem em uma câmara de combustão cilíndrica com chama turbulenta difusiva de metano. Os resultados mostraram que o aumento da intensidade de turbulência no fluxo do ar resultou em uma significativa redução na formação de NO na chama, além de uma redução considerável na formação de fuligem.

Hashemi et al, 2001a, estudaram o efeito da intensidade de turbulência pela injeção dupla de combustível em um cilindro mantendo a homogeneidade da mistura, concluindo-se que a intensidade de turbulência contribuiu para o aumento da velocidade de propagação da chama, e ainda a homogeneidade da mistura afetou a taxa de aumento de pressão.

Ilbas et al. 2017 analisaram como a alteração dos ângulos de entrada do combustível e ar em um combustor afeta as características da combustão de um gás de síntese. Verificou-se que a temperatura foi muito afetada, juntamente com a velocidade do gás, concluindo-se também que a zona de alta temperatura da chama do gás se moveu para a montante do queimador devido ao efeito da velocidade tangencial conforme o ângulo foi aumentado.

Hashemi et al., 2011b, verificaram como o efeito da intensidade da turbulência do ar sobre a formação de NO na combustão de combustíveis mistos de hidrogênio e hidrocarbonetos. Os resultados mostraram que o aumento da intensidade da turbulência do ar diminuiu a concentração de NO na zona de chama e na saída do combustor.

Darbandi et al, 2017, estudaram os efeitos de promotores de turbulência nas correntes de entrada de ar e de combustível sobre o comportamento de um combustor que queima o combustível propulsor a jato (JP) (querosene-substituto), e também sobre a emissão de poluentes. Os resultados do estudo indicaram que o uso de promotores de turbulência adequados pode afetar consideravelmente o comportamento térmico de um combustor, além disso, obteve-se também redução na emissão de poluentes de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH) do combustor.

Sadiki et al., 2005 analisaram os efeitos das variações de intensidade de turbulência na dispersão de gotículas turbulentas, vaporização e mistura para sprays não reagentes, também investigou os efeitos do acoplamento da modulação da turbulência com parâmetros externos, como a intensidade do turbilhão. Os resultados das variações da intensidade da turbulência revelam a existência de uma faixa limitada, da qual o aumento ou a diminuição da intensidade da turbulência não afeta mais a eficiência da transferência de calor e massa, também verificou que em particular para o caso estudado a modulação da turbulência altera a taxa de evaporação, que por sua vez influencia a mistura e a distribuição da concentração de espécies.

Leuckel, et., al, 1989, verificaram o comportamento explosivo de misturas CH_4/ar dentro de um vaso cilíndrico fechado com objetivo de investigar o efeito da turbulência na estrutura e a taxa de propagação de chamas turbulentas transitórias para diferentes níveis de turbulência inicial. Verificou-se que a turbulência razoavelmente uniforme poderia ser alcançada nas zonas centrais dos vasos e que os valores RMS da velocidade de fluxo eram proporcionais à velocidade do ventilador.

1.3 Contribuição do trabalho

Segundo Coelho e Costa, 2007, em escoamentos turbulentos as distribuições de velocidade, temperatura e concentrações das espécies variam ao longo do tempo, e as flutuações turbulentas podem ser muito significativas. A turbulência provoca um aumento da taxa de mistura, um aumento acentuado da taxa de consumo dos reagentes, assim aumentando a taxa de liberação de energia química e a potência de um dado equipamento é muito superior à que se teria em um escoamento laminar. Desta maneira fica evidenciando a relevância de se estudar o impacto que promotores de turbulência geram em escoamentos reativos.

Um dos principais efeitos do uso de um promotor de turbulência é aumentar a turbulência característica, que pode ser representada pelo parâmetro IT (intensidade de turbulência), a partir desta definição os efeitos do promotor podem ser adequadamente estudados numericamente.

Assim, o presente trabalho numérico possui como objetivo principal avaliar os efeitos do uso de promotores de turbulência nas correntes de entrada de ar e de combustível (metano) de uma câmara de combustão, levando em consideração a transferência de calor radiativa das espécies gasosas e da fuligem, assim como os efeitos das interações turbulência-radiação

(TRI), assim visa contribuir de maneira significativa e objetiva para a literatura nesta importante área do conhecimento.

1.4 Organização da dissertação

O Capítulo 2 apresenta as equações fundamentais em regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétrica para o processo de combustão turbulenta, sendo apresentadas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia, e de espécies químicas, também é apresentado o modelo de turbulência utilizado (k - ϵ padrão), assim como o equacionamento dos modelos de combustão e de formação de fuligem que serão utilizados. A equação de transferência radiativa, a qual descreve como a energia radiativa é transportada dentro de um meio participante é discutida no Capítulo 3, onde também são apresentados os conceitos de corpo negro, intensidade de radiação e meios participantes, além da apresentação da modelagem da radiação devido à fuligem, e das interações turbulência-radiação. O Capítulo 4 apresenta os métodos numéricos necessários para resolver o conjunto de equações referentes ao processo de combustão turbulenta incluindo transferência de calor por radiação. Para verificação e validação da modelagem adotada, o Capítulo 5 apresenta o problema abordado, incluindo condições de contorno e propriedades termofísicas. No Capítulo 6 é apresentado o estudo de convergência de malha, balanço de energia no domínio e comparação de resultados obtidos no presente trabalho com resultados da literatura. O Capítulo 7 apresenta os resultados obtidos na presente pesquisa, os quais avaliam a questão da transferência de calor radiativa na câmara de combustão e a influência das interações turbulência-radiação (TRI). O Capítulo 7 traz as conclusões e as sugestões de trabalhos futuros.

2 EQUAÇÕES FUNDAMENTAIS

Este capítulo apresenta as equações fundamentais em regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétrica para o processo de combustão turbulenta, sendo apresentadas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia, e de espécies químicas, para as quais é assumida a hipótese de Boussinesq para a viscosidade turbulenta e aplica-se o modelo $k-\varepsilon$ para calculá-la. Ainda, este capítulo traz o equacionamento dos modelos de combustão e de formação de fuligem empregados. As equações referentes ao processo de transferência de calor por radiação serão apresentadas separadamente no Capítulo 3, devido à sua importância para o presente trabalho.

2.1 Conservação de massa

Para escoamentos turbulentos, a equação da conservação da massa em coordenadas cilíndricas axissimétricas é descrita como:

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

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

2.2 Conservação de quantidade de movimento

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

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{u}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial z}(\bar{\rho}\bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{\rho}\bar{v}) = & -\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r(\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t)\bar{v}}{r^2} + \frac{\bar{\rho}\bar{w}^2}{r} \end{aligned} \quad (2.3)$$

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

onde μ é a viscosidade dinâmica da mistura gasosa, μ_t é a viscosidade turbulenta, \bar{p} é a pressão temporal média da mistura gasosa, o termo $p^* = \bar{p} - (2/3)k$ é a pressão modificada (onde a parcela $(2/3)k$ é devida à forma generalizada do tensor de Reynolds introduzida por [Kolmogorov, 1942]. k e ε são a energia cinética turbulenta e sua dissipação. A equação que representa movimentos angulares não é resolvida no presente trabalho, uma vez que não há presença de *swirl*, ou seja, o escoamento de ar e combustível é considerado na direção axial na entrada da câmara.

2.2.1 Modelagem da turbulência

Atualmente existem várias metodologias numéricas para solução de escoamentos turbulentos, cada uma adotando maior ou menor detalhamento das características turbulentas, porém devido a complexidade do assunto não existe nenhum modelo que possa ser aplicado adequadamente a todos os tipos de escoamento. Pode-se dividir as metodologias de acordo com o nível de modelagem das escalas turbulentas, e conseqüentemente, conforme a sua exigência computacional, da menor exigência até a maior:

1. Modelagem clássica da turbulência (RANS)
2. Simulação de grandes escalas (LES)
3. Simulação numérica direta (DNS)

As equações RANS são obtidas através de um conjunto de médias das equações que modelam o escoamento. A aplicação de médias temporais nas equações de transporte leva a termos adicionais devido às parcelas flutuantes de tais propriedades, sendo estes termos denominados *Tensões de Reynolds*, estes são os pontos críticos, pois representam os efeitos das flutuações turbulentas de pressão e velocidade, contudo o número de equações de conservação permanece o mesmo, e devido a estes termos adicionais surge o problema do fechamento, sendo necessário introduzir novas equações para a modelagem dos termos

adicionais nas equações de conservação da quantidade de movimento, de energia, e de espécies químicas.

Na metodologia LES as grandes escalas são calculadas diretamente, e para as pequenas utilizam-se modelos de escalas de uma parte dita sub-malha. Assim, as estruturas turbulentas transportadoras de energia e quantidade de movimento (grandes escalas) são resolvidas diretamente da solução das equações filtradas, enquanto que apenas as menores estruturas (escalas sub-malha) são modeladas [Silva et al., 2002].

A metodologia DNS resolve as equações de conservação em todas as escalas do escoamento turbulento. Além da discretização espacial bastante refinada, deve-se ainda levar em conta outros aspectos importantes na DNS: necessidade de utilizar pequenos incrementos de tempo devido ao comportamento dos vórtices de pequenas escalas (altas frequências), necessidade de utilizar um tempo de integração numérica muito maior do que a escala de tempo das maiores escalas para se obter boa convergência das estatísticas da turbulência, e ainda necessidade de utilizar esquemas numéricos com boa precisão, tanto para a discretização espacial quanto para a discretização temporal [Lesieur et al., 2005].

No presente trabalho foi utilizada a metodologia RANS, pois esta apresenta boa relação custo computacional versus concordância de resultados numéricos com dados experimentais, além de ser adequada aos objetivos da presente pesquisa.

A viscosidade turbulenta, μ_t presente nas Equações 2.2 a 2.4, pode ser obtida através de diversos modelos: algébricos, de uma ou duas equações e de fechamento de segunda ordem, conhecidos como modelos de transporte de tensões, propostos primeiramente por Chou, 1945, e Rotta, 1951, os quais não utilizam a hipótese de Boussinesq [Wilcox, 2006]. No presente trabalho adota-se o modelo de turbulência $k-\varepsilon$, proposto inicialmente por Launder e Spalding, 1972, sendo um dos mais difundidos atualmente, assim como o modelo $k-\omega$, também utiliza duas equações de conservação para determinar a viscosidade turbulenta. Apesar de suas limitações, tais como em aplicações em escoamentos parietais, regiões com recirculação ou separação de camadas limites [Fluent, 2009; Freire et al., 2002], o modelo $k-\varepsilon$ tem sido empregado em simulações de combustão em câmaras de combustão cilíndricas, provendo bons resultados.

São consideradas duas equações para compor o modelo, uma de conservação para a energia cinética turbulenta k e outra para sua dissipação ε . Em regime permanente e em coordenadas cilíndricas axissimétricas, estas equações são dadas por,

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} k) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right) + P_k - \bar{\rho} \varepsilon \quad (2.5)$$

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \varepsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + C_{1,\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.6)$$

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

$$P_k = \mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \quad (2.7)$$

A viscosidade turbulenta é definida como:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.8)$$

Os valores das constantes do modelo são [Launder e Spalding, 1972; Launder e Sharma, 1974; Cotton e Jackson, 1990; Davidson, 1990; Xia et al., 1998]:

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

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

Segundo Freire et al., 2002, a região da parede pode ser subdividida em três regiões:

(i) Subcamada limite viscosa, (ii) Camada de amortecimento e (iii) Região turbulenta.

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

$$\begin{aligned}
y^+ \leq 11,5 &\rightarrow u^+ = y^+ \\
y^+ > 11,5 &\rightarrow u^+ = \frac{1}{\Lambda} \ln(y^+) + \Psi
\end{aligned} \tag{2.9}$$

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

De acordo com Patankar, 1980, o cálculo do fluxo de calor por difusão nas regiões próximas à parede também implica na utilização de funções de parede quando o escoamento é não-isotérmico.

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

$$\Gamma_T = \left(\frac{\mu}{Pr} \right) \tag{2.10}$$

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

$$\Gamma_T = \frac{\mu y^+}{Pr_t \left\{ 2,5 \ln(9 y^+) + \left[9 \left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1 \right) \left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{-1/4} \right] \right\}} \tag{2.11}$$

onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento.

2.3 Conservação de espécies químicas

A exceção de nitrogênio que mantém-se inerte, equação da conservação da massa das espécies químicas é resolvida para cada uma das espécies presentes nas reações químicas empregadas. Considerando regime permanente, incompressível, em coordenadas cilíndricas axissimétricas, a equação é definida por:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{y}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial r} \right) + \bar{R}_\alpha \quad (2.12)$$

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

$$\bar{R}_\alpha = \sum_k \bar{R}_{\alpha,k} \quad (2.13)$$

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

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

$$\bar{R}_{\alpha,k} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha \bar{T}^{\beta_k} A_k e^{(-E_k/\bar{R}\bar{T})} \prod_{\alpha, \text{reagentes}} \bar{c}_\alpha^{\gamma_{\alpha,k}} \quad (2.14)$$

onde $\eta_{\alpha,k}$ é o coeficiente estequiométrico da espécie α na reação k (valores positivos para reagentes e negativos para produtos), \overline{MM}_α é a massa molecular da espécie α , β_k é o expoente da temperatura para cada reação k , A_k é o fator pré-exponencial da reação k , E_k é a

energia de ativação da reação k , \bar{R} é a constante universal dos gases perfeitos ($8,3145 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), \bar{c}_α é a concentração molar da espécie reagente α , $\gamma_{\alpha,k}$ é o expoente da concentração da espécie β_k na reação k .

No modelo *Eddy Break-Up* as taxas de reações químicas entre as espécies estão basicamente fundamentadas em teorias de dissipação de vórtices onde a turbulência está presente. Para este modelo assume-se que a taxa de dissipação dos vórtices turbulentos seja proporcional à razão entre a dissipação da energia cinética turbulenta e a energia cinética turbulenta, ε/k . A taxa de reação $\overline{R_{\alpha,k}}$ é determinada pelas equações,

$$\overline{R_{\alpha,k}} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM_\alpha} K_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\overline{y_{\alpha^*}}}{\eta_{\alpha^*,k} \overline{MM_{\alpha^*}}} \right) \quad (2.15)$$

$$\overline{R_{\alpha,k}} = \eta_{\alpha,k} \overline{MM_\alpha} K_1 K_2 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left(\frac{\sum_p \overline{y_p}}{\sum_p \eta_{p,k} \overline{MM_p}} \right) \quad (2.16)$$

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

No modelo combinado de *Eddy Break-Up* – Arrhenius (modelo E-A), adotado no presente estudo, o menor valor obtido no cálculo da equação de Arrhenius Equação. 2.14, e das equações de Magnussen Equações. 2.15 e 2.16, deve ser empregado no cálculo do termo fonte das equações de conservação de energia e de espécies químicas. Este modelo é capaz de fornecer bons resultados quando comparados com dados experimentais, podendo-se citar inúmeros exemplos de sua aplicação [Bidi et al., 2008; Silva et al., 2007; Ilbas, 2005; Nieckele et al., 2001; Miroslav et al., 2001].

2.3.1 Determinação do campo de fuligem

As taxas de formação e oxidação da fuligem são calculadas no presente trabalho utilizando o modelo de Khan e Greeves, 1974, em conjunto com o modelo de Magnussen e Hjertager, 1977, permitindo assim a determinação das taxas de formação e oxidação da fuligem, respectivamente. O objetivo de calcular tal campo está relacionado com as análises que poderão ser realizadas sobre a contribuição da fuligem para a transferência de calor radiativa no interior da câmara de combustão.

Considerando regime permanente em coordenadas cilíndricas axissimétricas, o campo de fuligem é obtido através da solução da seguinte equação de transporte,

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial z} (\bar{\rho} \bar{y}_s) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{y}_s) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_s}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \bar{y}_s}{\partial r} \right) + \bar{R}_s \quad (2.17)$$

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

$$\bar{R}_s = \overline{R_{s,form}} - \overline{R_{s,oxid}} \quad (2.18)$$

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

$$\overline{R_{s,form}} = C_s p_{comb} \phi^r e^{-E/RT} \quad (2.19)$$

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

O modelo de Magnussen é utilizado para o cálculo da taxa de oxidação da fuligem [Magnussen e Hjertager, 1977]. A taxa de oxidação efetiva é o menor valor entre duas expressões,

$$\overline{R_{s,oxid}} = \min[\bar{R}_1, \bar{R}_2] \quad (2.20)$$

As duas taxas \bar{R}_1 e \bar{R}_2 são calculadas como

$$\overline{R_1} = K_1 \overline{\rho} \overline{y_s} \frac{\varepsilon}{k} \quad (2.21)$$

e

$$\overline{R_2} = K_1 \overline{\rho} \left(\frac{\overline{y_{ox}}}{\eta_s} \right) \left(\frac{\overline{y_s \eta_s}}{\overline{y_s \eta_s} + \overline{y_{comb} \eta_{comb}}} \right) \frac{\varepsilon}{k} \quad (2.22)$$

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

2.4 Conservação de energia

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

$$\overline{u} \frac{\partial}{\partial z} (\overline{\rho h}) + \overline{v} \frac{\partial}{\partial r} (\overline{\rho h}) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{h}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{h}}{\partial r} \right) + \overline{\dot{S}^h} \quad (2.23)$$

onde o somatório das entalpias médias temporais de cada espécie define a entalpia total temporal média da mistura \overline{h} de acordo com a seguinte equação:

$$\overline{h} = \sum_{\alpha} \overline{y_{\alpha}} \overline{h_{\alpha}} \quad (2.24)$$

Na Equação 2.24 a entalpia de cada espécie α é dada por,

$$\overline{h_{\alpha}} = h_{\alpha}^0 + \int_{T_{ref}}^{\overline{T}} c_{p,\alpha} dT \quad (2.25)$$

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

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

$$c_p = \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha} c_{p,\alpha} \quad (2.26)$$

As correlações utilizadas para determinação do calor específico das espécies químicas ($c_{p,\alpha}$) envolvidas na reação de combustão do metano foram obtidas em Turns, 2000.

O termo fonte \bar{S}^h na Equação 2.24 é composto pelos termos \bar{S}_{rad} e \bar{S}_{rea} . O termo fonte de calor radiativo, \bar{S}_{rad} , calculado como $\bar{S}_{rad} = -\nabla \cdot \bar{q}_{rad}$, será discutido no Capítulo 3. O termo fonte \bar{S}_{rea} representa o somatório dos termos fontes devido às reações químicas, e pode ser definido da seguinte forma,

$$\bar{S}_{rea} = \sum_{\alpha} \left[h_{\alpha}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,\alpha} dT \right] \bar{R}_{\alpha} \quad (2.27)$$

onde \bar{R}_{α} é a taxa volumétrica de formação ou consumo da espécie α obtida com o modelo de combustão (modelo E-A, descrito na Seção 2.3), e devem ser consideradas todas as espécies químicas (reagentes e produtos) que fazem parte das reações de combustão.

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

$$\bar{\rho} = \frac{p_0 \overline{MM}}{R\bar{T}} \quad (2.28)$$

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

$$\overline{MM} = \left(\sum_{\alpha} \frac{\bar{y}_{\alpha}}{MM_{\alpha}} \right)^{-1} \quad (2.29)$$

onde MM_{α} é a massa molecular da espécie α .

3 MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA

O objetivo deste capítulo é apresentar a ETR - Equação de Transferência Radiativa, a qual descreve como a energia radiativa é transportada dentro de um meio participante. Para isso, também será necessário abordar neste capítulo outros temas correlatos, tais como: corpo negro, intensidade de radiação, comportamento espectral dos gases participantes no processo de transferência radiativa, assim como a modelagem deste comportamento, modelagem do comportamento radiativo da fuligem e finalizando, abordam-se as interações turbulência-radiação, assim como a modelagem adotada no presente trabalho para estas interações. Maiores detalhes sobre a modelagem matemática deste capítulo podem ser encontrada em Siegel, 2002, Modest, 2003 e Coelho, 2007.

3.1 Poder emissivo e intensidade de radiação do corpo negro

O corpo negro é uma idealização que serve de padrão para definir propriedades radiativas de superfícies reais, possuindo a propriedade de absorver toda energia radiante incidente, independente da direção e do comprimento de onda, e ainda, não há nenhuma superfície que emita mais energia do que um corpo negro, para certa temperatura e número de onda.

A intensidade de radiação espectral do corpo negro, de acordo com a temperatura e o número de onda, é descrita pela distribuição espectral de Planck,

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

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

O poder emissivo espectral do corpo negro é dado por,

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

considerando que o corpo negro é um emissor difuso, sendo $E_{\eta,CN}(\eta,T)$ o poder emissivo espectral do corpo negro, em W·m⁻²·cm, e $I_{\eta,CN}(\eta,T)$ a intensidade espectral do corpo negro,

em $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{cm} \cdot \text{sr}^{-1}$.

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

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

onde $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzmann. Este é o poder emissivo total do corpo negro, em $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$, que representa o fluxo de energia radiativa emitido por uma superfície de área unitária à temperatura T . A partir da Equação 3.3, pode-se obter a intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro, dada por,

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

Neste ponto, torna-se interessante definir o parâmetro *intensidade de radiação*. De acordo com a definição de Siegel, 2002, a intensidade de radiação emitida por um corpo negro não varia com a direção, sendo esta invariância útil para comparação da intensidade direcional emitida por superfícies reais com aquela emitida por um corpo negro. A intensidade de radiação numa dada direção (θ, φ) é definida como a energia que sai da superfície por unidade de tempo, por unidade de área projetada normal à direção (θ, φ) , e por unidade de ângulo sólido elementar centrado em torno desta direção (θ, φ) .

Conforme a Figura 3.1 considera-se que a radiação sai de uma fonte dA_s , e então percorre um meio ideal que não absorve, não emite, e não espalha radiação térmica, e que possui propriedades radiativas constantes.

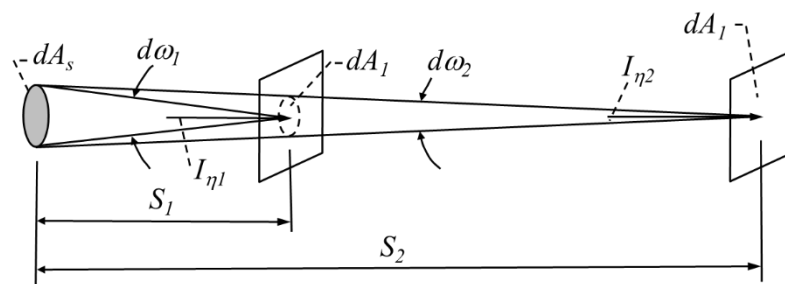


Figura 3.1- Intensidade de radiação a partir de uma fonte em dA_s que incide em uma área dA_1

[Siegel 2002].

Considera-se então que um elemento de área imaginário dA_1 está posicionado a uma distância S_1 de dA_s e que dA_s e dA_1 são normais a S_1 , como mostrado na Figura. 3.1. A partir

da definição de intensidade espectral $I_{\eta,1}$, como a taxa de energia que passa através de dA_I , por unidade de área projetada de dA_I , por unidade de ângulo sólido, e por unidade de intervalo de número de onda, a energia de dA_s passando através de dA_I na direção de S_I é

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

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

Supõe-se agora que dA_I esteja posicionada a uma distância S_2 da fonte ao longo da mesma direção original. A taxa de energia que passa por dA_I na nova posição é,

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

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

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

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

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

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

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

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

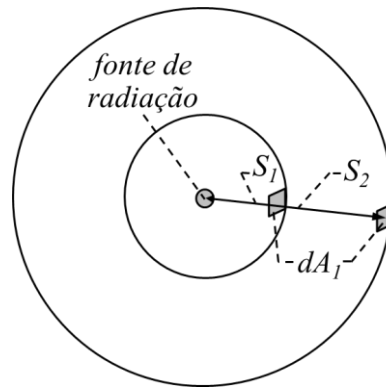


Figura 3.2- Variação do fluxo de energia com a distância da fonte [Adaptado de Siegel 2002].

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

3.2 Intensidade de radiação em meios participantes

Para de obter a intensidade de radiação através de um meio participante, utiliza-se a ETR (equação de transferência radiativa), a qual descreve a intensidade de radiação através de um meio que absorve, emite e espalha energia radiativa. Nas próximas seções serão apresentados os principais efeitos de atenuação (devido à absorção) e aumento (devido à emissão) da intensidade de radiação no meio para formar a ETR. No presente trabalho, as parcelas de atenuação e aumento da intensidade de radiação no meio em decorrência do espalhamento são desprezadas, uma vez que a chama em estudo é proveniente da queima de metano, o qual possui baixa formação de fuligem. Diversos estudos trataram problemas similares ao aqui resolvido desprezando os efeitos do espalhamento, também levando em consideração a baixa formação de fuligem [Mazumder e Modest, 1999; Brookes e Moss, 1999b, Gupta et al., 2013].

3.2.1 Atenuação da intensidade de radiação devido à absorção

Conforme mostrado na Figura 3.3, considere I_η a intensidade de radiação espectral incidente normal sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha radiação. Conforme a radiação passa através de dS , a sua intensidade é reduzida devido à absorção e ao espalhamento (este último efeito será desprezado no presente trabalho pelos motivos expostos anteriormente). Um coeficiente de proporcionalidade K_η é introduzido, o qual depende das propriedades locais do meio, sendo encontrado experimentalmente que a redução na intensidade de radiação devido à absorção é dada por,

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

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

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp \left[- \int_0^S \kappa_\eta(S^*) dS^* \right] \quad (3.11)$$

A Equação 3.11 também é conhecida por Lei de Bouguer.

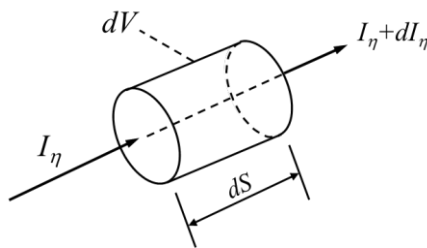


Figura 3.3- Intensidade incidente normalmente sobre um elemento de volume de espessura dS que absorve e espalha [Siegel 2002].

Uma definição alternativa considera *coeficiente de absorção por unidade de massa específica*,

$$\kappa_{\eta,m} = \frac{\kappa_{\eta}}{\rho} \quad (3.12)$$

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

$$\kappa_{\eta,p} = \frac{\kappa_{\eta}}{p} \quad (3.13)$$

na qual p é a pressão parcial do meio participante, e $\kappa_{\eta,p}$ é o coeficiente de absorção por unidade de pressão.

Se κ_{η} não é função da posição, como é a situação em um meio com propriedades uniformes, tal como em um gás bem misturado, então a Equação 3.11 fica,

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0) \exp(-\kappa_{\eta} S) \quad (3.14)$$

O coeficiente de absorção $\kappa_{\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_{\alpha})$ normalmente possui forte dependência espectral, sendo necessário o emprego de modelos matemáticos, dentre os quais pode-se citar o modelo linha por linha, o modelo do gás cinza e o modelo da soma ponderada de gases cinza, sendo este último adotado no presente trabalho e apresentado ainda neste capítulo.

3.2.2 Aumento da intensidade de radiação devido à emissão

Para o cálculo deste aumento, é desenvolvida uma metodologia a partir de uma cavidade esférica negra com volume elementar dV em sua parte central. Assume-se que dV está no centro de uma grande cavidade esférica com superfície negra de raio R e com temperatura uniforme T , de acordo com a Figura 3.4.

O espaço entre dV e a superfície da cavidade está preenchido com um meio não-participante (transparente). A intensidade espectral incidente sobre dA_s em dV , emitida pelo elemento dA sobre a superfície da cavidade é $I_{\eta}(S,0) = I_{\eta,CN}(\eta,T)$. A alteração desta

intensidade em dV como resultado de absorção é $-I_\eta(0)\kappa_\eta dS = -I_{\eta,CN}(\eta,T)\kappa_\eta dS$. A energia absorvida pelo volume diferencial $dSdA_s$ é $I_{\eta,CN}(\eta,T)\kappa_\eta dSdA_s d\eta d\omega$, onde $d\omega = dA/R^2$ e dA_s é a área projetada normal a $I_\eta(0)$. A energia emitida por dA e absorvida por todo volume dV é encontrada pela integração sobre dV (sobre todos os elementos $dSdA_s$), de forma a obter $I_{\eta,CN}(\eta,T)\kappa_\eta dVd\eta d\omega$. Para levar em conta toda a energia incidente sobre dV a partir de toda superfície da cavidade negra esférica, integra-se sobre todos os ângulos sólidos, obtendo-se $4\pi\kappa_\eta I_{\eta,CN}(\eta,T)dVd\eta$.

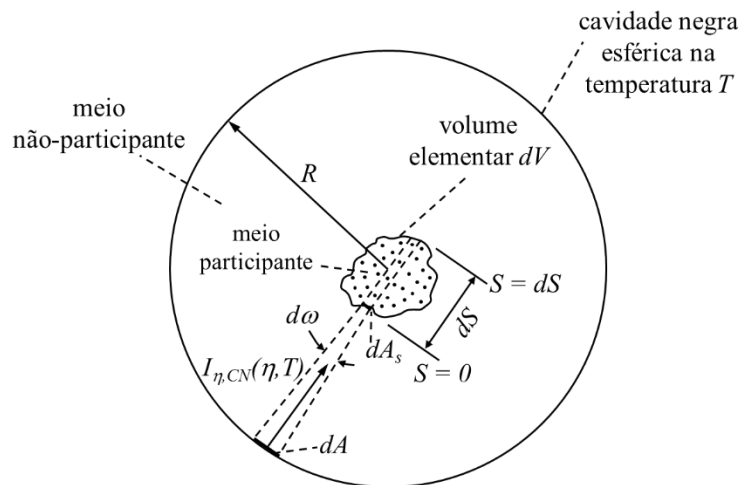


Figura 3.4- Geometria utilizada para dedução do aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante [Adaptado de Siegel 2002].

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

$$4\pi\kappa_\eta I_{\eta,CN}(\eta,T)dVd\eta = 4\kappa_\eta E_{\eta,CN}(\eta,T)dVd\eta \quad (3.15)$$

A Equação 3.15 é válida para volumes elementares dV suficientemente pequenos, de tal forma que toda energia emitida dentro de dV escape antes de ser reabsorvida no interior do volume.

Para todas as condições consideradas, a emissão é uniforme sobre todas as direções, assim a energia espectral emitida por um volume elemental em qualquer direção, $dI_{\eta e}$, é obtida dividindo a Equação 3.15 por $4\pi d\eta$ e pela área da seção transversal dA_s , obtendo-se,

$$dI_{\eta e}(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) = \kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) I_{\eta, CN}(\eta, T) dS \quad (3.16)$$

3.2.3 Equação de transferência radiativa - ETR

A ETR é obtida somando as parcelas de atenuação por absorção e de aumento por emissão:

$$\frac{dI_\eta}{dS} = -\kappa_\eta(S) I_\eta(S) + \kappa_\eta(S) I_{CN, \eta}(S) \quad (3.17)$$

A ETR apresentada na Equação 3.17, já desconsidera os efeitos do espalhamento, sendo esta a forma da ETR resolvida no presente estudo. De acordo com Modest, 1993, os efeitos do espalhamento podem ser desprezados desde que a fração volumétrica de fuligem seja inferior a $8,0 \times 10^{-3}$, sendo que chamas e camadas de fumaça possuem fração volumétrica de fuligem de no máximo $1,0 \times 10^{-4}$. Mazumder e Modest, 1999, e Brookes e Moss, 1999b, desprezaram os efeitos do espalhamento no cálculo da radiação em suas simulações de chamas de metano. Gupta et al., 2013, simularam a transferência radiativa em uma chama de metano e em chamas sintéticas com fração volumétrica de fuligem de até $4,0 \times 10^{-6}$ também desprezando os efeitos do espalhamento.

3.3 Modelagem do coeficiente de absorção dos gases

Para a solução da ETR é necessário o conhecimento do comportamento espectral do coeficiente de absorção. Uma forma de considerar tal comportamento é através do modelo linha-por-linha (LBL) no qual a ETR é resolvida em todos os números de onda em que o coeficiente de absorção é fornecido; outra forma é através da aplicação de modelos globais, tais como o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) e o modelo de gás cinza (GC).

No modelo LBL, a ETR é resolvida para todos os números de onda em que o coeficiente de absorção é fornecido, resultando elevada precisão, porém esses cálculos exigem muito esforço computacional, inviabilizando por hora a sua aplicação acoplada para solução da maioria dos problemas reais.

O modelo de gás cinza (GC) é o mais simples e também o mais antigo, nele o coeficiente de absorção é assumido independente do número de onda e as únicas variáveis são

a temperatura e a concentração, porém este modelo apresenta uma aproximação muito rudimentar, normalmente não sendo capaz de fornecer resultados precisos.

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

Dentre os modelos existentes, atualmente esse é o mais conhecido e amplamente usado em softwares comerciais, devido à exigência computacional compatível para aplicação a problemas práticos de engenharia e por apresentar resultados expressivamente melhores do que o modelo de gás cinza. Exemplos de aplicações do modelo WSGG em simulações de combustão, incluindo comparações com cálculos linha-por-linha que demonstram a sua boa precisão, podem ser encontrados em Centeno et al., 2015, 2016, 2018.

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

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

$$\varepsilon(pS) = \sum_{i=0}^{N_G} a_j(T) \left(1 - e^{-\kappa_j pS}\right) \quad (3.18)$$

onde κ_j é o coeficiente de absorção e a_j é o coeficiente de ponderação correspondentes ao j -ésimo gás cinza, e N_G é o número de gases cinza considerados. O coeficiente de ponderação a_j representa a fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza κ_j . Smith et al., 1982, propuseram que os coeficientes de ponderação a_j fossem representados por polinômios,

$$a_j(T) = \sum_{k=1}^K b_{j,k} T^{k-1} \quad (3.19)$$

onde j é o gás cinza ($j = 1, \dots, N_G$), e $K-I$ é o grau do polinômio.

O modelo WSGG com os coeficientes obtidos por Smith et al., 1982, tem sido utilizado em alguns trabalhos, porém recentemente foram ajustados novos coeficientes por Dorigon et al., 2013, Krishnamoorthy, 2010a, e por Johansson et al., 2011.

O presente trabalho utiliza os coeficientes do modelo WSGG obtidos por Dorigon et al., 2013, que realizou o ajuste da emitância total em relação àquelas calculadas a partir da integração linha-por-linha, usando para isso o banco de dados espectrais mais recente disponível (Rothman et al., 2010), obtendo assim os coeficientes mostrados na Tabela. 3.1. Observa-se que na Tabela. 3.1 o subscrito g refere-se aos gases, uma vez que posteriormente haverá um subscrito s referindo-se a fuligem. Ainda, o ajuste das emitâncias totais para obtenção dos coeficientes a_j e κ_j é feito com a restrição de que o somatório dos coeficientes a_j seja igual a um, ou seja, $\sum_{j=0}^{N_G} a_j = 1$. Deve-se ainda observar que os dados apresentados na Tabela. 3.1 foram ajustados para razão de pressões parciais $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, o qual é o valor tipicamente considerado para combustão de metano.

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

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

Com o modelo WSGG, a ETR, Equação 3.17, fica da seguinte forma:

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j(T) I_{CN}(T) \quad (3.20)$$

com j variando de 0 até 4 ($N_G = 4$, no caso do modelo de Dorigon et al., 2013). A Equação 3.20 deve ser resolvida com a condição de contorno [Modest, 1991],

$$I_{w,j} = a_j(T_w) I_{CN}(T_w) \quad (3.21)$$

na qual o subscrito w refere à parede (sendo as paredes da câmara de combustão

consideradas negras, a condição de contorno não apresenta a parcela de reflexão).

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

$$I = \sum_{j=0}^{N_G} I_j \quad (3.22)$$

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

3.4 Modelagem do coeficiente de absorção da fuligem

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

$$\kappa_{\eta,s} = \beta f_v \eta \quad (3.23)$$

onde f_v é a fração volumétrica de fuligem e β é uma constante do modelo, considerada neste trabalho igual a 4,1 [Cassol et al., 2014; Yagi e Iino, 1961; Centeno et al., 2016]. Siegel e Howell, 2002, apresentam diferentes valores de β conforme o combustível: 6,3 para óleo combustível, 4,9 para propano, 4,0 para acetileno, e 3,7 a 7,5 para carvão.

Para uma mistura de gases e fuligem, um gás cinza adicional com coeficiente de absorção nulo deve ser considerado, correspondendo às janelas transparentes de vapor de água e dióxido de carbono. Seu coeficiente de ponderação é calculado como $a_{g,0} = 1 - \sum_{j=1}^{N_G} a_{g,j}$.

O coeficiente de absorção da fuligem é obtido pelo produto do coeficiente do modelo $\kappa_{s,n,fv}$ presente na Tabela. 3.2 pela fração volumétrica de fuligem e pela constante β , e o coeficiente de ponderação da fuligem é obtido de maneira análoga à Equação 3.19, com $j = n$. Assim, o coeficiente de absorção para mistura de gases (CO_2 e H_2O) e fuligem é dado por,

$$\kappa_j = \kappa_{g,m} + \kappa_{s,n} \quad (3.24)$$

Os coeficientes de ponderação para a mistura são definidos como,

$$a_j = a_{m,n} = a_{g,m} a_{s,n} \quad (3.25)$$

onde a dimensão de j é $m \times n$ (a dimensão de j será então $(4+1)_{\text{gases}} \times (2)_{\text{fuligem}} = 10$, ou seja, serão resolvidas 10 ETRs como aquela mostrada na Equação 3.20. Deve-se observar ainda que o subíndice m acima representa o subíndice j da Tabela. 3.1, uma vez que com a inclusão da fuligem, agora o subíndice j é usado para descrever a mistura de gases e fuligem, mantendo a ETR, Equação 3.20, inalterada.

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

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

3.5 Modelagem das Interações Turbulência-Radiação

Mesmo quando analisadas de forma independente, turbulência e radiação são fenômenos físicos de alta complexidade, sendo necessário tratá-los de maneira relacionada, surgindo as chamadas interações turbulência-radiação (TRI – do inglês: *Turbulence-Radiation Interactions*).

Segundo Modest, 2005 as interações turbulência-radiação (TRI) consistem em um fenômeno que combina o elevado grau de complexidade de um escoamento turbulento, com a não linearidade da radiação térmica. Nos escoamentos com transferência de calor por convecção e radiação térmica, as flutuações causadas pelo fenômeno turbulento, resultam em alterações nos campos de velocidade, temperatura e concentração de espécies químicas, que por sua vez causam flutuações nos coeficientes de absorção e intensidade de radiação. Estas alterações modificam o campo radiante, que por sua vez alteram novamente o campo térmico e com isso, as propriedades termodinâmicas e de transporte do fluido, criando um acoplamento entre os mecanismos deste fenômeno.

Considerando a forma espectralmente integrada da ETR, e fazendo a média no tempo, resulta em:

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\bar{\kappa}I + \overline{\kappa I}_{CN} \quad (3.26)$$

De acordo com Coelho, 2007, a decomposição das variáveis (temperatura e concentrações das espécies) em componentes médias e flutuantes, seguida da realização de média no tempo revela diversos termos que requerem modelagem, pode-se citar: (i) Autocorrelação da temperatura, $\overline{T^4}$, ou valores médios relacionados que dependem somente da temperatura, tal como $\overline{I_{CN}}$ e $\overline{I_{\eta,CN}}$; (ii) Autocorrelação do coeficiente de absorção, $\overline{\kappa}$, ou correlações similares que dependem somente das propriedades radiativas do meio, como $\overline{\kappa_j a_j}$; (iii) Correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura, $\overline{\kappa T^4}$, ou correlações análogas, por ex., $\overline{\kappa_j a_j I_{CN}}$; (iv) Correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação, $\overline{\kappa I}$, ou correlações análogas, por ex., $\overline{\kappa_j I_j}$.

A correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação, ou seja, o primeiro termo do lado direito da Equação 3.26, é expresso como:

$$\overline{\kappa I} = \overline{\kappa} \overline{I} + \overline{\kappa I'} \quad (3.27)$$

Segundo Kabashnikov e Kmit, 1979, o segundo termo do lado direito da Equação 3.27 pode ser desprezado. A aproximação de Kabashnikov e Kmit, 1979, denominada aproximação da flutuação opticamente fina (OTFA – do inglês: *Optically Thin Fluctuation Approximation*) se baseia na hipótese que as flutuações do coeficiente de absorção não são correlacionadas com as flutuações da intensidade de radiação, ou seja, $\overline{\kappa I'} \approx 0$, se o livre caminho médio da radiação é muito maior do que a escala integral do escoamento turbulento.

Na literatura técnica muitos autores empregam a aproximação OTFA para tratar as interações TRI [Hall e Vranos, 1994; Krebs et al., 1994; Krebs et al., 1996; Coelho, 2002; Li e Modest, 2002a e 2002b; Snegirev, 2004; Coelho, 2004; Habibi et al., 2007a e 2007b; Wang et al., 2008; Poitou et al., 2012]. Conforme Coelho, 2007, a hipótese OTFA geralmente não é válida para todo o espectro, particularmente no centro de linhas espectrais fortes. Porém, as zonas espectrais onde esta aproximação não se aplica não influenciam significativamente a intensidade de radiação total, sendo então justificável na maioria das aplicações de engenharia, com a possível exceção de chamas com alta concentração de fuligem (o que não é o caso da chama de metano estudada no presente trabalho).

De acordo com esta aproximação, a Equação 3.26 fica da seguinte forma:

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\bar{\kappa}\bar{I} + \overline{\kappa I_{CN}} \quad (3.28)$$

No segundo termo do lado direito da Equação 3.28, o qual é proporcional a $\overline{\kappa T^4}$, valores instantâneos de κ e T se correlacionam em um escoamento turbulento.

Neste trabalho é utilizado uma aproximação para este termo conforme descrito em Snegirev, 2004, a qual considera a correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação de temperatura. Estas duas correlações das interações TRI foram encontradas como sendo as mais importantes em escoamentos reativos [Li e Modest, 2002a e 2002b; Habibi et al., 2007a e 2007b; Poitou et al., 2012; Gupta et al., 2013]. A decomposição da temperatura e do coeficiente de absorção em componentes médio e flutuante, $T = \bar{T} + T'$, $\kappa = \bar{\kappa} + \kappa'$, seguido da realização de média no tempo leva a:

$$\overline{\kappa T^4} = \overline{(\bar{\kappa} + \kappa')(\bar{T} + T')^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + \underbrace{6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + 4 \frac{\overline{T'^3}}{\bar{T}^3} + \frac{\overline{T'^4}}{\bar{T}^4}}_{\text{autocorrelação da temperatura}} + \underbrace{4 \frac{\overline{\kappa' T'}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} + 6 \frac{\overline{\kappa' T'^2}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}^2} + 4 \frac{\overline{\kappa' T'^3}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}^3} + \frac{\overline{\kappa' T'^4}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4}}_{\text{correlação coeficiente de absorção-temperatura}} \right) \quad (3.29)$$

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

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + 6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + 4 \frac{\overline{\kappa' T'}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} \right) \quad (3.29)$$

Os termos $\overline{T'^2}$ e $\overline{\kappa' T'}$ devem ser modelados expressando-os como funções dos parâmetros médios do escoamento. As flutuações das concentrações das espécies possuem um papel secundário sobre as interações TRI [Habibi et al., 2007b; Coelho et al., 2003]. Assim, desprezando as flutuações das concentrações das espécies para calcular $\overline{\kappa' T'}$ na Equação 3.30, Snegirev, 2004, substituiu a dependência $\kappa(T) = \kappa(\bar{T} + T')$ por uma série de Taylor:

$$\kappa \approx \kappa(\bar{T}) + T' \left. \frac{\partial \kappa}{\partial T} \right|_{\bar{T}} + \frac{T'^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \right|_{\bar{T}} + \dots \quad (3.30)$$

Usando a Equação 3.31, obtém-se o valor médio, $\bar{\kappa}$, e a componente flutuante,

$\kappa' = \kappa - \bar{\kappa}$. A média do produto, $\overline{\kappa'T'}$, é então derivada como segue:

$$\overline{\kappa'T'} \approx \overline{T'^2} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} + \frac{\overline{T'^3}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}} + \dots \approx \overline{T'^2} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \quad (3.31)$$

Desprezando termos de ordens superiores, a Equação 3.30 pode ser escrita como [Snegirev, 2004]:

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \cdot \bar{T}^4 \left(1 + C_{TRI1} 6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + C_{TRI2} 4 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{\kappa} \cdot \bar{T}} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \right) \quad (3.32)$$

A Equação 3.33 é usada como uma estimativa aproximada para $\overline{\kappa T^4}$ permitindo flutuações turbulentas de temperatura. As constantes do modelo, C_{TRI1} e C_{TRI2} são consideradas valendo 2,5 e 1,0, respectivamente, sendo que o valor da constante C_{TRI1} foi obtido a partir de ajustes na relação experimental entre $\overline{T^4}/\bar{T}^4$ e $\overline{T'^2}/\bar{T}^2$ apresentada por Burns, 1999, permitindo assim a consideração da autocorrelação de temperatura nesta formulação.

O último termo da Equação 3.33, o qual possui a derivada do coeficiente de absorção em relação à temperatura, é calculado no presente trabalho com $\kappa_j a_j(T)$, no modelo WSGG, com a dependência de $a_j(T)$ dada pela Equação 3.19.

Para avaliar $\overline{T'^2}$, necessário para resolver a Equação 3.33, a equação de transporte para a variância da flutuação da temperatura é resolvida:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \bar{u} \overline{T'^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho \bar{v} \overline{T'^2} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k} \end{aligned} \quad (3.33)$$

onde $C_T = 2,0$ é a constante do modelo. A Equação 3.34 deve ser resolvida juntamente com o conjunto de equações apresentadas no Capítulo 2. Ainda, em Snegirev, 2004, a variância da flutuação da temperatura é considerada nula nas fronteiras (condição de contorno).

4 MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

Neste capítulo serão apresentados os métodos numéricos necessários para resolver o conjunto de equações referentes ao processo de combustão turbulenta incluindo transferência de calor por radiação.

O método de volumes finitos é aplicado para integrar as equações fundamentais do problema, sendo elas, as equações de conservação de massa, de energia, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, e de espécies químicas, Equações 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7, 2.12, e 2.23, respectivamente, assim como a Equação 2.17 para fração mássica de fuligem, e ainda a equação de transporte para a variância da flutuação de temperatura, Equação 3.34. Também é apresentada neste capítulo a abordagem numérica utilizada na solução da equação de transferência radiativa Equação 3.17, necessária para a determinação do termo fonte radiativo ($\overline{S_{rad}}$) presente na equação da conservação de energia.

4.1 Método de volumes finitos

É recomendado escrever as equações que descrevem o processo de combustão de uma forma genérica, para uma variável genérica ϕ , em regime permanente e em coordenadas cilíndricas axissimétricas,

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

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

A Figura. 4.1 mostra de forma esquemática um volume de controle genérico e seus vizinhos para a situação bidimensional, em coordenadas cilíndricas axissimétricas.

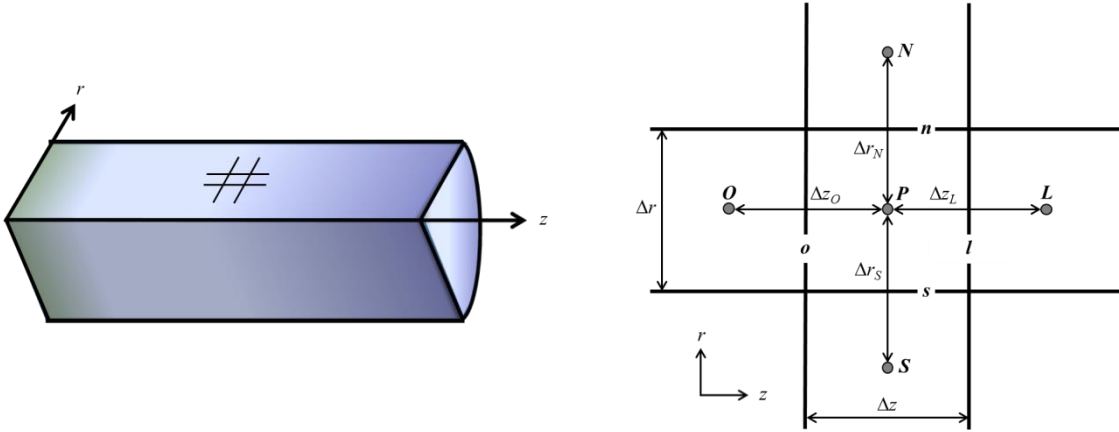


Figura 4.1 - Volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional [Centeno, 2014].

O fluxo total médio da variável genérica é dado como:

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

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

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

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

Portanto, a Equação 4.1 pode ser reescrita como,

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

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

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

Tabela 4.1- Identificação da variável genérica, ϕ , coeficiente difusivo, Γ_ϕ , e termos fontes $\overline{S^\phi}$, das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta [Centeno, 2014].

Eq.	ϕ	Γ_ϕ	$\overline{S^\phi}$
(2.2)	1	0	0
(2.3)	\bar{u}	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)$
(2.4)	\bar{v}	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r^2}$
(2.5)	$r \bar{w}$	$(\mu + \mu_t)$	$-2 \frac{(\mu + \mu_t)}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w})$
(2.24)	\bar{h}	$\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$	$\overline{s_{rad}} + \sum_{\alpha} \left[\bar{h}_{\alpha}^0 + \int_{\bar{T}_{ref}}^{\bar{T}} c_{p,\alpha} dT \right] \overline{R_{\alpha}}$
(2.6)	k	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right)$	$\left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] - \bar{\rho} \varepsilon$
(2.7)	ε	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}} \right)$	$C_{1,\varepsilon} \left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] \frac{\varepsilon}{k} - C_{2,\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k}$
(2.13) $\square = \text{CH}_4$	$\overline{y_{CH_4}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{CH_4}}$
(2.13) $\square = \text{O}_2$	$\overline{y_{O_2}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{O_2}}$
(2.13) $\square = \text{CO}_2$	$\overline{y_{CO_2}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{CO_2}}$
(2.13) $\square = \text{CO}$	$\overline{y_{CO}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{CO}}$
(2.13) $\square = \text{H}_2\text{O}$	$\overline{y_{H_2O}}$	$\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right)$	$\overline{R_{H_2O}}$
(2.18)	$\overline{y_s}$	(μ_t / Sc_t)	$\overline{R_s}$
(3.34)	$\overline{T'^2}$	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right)$	$2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k}$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

O problema de acoplamento pressão-velocidade é resolvido adotando uma estratégia de solução iterativa denominada algoritmo SIMPLE (do inglês: *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*), apresentado originalmente em Patankar e Spalding, 1972, sendo que o algoritmo SIMPLE também já encontrava-se implementado no algoritmo de propósitos gerais de Patankar.

No algoritmo SIMPLE, os fluxos convectivos de massa por unidade de área nas faces dos volumes de controle, F , são avaliados a partir de estimativas para os componentes da velocidade. Além disso, um campo de pressão estimado é usado para resolver as equações da conservação de quantidade de movimento, e uma equação de correção de pressão, deduzida da equação da continuidade, é resolvida para obter um campo de correção de pressão o qual é então utilizado para atualizar os campos de velocidade e de pressão. Conforme o algoritmo avança, objetiva-se melhorar progressivamente estes campos estimados. O processo iterativo continua até a convergência dos campos de velocidade e de pressão.

Depois de realizada a discretização das equações fundamentais dos processos de combustão turbulenta, se faz necessário resolver um sistema de equações algébricas. A complexidade e o tamanho do conjunto de equações dependem das dimensões do problema, do número de volumes usados na malha e dos métodos utilizados para descrever os termos advectivos e o acoplamento pressão-velocidade.

O algoritmo de TDMA, também disponível no algoritmo de propósitos gerais de Patankar, foi utilizado para solução do sistema resultante de equações algébricas lineares fazendo ainda o uso da técnica da correção em bloco (com exceção para a energia cinética turbulenta e sua dissipação), a qual contribui para a entrada das informações das condições de contorno para o interior do domínio [Patankar, 1980]. Sendo um método iterativo, em seu

algoritmo é possível alterar as direções de varredura de modo que as informações das condições de contorno sejam incorporadas aos cálculos de maneira mais eficiente. Por exemplo, no caso bidimensional esta técnica é implementada através de quatro varreduras alternadas: norte-sul, sul-norte, leste-oeste, oeste-leste. Maiores detalhes sobre o algoritmo TDMA podem ser encontrados em Maliska, 2003, Versteeg e Malalasekera, 2007, e em Patankar, 1980.

4.2 Método de ordenadas discretas

O método de ordenadas discretas é utilizado para a solução da ETR na presente pesquisa. Ele faz uma representação discreta da dependência direcional da intensidade radiativa, ou seja, a solução para o problema de transporte radiativo é encontrada resolvendo a ETR para um conjunto de direções discretas cobrindo toda a faixa do ângulo de 4π sr.

O efeito da transferência de calor radiativa aparece na equação da conservação de energia, Equação 2.23, como o negativo do divergente do fluxo de calor radiativo,

$$\overline{S_{rad}} = -\nabla \cdot \vec{q}_{rad} = \int \int_{\omega \eta} (\kappa_{\eta} I_{\eta} - \kappa_{\eta} I_{CN\eta}) d\eta d\omega \quad (4.13)$$

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

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = \kappa_{\eta}(S)I_{CN\eta}(S) - (\kappa_{\eta}(S) + \sigma_{s\eta}(S))I_{\eta}(S, \vec{s}) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\eta}(S, \vec{s}') \Phi_{\eta}(S, \vec{s}, \vec{s}') d\omega' \quad (4.14)$$

sujeita a seguinte condição de contorno,

$$I_{\eta}(S_w, \vec{s}) = \varepsilon_w I_{CN,\eta}(S_w) + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\vec{n} \cdot \vec{s}' < 0} I_{\eta}(S_w, \vec{s}') |\vec{n} \cdot \vec{s}'| d\omega' \quad (4.15)$$

considerando uma superfície difusa e cinza. Nas Equações 4.14 e 4.15, ε_w representa a emissividade da parede, S a posição, \vec{n} é um vetor na direção normal à parede, \vec{s} é a direção

correspondente ao ângulo sólido $d\omega$, \vec{s}' é a direção correspondente ao ângulo sólido $d\omega'$.

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

Assim, no DOM a Eq. (4.14) é resolvida para um conjunto de M diferentes direções \vec{s}_m , $m = 1, 2, \dots, M$, e as integrais sobre a direção são substituídas por quadraturas numéricas, ou seja,

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m f(\vec{s}_m) \quad (4.16)$$

onde w_m são os pesos das quadraturas associados com as direções \vec{s}_m . Assim, a Equação 4.14 é aproximada por um conjunto de M equações,

$$\frac{dI_\eta(S, \vec{s}_m)}{dS} = \kappa_\eta(S) I_{CN\eta}(S) - (\kappa_\eta(S) + \sigma_{s\eta}(S)) I_\eta(S, \vec{s}_m) + \frac{\sigma_{s\eta}(S)}{4\pi} \sum_{m'=1}^M w_{m'} I_\eta(S, \vec{s}_{m'}) \Phi_\eta(S, \vec{s}_m, \vec{s}_{m'}) \quad (4.17)$$

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

$$I_\eta(S_w, \vec{s}_m) = \varepsilon_w I_{CN\eta}(S_w) + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_{m'} < 0} w_{m'} I_\eta(S_w, \vec{s}_{m'}) |\vec{n} \cdot \vec{s}_{m'}|; \quad \vec{n} \cdot \vec{s}_m > 0 \quad (4.18)$$

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

$$\vec{q}_{rad\eta}(S) = \int_{4\pi} I_\eta(S, \vec{s}) \vec{s} d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \vec{s}_m \quad (4.19)$$

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

$$\nabla \cdot \vec{q}_{rad\eta} = \kappa_\eta \left(4\pi I_{CN\eta} - \int_{4\pi} I_\eta d\omega \right) = \kappa_\eta \left(4\pi I_{CN\eta} - \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \right) \quad (4.20)$$

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

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(rI_{m\eta})}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_{m\eta}}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\zeta_m I_{m\eta})}{\partial \varphi} = \kappa_\eta I_{CN\eta} - K_\eta I_{m\eta} + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \sum_{m'} w_{m'} \Phi_{m'm,\eta} I_{m'\eta} \quad (4.21)$$

em base espectral, ou, alternativamente como,

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(rI_m)}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_m}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\zeta_m I_m)}{\partial \varphi} = \kappa I_{CN} - K I_m + \frac{\sigma_s}{4\pi} \sum_{m'} w_{m'} \Phi_{m'm} I_{m'} \quad (4.22)$$

desprezando a dependência espectral. Os valores de m e m' representam as direções de saída e de chegada, respectivamente, μ_m , ξ_m , ζ_m são os cossenos diretores de uma direção ordenada, e φ é o ângulo de revolução ao redor do eixo z . Os valores dos cossenos diretores para a aproximação S_6 para geometria bidimensional estão mostrados na Tabela. 4.2, sendo o fator peso $w_m = 0,5236$ usado para todas as direções.

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

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

Conforme mostrado na Figura. 4.2, os cossenos diretores de uma direção discreta \vec{s}_m , são μ_m, ξ_m, ζ_m , e satisfazem a identidade $\mu_m^2 + \xi_m^2 + \zeta_m^2 = 1$. A direção \vec{s}_m pode ser imaginada como um ponto sobre a superfície de uma esfera unitária com a qual uma área superficial, w_m , está associada. Os w_m representam pesos das quadraturas angulares e satisfazem o requisito de que o seu somatório para todas as direções discretas equivale à área superficial da esfera unitária. Um total de M direções são escolhidas e as áreas angulares são medidas em unidades de 4π , tal que $\sum_{m=1}^M w_m = 1$. Na Figura. 4.2 estão também mostrados os ângulos ϕ e ψ , os quais são usados para localizar o vetor direcional unitário \vec{s}_m .

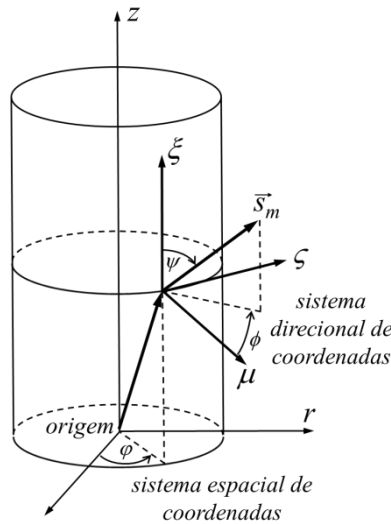


Figura 4.2- Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica
[Adaptado de Menart, 2000].

Integrando a Equação 4.22 sobre um volume de controle arbitrário, conforme mostrado na Figura. 4.3, fornece:

$$\begin{aligned} \mu_m (A_n I_{mn} - A_s I_{ms}) + \xi_m (A_l I_{ml} - A_o I_{mo}) - (A_n - A_s) \frac{1}{w_m} (\alpha_{m+1/2} I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1/2,p}) = \\ \dots \kappa I_{CNp} \Delta V - K I_{m,p} \Delta V + \frac{\sigma_S \Delta V}{4\pi} \sum_{m'} \Phi_{m'm} w_{m'} I_{m'p} \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde A_n, A_s, A_l e A_o são as áreas correspondentes dos lados do volume de controle para as

faces norte, sul, leste e oeste, respectivamente, ΔV é o volume do elemento de controle, e p é o ponto de interesse para o qual calcula-se a intensidade I_{mp} . Os termos I_{mn} , I_{ms} , I_{ml} e I_{mo} são as intensidades para a direção individual m para os volumes norte, sul, leste e oeste, respectivamente (Figura. 4.3). O termo $I_{m-1/2,p}$ é a intensidade no ponto de interesse na direção angular $m-1/2$, onde a direção $m \pm 1/2$ define os limites da faixa angular da quadratura numérica w_m . O termo $(\alpha_{m+1/2}I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2}I_{m-1/2,p})$ na Equação 4.23 aparece em consequência da técnica de diferenciação de Carlson e Lathrop, 1968, para o termo com derivada angular, $\partial/\partial\varphi$, na Equação 4.22, e representa o fluxo de energia para fora e para dentro da faixa angular, onde o termo α é dado por,

$$\alpha_{m+1/2} = \alpha_{m-1/2} - w_m \mu_m \quad (4.24)$$

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

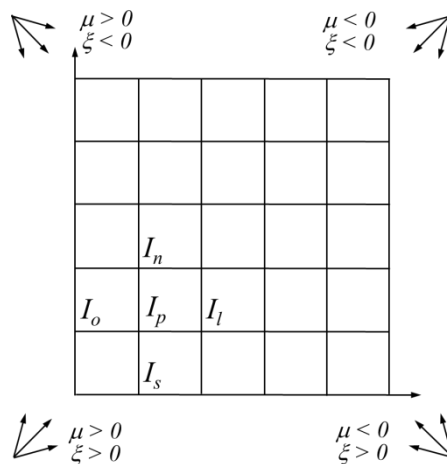


Figura 4.3- Volume de controle e cossenos diretores para os cálculos DOM [Adaptado de Centeno, 2014].

Para resolver a Equação 4.23 para I_{mp} , relações de interpolação são usadas para expressar valores de intensidade em pontos desconhecidos por valores de intensidade em pontos conhecidos. Por exemplo, para uma direção m que possua cossenos diretores positivos ($\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$), eliminam-se as intensidades nos pontos desconhecidos I_{mn} , I_{ml} e $I_{m+1/2,p}$

expressando-as em termos de intensidades em pontos conhecidos I_{ms} , I_{mo} e $I_{m-1/2,p}$, usando

$$\begin{aligned} I_{mp} &= \zeta I_{mn} + (1 - \zeta) I_{ms} \\ I_{mp} &= \zeta I_{ml} + (1 - \zeta) I_{mo} \\ I_{mp} &= \zeta I_{m+1/2,p} + (1 - \zeta) I_{m-1/2,p} \end{aligned} \quad (4.25)$$

onde ζ é um fator de interpolação (considera-se $\zeta = 0,5$ no presente trabalho). Substituindo a Equação 4.25 na Equação 4.23 e rearranjando os termos, obtém-se uma expressão para I_{mp} em termos de variáveis conhecidas (para $\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$),

$$I_{mp} = \frac{(\mu_m A_r I_{ms} + \xi_m A_z I_{mo} - [(A_n - A_s)/w_m] A_\alpha I_{m-1/2,p} + \zeta S \Delta V)}{(\mu_m A_n + \xi_m A_l - [(A_n - A_s)/w_m] \alpha_{m+1/2} + K \zeta \Delta V)} \quad (4.26)$$

onde

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

Uma vez que I_{mp} estiver calculado a partir da Equação 4.26, as demais intensidades vizinhas ainda desconhecidas, I_{mn} , I_{ml} e $I_{p,m+1/2}$ são encontradas com as relações de interpolação, Equação 4.25. Estas intensidades são então usadas como dados de entrada para o cálculo da intensidade para a próxima célula na direção correspondente, e a solução prossegue sucessivamente através da malha inteira para esta direção.

Na aproximação S_6 , são calculadas para cada uma das vinte e quatro direções consideradas as intensidades de todos os pontos do domínio computacional. A forma detalhada deste método, utilizada neste trabalho pode ser encontrada em Centeno, 2014.

4.3 Detalhes da metodologia de solução

O problema de escoamento reativo no interior da câmara de combustão cilíndrica é

resolvido a partir do algoritmo de propósito gerais de Patankar, modificado por Silva, 2005, e por Centeno, 2014. Em Silva, 2005, a modificação do algoritmo original focou nas sub-rotinas de determinação da geometria, malha, condições de contorno e propriedades termofísicas, além da adição dos termos fonte das equações de conservação, objetivando a solução da combustão turbulenta na câmara. Em Centeno, 2014, o objetivo foi o acoplamento do método de ordenadas e do modelo WSGG para a solução da radiação na câmara de combustão, incluindo ainda a modelagem das interações TRI.

A cada iteração executada pelo programa, todas as equações (fundamentais, Capítulo. 2, e de radiação, Capítulo. 3) são resolvidas de forma acoplada. São empregadas sub-relaxações, sendo que os valores dos fatores de sub-relaxação usados na solução das equações de energia, de espécies químicas, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de dissipação da energia cinética turbulenta, assim como para a correção da pressão, para a massa específica, para o termo fonte de reação química e para a viscosidade turbulenta, foram de 0,1, enquanto que para o termo fonte de calor radiativo foi utilizado um fator de sub-relaxação de 0,01. Os termos fontes destas equações de conservação foram, quando necessário, discretizados em diferenças finitas e implementados segundo a técnica de linearização apresentada por Patankar, 1980.

Uma vez que a equação da conservação de energia, Equação 2.23, é dada em função da entalpia total, para a determinação da temperatura utiliza-se a entalpia da mistura, Equação 2.24, e o calor específico da mistura, Equação 2.25, juntamente com as correlações de $C_{p\alpha}$ obtidas em Turns, 2000. Sendo assim, com a magnitude da entalpia na iteração atual e o calor específico da mistura na iteração anterior, obtém-se a temperatura em cada volume de controle.

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

5 APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA ESTUDADO

No presente capítulo é apresentado o problema físico no qual serão investigados os efeitos do emprego de promotores de turbulência nas entradas de ar e de combustível (metano) sobre o comportamento térmico de uma câmara de combustão. Desta forma, apresentam-se a geometria do domínio, as condições de contorno, e as propriedades termofísicas das espécies químicas envolvidas.

5.1 O problema abordado

Para a abordagem do problema será utilizada a câmara de combustão analisada por Magel et al., 1996a, 1996b, Nieckele et al., 2001, Silva et al., 2007, Centeno, 2014. Esta câmara de combustão foi usada como caso de teste no *First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, organizado pela ERCOFTAC (*European Research Community on Flow Turbulence and Combustion*), em 1994 [Garréton e Simonin, 1994], para a qual foram apresentados dados experimentais de temperatura e concentração de espécies químicas para várias posições no interior da câmara.

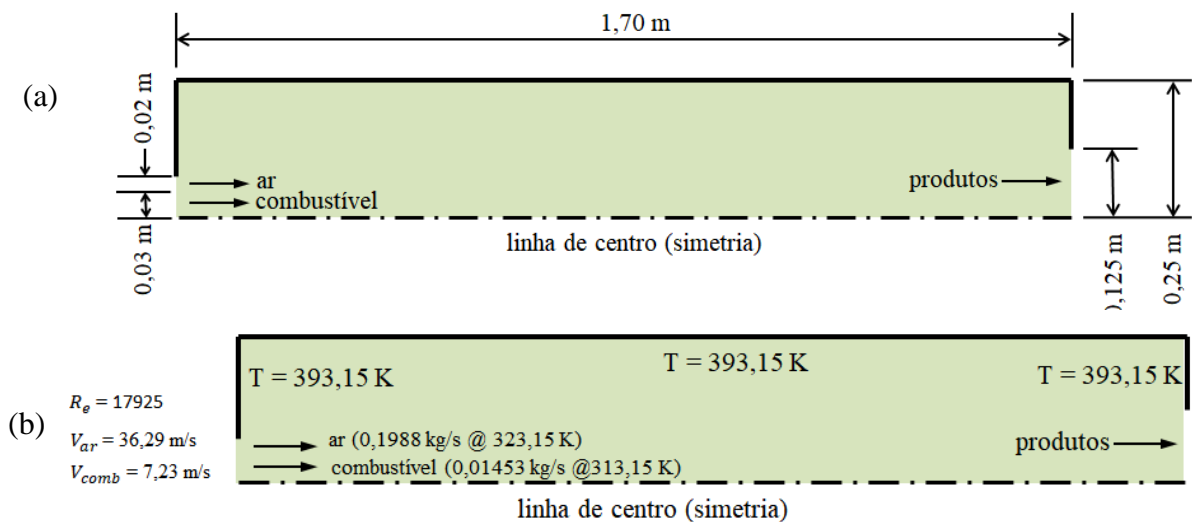


Figura 5.1- Representação esquemática da câmara de combustão. (a) Geometria (b) Condições de Contorno

Na linha central existe um bico injetor pelo qual a câmara de combustão é abastecida com gás natural. Considera-se que a composição mássica do ar de entrada seja de 23% de oxigênio (O_2), 76% de nitrogênio (N_2) e 1% de vapor de água (H_2O). Assume-se o gás natural como sendo composto de 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio, conforme sugerido por

Garréton e Simonin, 1994. Utilizou-se um excesso de combustível de 5%, resultando em uma vazão mássica de combustível de $0,01453 \text{ kg s}^{-1}$ com temperatura de 313,15 K, e em uma vazão mássica de ar de $0,1988 \text{ kg s}^{-1}$ com temperatura de 323,15 K.

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

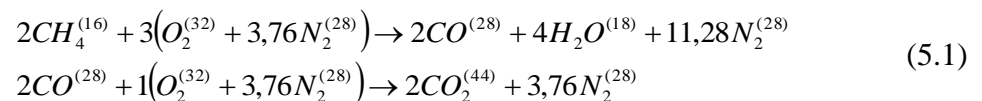
O número de Reynolds médio entre as correntes de ar e de combustível na região de entrada da câmara vale 17925, caracterizando escoamento turbulento. Também se assume que o processo de combustão ocorra em regime permanente.

O domínio de cálculo é assumido como sendo apenas uma fração angular representativa da câmara (1 rad), em função da axissimetria do problema. A modelagem da turbulência tem sido realizada utilizando a geometria cilíndrica axissimétrica nas mais diversas áreas de pesquisa, incluindo trabalhos que estudam combustão turbulenta [e.g. Saqr et al., 2010; Silva et al., 2007; Li e Modest, 2002^a; Li e Modest, 2002^b; Nieckele et al., 2001; Pember et al., 1996; Magel et al., 1996^a; Magel et al., 1996^b].

Tanto o ventilador quanto os demais componentes externos à câmara de combustão não fazem parte do domínio de cálculo, mas são considerados indiretamente na solução, já que fornecem as condições de entrada na câmara. A potência do queimador utilizado é de 600 kW.

As forças de empuxo são desprezadas uma vez que se considera que o escoamento seja governado principalmente pelas forças de inércia, em virtude das altas velocidades impostas pelo queimador.

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



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

Define-se o problema como: calcular a distribuição de temperatura e de concentrações de espécies, assim como a obtenção de campos de radiação térmica no interior da câmara e sua influência sobre as demais propriedades do processo térmico, partindo de códigos já

utilizados anteriormente [Silva, 2005; Centeno, 2014]. Os cálculos serão realizados considerando diferentes promotores de turbulência nas correntes de entrada de ar e de combustível, com o objetivo de verificar a influência de variações nas condições turbulentas de entrada sobre o comportamento térmico da câmara de combustão, em especial os aspectos relativos à transferência de calor radiativa.

5.2 Condições de contorno

Nas paredes da câmara de combustão, conforme indicado por Garréton e Simonin, 1994, a temperatura é prescrita constante e igual a 393,15 K. Condições de não-deslizamento e impermeabilidade são adotadas, sendo a viscosidade nestas regiões determinada através de funções de parede acopladas ao modelo de turbulência $k - \varepsilon$.

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

A energia cinética turbulenta na entrada é dada como,

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

onde IT é a intensidade de turbulência (prescrita em 6% para a corrente de ar e em 10% para a de combustível – estes valores de IT serão modificados em virtude da consideração de diferentes promotores de turbulência no presente trabalho, porém os valores originais – 6% e 10% – são empregados nas etapas de verificação e validação do código) e \bar{u}_{ent} é a velocidade axial média na entrada. Para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta especificou-se,

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

onde l é o comprimento característico da escala de turbulência (prescrito como 0,04 m para a corrente de ar e como 0,03 m para a de combustível). Estes valores foram obtidos de Niecele et al., 2001, Silva et al., 2007 e Garréton e Simonin, 1994.

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

prescreve-se sua dissipação como,

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

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

Na saída da câmara de combustão as distribuições de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, as distribuições de temperatura e de concentrações de espécies, assim como a componente radial da velocidade são assumidas como localmente parabólicas.

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

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

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

5.3 Propriedades termofísicas

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

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

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

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

Considerou-se que todas as propriedades termofísicas presentes no problema sejam mantidas constantes para cada substância, com exceção do calor específico da mistura de gases (CH₄, O₂, H₂O, CO₂, CO e N₂) usado para pós-processamento da temperatura. O calor específico a pressão constante de cada espécie foi determinado utilizando as correlações apresentadas em Turns, 2000, sendo que o calor específico da mistura foi obtido a partir de uma média ponderada pelas frações mássicas das espécies, conforme a Equação 2.24.

Os parâmetros utilizados para determinação das taxas de reação pelo modelo de Arrhenius estão apresentados na Tabela. 5.2.

Tabela 5.2 - Parâmetros de cada reação para cálculo da taxa pelo modelo de Arrhenius [Turns, 2000; Nieckele et al., 2001; Silva, 2005; Silva et al., 2007, Centeno, 2014].

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

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

6 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO

Neste capítulo são apresentados os estudos de convergência de malha, de balanço de energia na câmara, e a análise de resultados obtidos com a presente modelagem em comparação com resultados experimentais da literatura.

6.1 Estudo de convergência de malha

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

A definição da malha foi realizada utilizando cálculos acoplados entre escoamentos, combustão e radiação. O estudo levou em consideração duas malhas distintas, 48×140 (malha 1) e 12×35 (malha 2), analisando os valores de fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO_2 e H_2O para cada uma das malhas. Empregou-se a metodologia de análise de convergência de malha proposta inicialmente por Roache, 1994, e atualizada em Celik et al., 2008, denominada como GCI (índice de convergência de malha, do inglês: *Grid Convergence Index*).

Realiza-se este estudo com a comparação de duas malhas, sendo a malha identificada como “1” a mais refinada e “2” a malha mais grosseira. Esta nomenclatura para identificação das malhas está apresentada na Tabela. 6.1, assim como os valores obtidos para cada variável adotada no estudo de malha.

Tabela 6.1 - Fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO_2 e H_2O para diferentes malhas.

	Malha	f_{rad} [%]	T_{max} [K]	$x_{\text{CO}_2,max}$	$x_{\text{H}_2\text{O},max}$
1	48×140	23,81	1650,3	0,0925	0,1993
2	12×35	23,02	1647,4	0,1106	0,1988

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

O GCI da malha mais refinada é definido como:

$$GCI_{12} = \frac{F_s |\varepsilon_{12}|}{(r^p - 1)} \quad (6.1)$$

onde F_s é um fator de segurança (recomenda-se que o fator de segurança seja $F_s = 3,0$ para comparações de duas malhas), r é o fator de refinamento de malha ($r = 4$ no presente trabalho), e p é a ordem de convergência ($p = 1$ no presente trabalho) [Roache, 1994]. O erro relativo ε_{12} é definido como:

$$\varepsilon_{12} = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (6.2)$$

sendo f_1 a solução obtida da malha mais refinada, e f_2 a solução da outra malha. Chegou-se nos índices de convergência de malha apresentados na Tabela.6.2.

Tabela 6.2 – Índice de convergência de malha para as variáveis: fração radiativa, temperatura máxima e frações molares máximas de CO₂ e H₂O.

	f_{rad}	T_{max}	$x_{H_2O,max}$
GCI ₁₂ [%]	3,4	0,18	0,25

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



Figura 6.1- Malha com 48×140 volumes utilizada nos cálculos [Adaptada de Centeno, 2014].

Considerando que as simulações foram realizadas em um computador *desktop* com processador Intel Core i5, 2,2GHz e 8GB de memória instalada, os custos computacionais. Para a malha adotada no presente estudo, malha 1, são necessárias aproximadamente 70000 iterações para obter a solução convergida, resultando então em um tempo total de aproximadamente 83 horas, o qual é aceitável para os propósitos do presente estudo.

6.2 Balanço de energia no domínio

O cálculo do balanço de energia na câmara de combustão foi realizado para verificação do código utilizado na pesquisa. Os cálculos foram realizados considerando os efeitos da transferência de calor por radiação na câmara, sendo os resultados apresentados na Tabela 6.3.

Tabela 6.3– Análise do balanço de energia na câmara de combustão

Entrada [kW]		Saída [kW]	
E1. Combustível	8,9	S1. Comb. não queimado	14,2
E2. Ar	65,0	S2. Gases de exaustão	430,4
E3. Ent de combustão	600,3	S3. Paredes	200,0
Total	674,29	Total	644,6

onde:

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

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

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

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

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

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

A diferença entre a quantidade de energia que entra na câmara e a que sai, é de aproximadamente 4%, sendo esta diferença considerada aceitável e resultante, por exemplo, do critério de convergência considerado, das aproximações numéricas impostas, e do cálculo da transferência de calor pelas paredes. O balanço global de massa na câmara ficou com diferença relativa da ordem de 10^{-7} entre as vazões mássicas que entram (ar e combustível) e as que saem da câmara (combustível residual e produtos).

6.3 Comparação com dados experimentais da literatura

Considerando como base os resultados obtidos por Garréton e Simonin, 1994, pretende-se nesta seção do trabalho comparar tais resultados com os obtidos através de uma simulação daquela chama turbulenta. As Figuras 6.2 a 6.6 apresentam os perfis de temperatura e de frações mássicas de CH₄, CO₂, O₂ e CO ao longo da linha de centro da câmara de combustão obtidos no presente trabalho e os resultados experimentais de Garréton e Simonin, 1994.

Observam-se nestas figuras que os resultados das simulações estão semelhantes dos resultados experimentais, considerando-se então que o código numérico pode ser utilizado nas simulações seguintes.

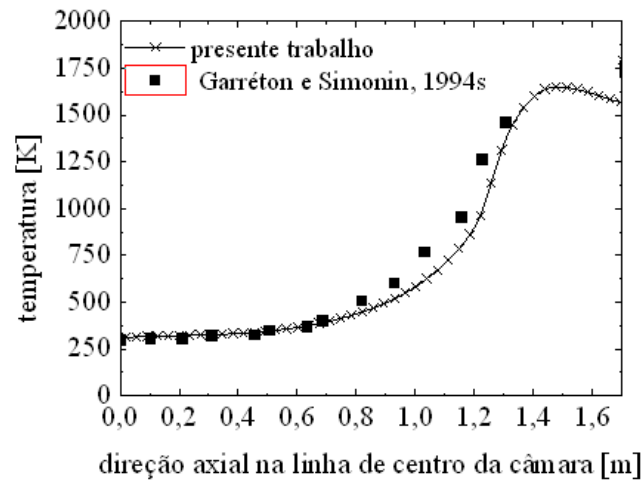


Figura 6.2- Perfis de temperatura na linha de centro da câmara de combustão.

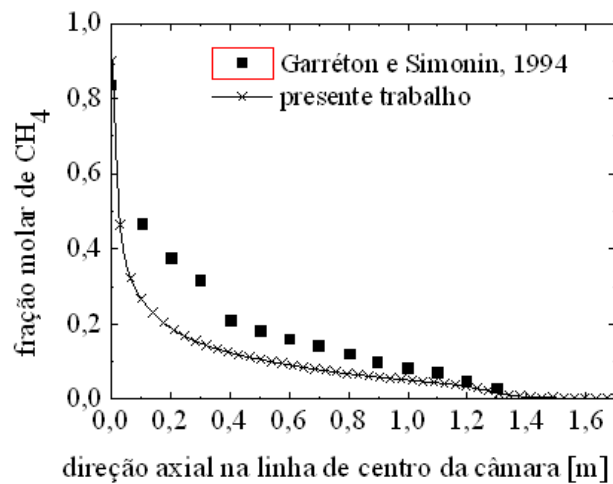


Figura 6.3- Perfis de frações mássicas de CH_4 na linha de centro da câmara de combustão

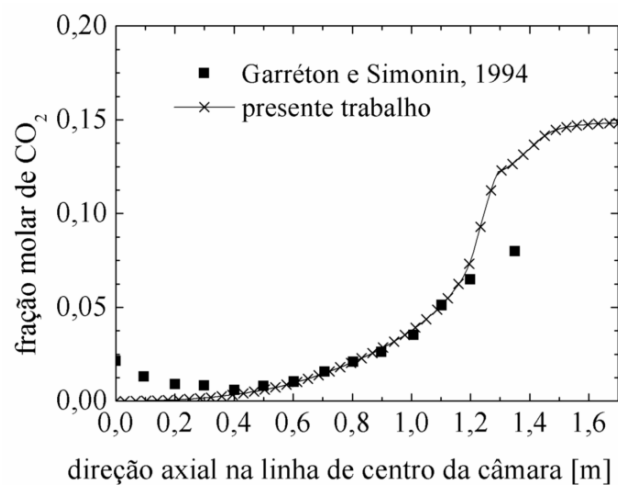


Figura 6.4- Perfis de frações mássicas de CO_2 na linha de centro da câmara de combustão.

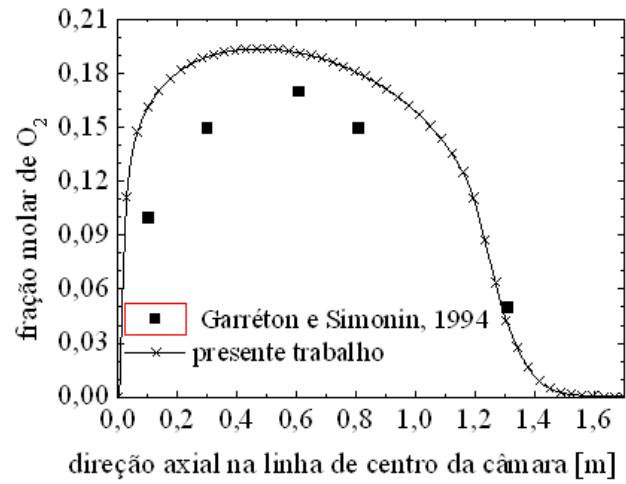


Figura 6.5- Perfis de frações mássicas de O₂ na linha de centro da câmara de combustão.

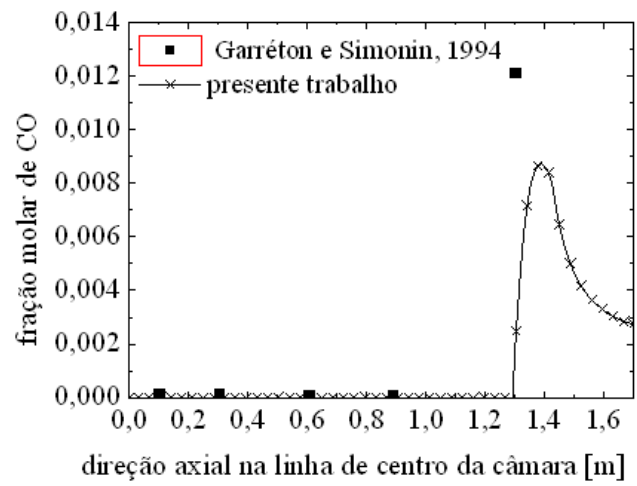


Figura 6.6- Perfis de frações mássicas de CO na linha de centro da câmara de combustão.

7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta os resultados de dois estudos relativos aos efeitos de promotores de turbulência nas correntes de combustível e de ar sobre (i) a transferência de calor radiativa na câmara de combustão, (ii) a influência das interações turbulência-radiação (TRI).

7.1 Efeito dos promotores de turbulência sobre a transferência de calor radiativa na câmara de combustão

Esta seção busca estudar o impacto da incorporação de promotores de turbulência na entrada do ar e do combustível sobre o comportamento térmico da câmara de combustão. Um dos principais efeitos do uso de um promotor de turbulência é aumentar a turbulência característica, a qual pode ser representada pelo parâmetro intensidade de turbulência. Sendo assim, na simulação numérica, o promotor de turbulência pode ser substituído pelos seus efeitos, isto é, alterando a intensidade de turbulência consegue-se simular o comportamento de diferentes promotores de turbulência. Este procedimento numérico também foi adotado por Darbandi e Ghafourizadeh, 2017, no qual foram considerados promotores de turbulência que produziam 3%, 10%, 15% e 20% de intensidade de turbulência na entrada do combustor.

Para verificar o comportamento de diferentes promotores de turbulência, quatro diferentes intensidades de turbulência são consideradas neste estudo. Considera-se que estes promotores de turbulência produzem 3%, 6%, 15% e 20% de intensidade de turbulência nas correntes de entrada de ar e de combustível.

Nas figuras que seguem, apresentam-se os resultados da simulação numérica de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados dentro de uma câmara de combustão cilíndrica, levando em consideração os efeitos da radiação térmica dos gases (CO_2 e H_2O) e da fuligem, também incluindo efeitos das interações TRI, baseando-se no estudo realizado por Centeno, 2014.

As Figuras 7.1 e 7.2 apresentam, respectivamente, os campos do termo fonte de calor radiativo e os campos de temperatura para os quatro cenários estudados (intensidades de turbulência de 3%, 6%, 15% e 20%). Sendo o termo fonte de calor radiativo um balanço entre emissão e absorção de radiação térmica no meio participante, as regiões com valores positivos nos campos mostrados na Figura 7.1 referem-se aos locais da câmara de combustão onde a absorção é superior à emissão, enquanto o contrário ocorre nas regiões com valores negativos.

Pode-se relacionar os campos do termo fonte de calor radiativo (Figura 4) com os campos de temperatura (Figura 5), uma vez que as regiões com as temperaturas mais elevadas são aquelas em que predomina a emissão de radiação térmica, enquanto as regiões de temperaturas mais baixas predomina a absorção de radiação térmica.

Na Figura 7.1 observa-se que com a utilização de promotores de turbulência mais intensos (aumento de IT) existe um deslocamento da região dominada pela emissão de radiação térmica (termo fonte de calor radiativo negativo) para mais próximo da entrada do combustor, juntamente com o aumento considerável do termo fonte. Da mesma forma, observa-se na Figura 7.2 que a região de temperatura mais elevada também é deslocada em direção à entrada da câmara de combustão. Este deslocamento dos campos de temperatura está de acordo com os resultados apresentados em Darbandi e Ghafourizadeh, 2017, onde foi mostrado que promotores de turbulência mais fortes resultam em produtos de combustão mais próximos às entradas de combustível e oxidante, pois estes conseguem uma melhor mistura assim que entram no combustor. Ainda, conforme os resultados apresentados na Tabela.7.1, se verifica que a temperatura máxima na câmara de combustão mantém-se aproximadamente constante, enquanto que a temperatura média em todo o domínio da câmara é aumentada significativamente, explicando assim o aumento do termo fonte de calor radiativo, e podendo-se assim afirmar que o uso de promotores de turbulência mais intensos levam a um aumento da transferência de calor na câmara de combustão.

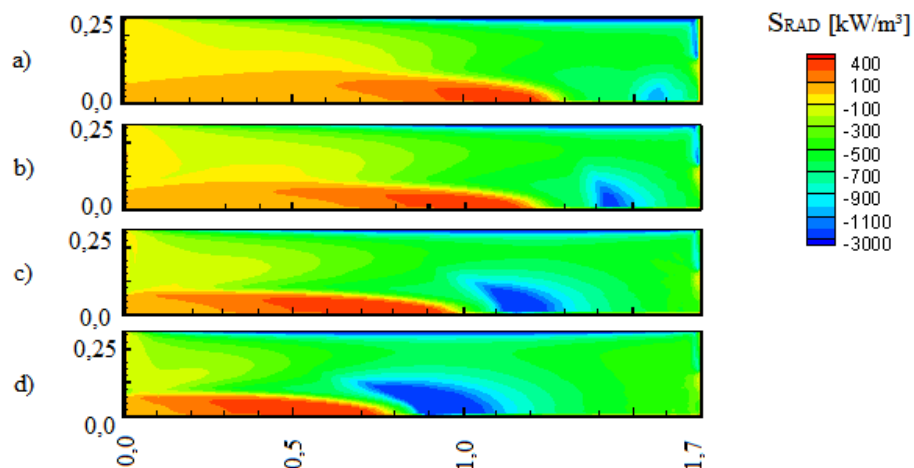


Figura 7.1– Termo fonte de calor radiativo com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

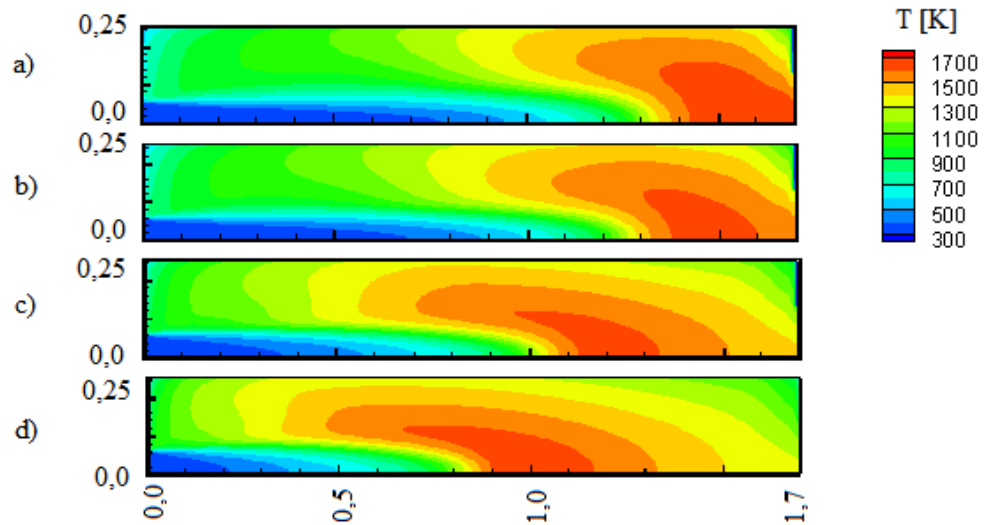


Figura 7.2– Campos de temperatura com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6%
(c) 15% (d) 20%

Tabela 7.1 – Temperatura máxima na chama e temperatura média em todo o domínio nos cenários estudados

Promotor de turbulência	$T_{máx}$ [K]	$T_{média}$ [K]
3%	1689,4	1087,1
6%	1650,3	1124,5
15%	1649,9	1227,8
20%	1683,4	1269,1

A Figura 7.3 apresenta o perfil de temperatura ao longo da linha de centro da câmara considerando os cenários estudados (intensidades de turbulência de 3%, 6%, 15% e 20%), verifica-se que a distribuição de temperaturas ao longo da linha de centro varia conforme a utilização de diferentes promotores de turbulência. Esta alteração indica que a temperatura de exaustão diminuiu, sendo de 1653,5 K, 1564,9 K, 1420,1 K e 1315,3 K do promotor de turbulência mais suave (3%) ao mais intenso (20%). Esta redução na temperatura de exaustão dos gases pode ser considerada como uma melhoria na troca térmica da câmara, podendo ser atribuída ao aumento da mistura de combustível e oxidante na região mais próxima da entrada da câmara de combustão, resultando em um processo de combustão mais eficiente dentro do combustor, e conseqüentemente uma melhor transferência de calor para as paredes da câmara, como será mostrado a seguir.

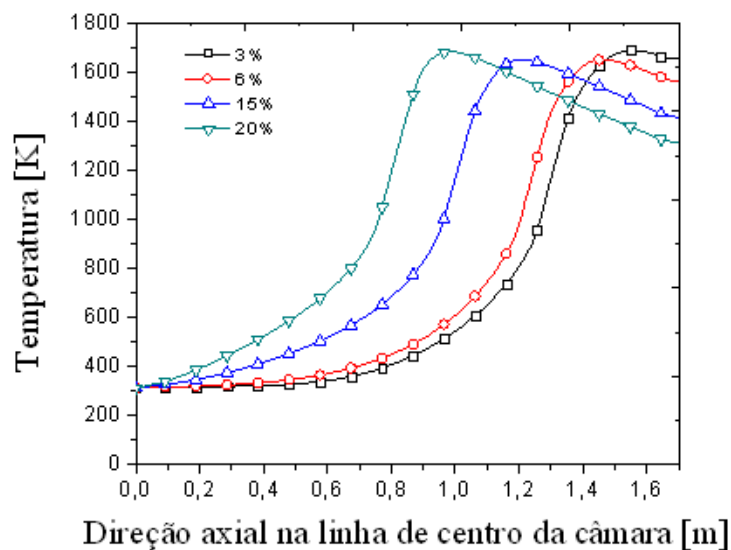


Figura 7.3– Perfis de temperatura na direção axial ao longo da linha de centro da câmara com promotores de turbulência de (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

Nas figuras que seguem, (Figuras 7.4 a 7.9) estão apresentados os campos de frações molares de H_2O , CO_2 e fração volumétrica de fuligem. Conforme a utilização de promotores de turbulência há um aumento da região com valores significativos no campo de fração molar tanto de H_2O quanto de CO_2 , sendo que a produção destas espécies ocorre na região mais próxima da entrada da câmara com o aumento da IT, assim como ocorreu para a temperatura (Figura 7.2). Entretanto a variação de valores máximos e mínimo nestes campos é quase imperceptível quando se altera a IT.

Woolley et al., 2009, investigou uma chama turbulenta de metano em ar sem pré-mistura, considerando a formação de fuligem através da solução de duas equações de transporte, os valores máximos encontrados foram na ordem de 10^{-7} . Brookes e Moss, 1999a, realizaram medições de fuligem em chamas turbulentas de metano e encontraram frações volumétricas máximas da ordem de 10^{-7} . Mossi et al., 2010b, também encontraram frações volumétricas máximas da ordem de 10^{-7} em seu trabalho sobre efeitos de modelos do coeficiente de absorção dos gases em uma câmara de combustão com chama laminar de metano.

Em relação ao campo de fração volumétrica da fuligem, mostrado na Figura 7.7, há uma alteração da posição do ponto de máxima concentração de fuligem; quanto maior a intensidade do promotor de turbulência ocorre um deslocamento do ponto máximo para a região mais próxima à entrada, da mesma forma que ocorreu para as outras espécies gasosas e a temperatura. A Figura 7.7 mostra o perfil de fração volumétrica de fuligem na linha de

centro da câmara de combustão, sendo este deslocamento evidente também nesta figura. Apesar dos valores máximos ficarem todos na ordem de 10^{-7} , os quais são valores semelhantes aos já encontrados na literatura, se observa que a câmara de combustão possuirá uma maior quantidade de fuligem dentro, assim como de H_2O e CO_2 (Figuras 7.4 e 7.5), o que contribuirá positivamente para a transferência de calor por radiação na câmara, como será discutido a seguir.

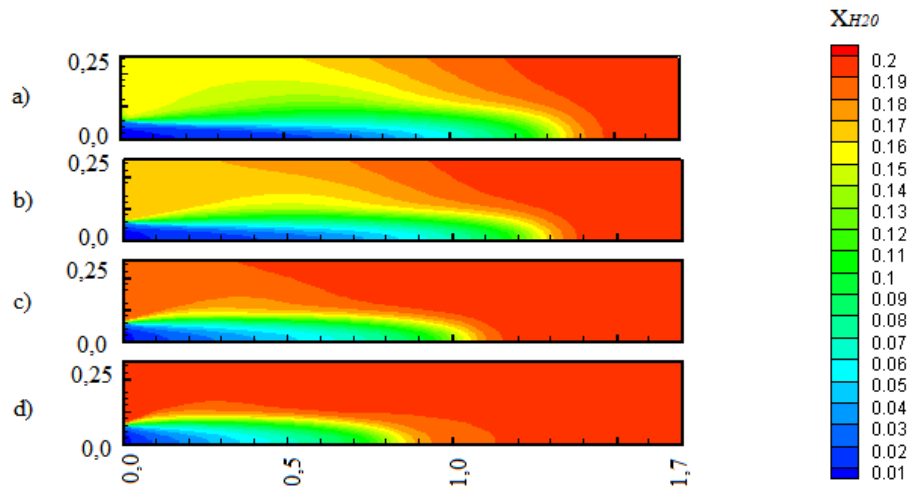


Figura 7.4- Campos de frações molares de H_2O com promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

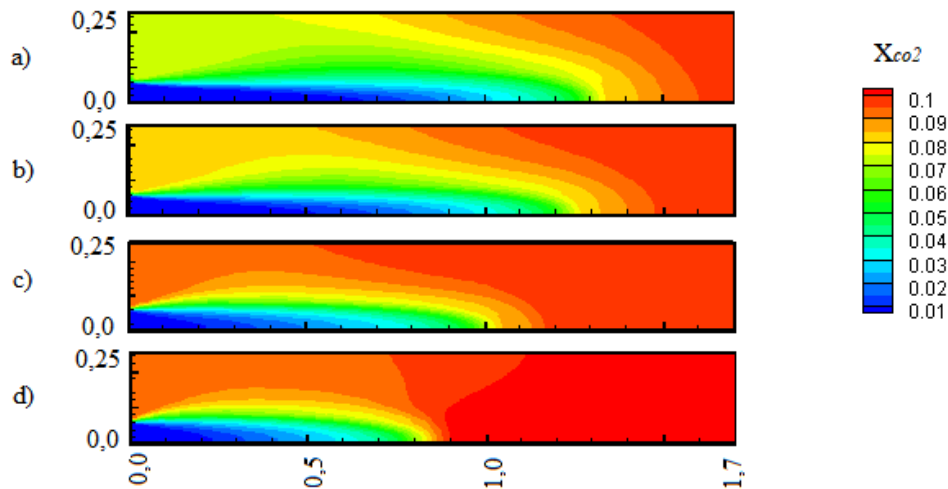


Figura 7.5- Campos de frações molares de CO_2 promotores de turbulência de: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

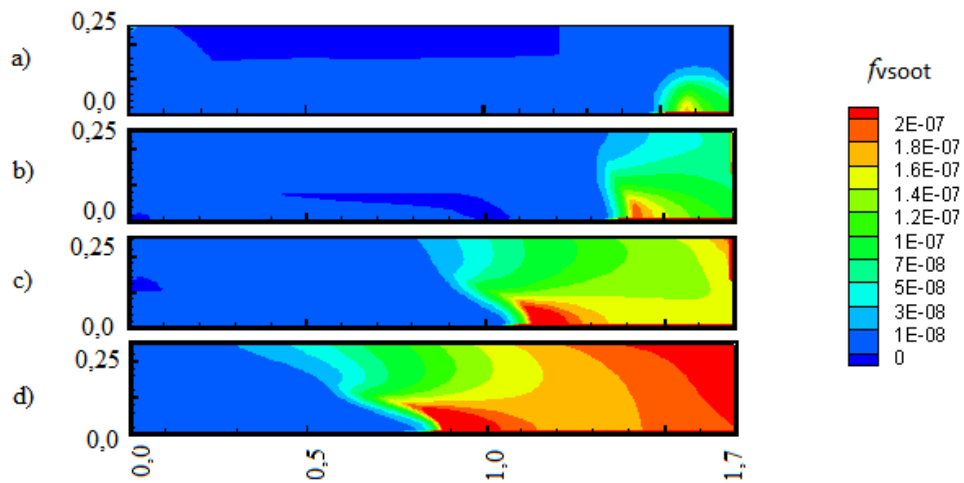


Figura 7.6- Campo de fração volumétrica de fuligem com promotores de turbulência de:
(a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

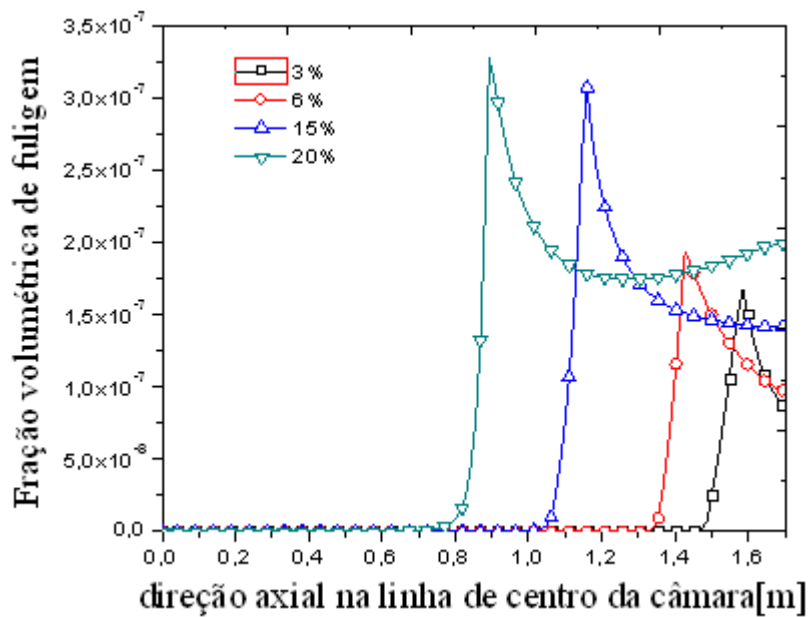


Figura 7.7- Perfis de fração volumétrica de fuligem na direção axial na linha de centro da câmara com promotores de turbulência: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

A Tabela 2 apresenta os resultados obtidos para as taxas de transferência de calor por convecção e por radiação na parede cilíndrica da câmara de combustão. Observa-se que a taxa convectiva permaneceu praticamente constante, com um aumento de 1,9 kW comparando os casos extremos (com intensidades de turbulência de 3% e de 20%), enquanto que a taxa radiativa aumentou de maneira importante (aumento de 68,2 kW, equivalente a 54,2% de

aumento); como resultado, a taxa total (somatório das taxas convectiva e radiativa) aumentou significativamente. Assim, a utilização de promotores de turbulência mais intensos proporcionou um aumento líquido da taxa total de transferência de calor entre os produtos da combustão e a parede da câmara de 60,1 kW, equivalente a 31% na comparação do promotor mais fraco em relação ao mais intenso. O aumento da intensidade de turbulência gerada pelos promotores eleva a mistura dos gases na entrada câmara de combustão e dentro da mesma, aumentando o seu desempenho térmico, de forma que a temperatura média dos produtos é aumentada, maiores porções da câmara possuem quantidades significativas de CO₂ e H₂O, assim como de fuligem (a qual ainda possui maiores concentrações, além de estar presente em mais locais da câmara), o que resultou em uma maior taxa de transferência de calor na parede da câmara. Estes resultados estão em concordância com os encontrados por Darbandi e Ghafourizadeh, 2017, no qual se verificou que o uso de promotores de turbulência mais forte eleva a mistura dos fluxos de combustível e oxidante, aumentando o desempenho no combustor.

Tabela 7.2– Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os promotores de turbulência estudados

	taxa somente convecção [kW]	taxa somente radiação [kW]	taxa total (radiação+convecção) [kW]
IT = 3%	56,8	125,7	182,5
IT = 6%	56,1	134,9	190,9
IT = 15%	57,8	171,8	229,6
IT = 20%	58,7	193,9	252,6

Dessa forma, fica claro que a influência dos promotores de turbulência é bastante importante para o caso estudado. Observa-se que o aumento da intensidade de turbulência fez com que a mistura de combustível e oxidante ocorresse mais próxima da entrada da câmara de combustão, fazendo com que os campos de espécies gasosas, fuligem e temperatura tivessem seus valores máximos também posicionados mais próximos da entrada, conduzindo ao aumento da transferência radiativa, assim como da posição de seus valores máximos. Mesmo não influenciando de forma significativa nos valores máximos dos campos de H₂O e CO₂, os valores de fração volumétrica de fuligem e de temperatura foram aumentados, levando a

aumentos significativos no campo de radiação térmica dentro da câmara de combustão, observados pelo aumento do termo fonte de calor radiativo (Figura 7.1) e do fluxo de calor radiativo na parede da câmara (Figura 7.8).

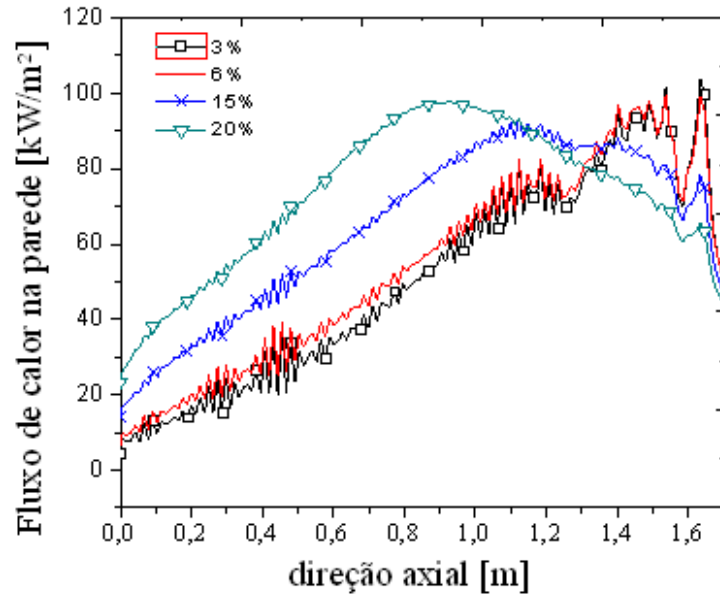


Figura 7.8– Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão com promotores de turbulência: (a) 3% (b) 6% (c) 15% (d) 20%

Um fator importante que descreve o campo global de radiação em uma chama é a taxa líquida de transferência radiativa na chama e sua variável normalizada, a fração radiativa (f_{rad}). A taxa líquida de transferência radiativa corresponde à integral de $\overline{S_{rad}}$ sobre todo o domínio computacional; a fração radiativa é a razão deste valor pela taxa de calor liberada na combustão.

Na Tabela 7.3 são apresentadas para os cenários estudados a taxa líquida de transferência radiativa e a fração radiativa, ambas possuem valores significativos para este estudo, confirmando a relevância do estudo da radiação térmica presente na câmara. Observa-se que a fração radiativa aumentou 37% (de 20,6% para 32,8%) na comparação do promotor mais fraco em relação ao mais intenso, assim como o aumento encontrado na taxa de transferência de calor sobre a parede radial da câmara, este aumento também era esperado devido ao aumento do termo fonte de calor radiativo (Figura 7.1).

Tabela 7.3 – Taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.

	taxa radiativa líquida [kW]	f_{rad} [%]
IT = 3%	128,1	20,6
IT = 6%	138,5	23,0
IT = 15%	177,7	29,0
IT = 20%	198,4	32,8

7.2 Efeito dos promotores de turbulência sobre as interações turbulência-radiação (TRI)

Nesta seção, deseja-se avaliar a influência do uso de promotores de turbulência sobre o efeito das interações turbulência-radiação (TRI), deste modo foram considerados dois diferentes cenários. No primeiro cenário os cálculos das interações TRI foram realizados (assim como foi apresentado na seção anterior), e no segundo cenário tais efeitos foram desconsiderados nos cálculos, permitindo assim a avaliação da influência dos efeitos das interações TRI. Para realizar uma melhor comparação dos cenários, serão apresentados os resultados considerando o efeito de dois promotores de turbulência, os quais proporcionam intensidades de turbulência de 6% e de 20%.

As simulações foram realizadas com o mesmo computador utilizado na seção anterior, com o tempo médio de 72 horas considerando as interações TRI e 86 horas desconsiderando as interações TRI.

Foram feitas comparações para verificar como e quanto as interações turbulência-radiação (TRI) afetaram os campos de temperatura, concentração de CO₂, concentração de H₂O, concentração de CH₄, concentração de O₂, concentração de CO, e do termo fonte de calor radiativo, assim como as quantidades térmicas, tais como a fração radiativa e o fluxo de calor através das paredes da câmara.

As Figuras 7.9 e 7.10 apresentam o termo fonte de calor radiativo, e os resultados dos campos de temperatura, respectivamente.

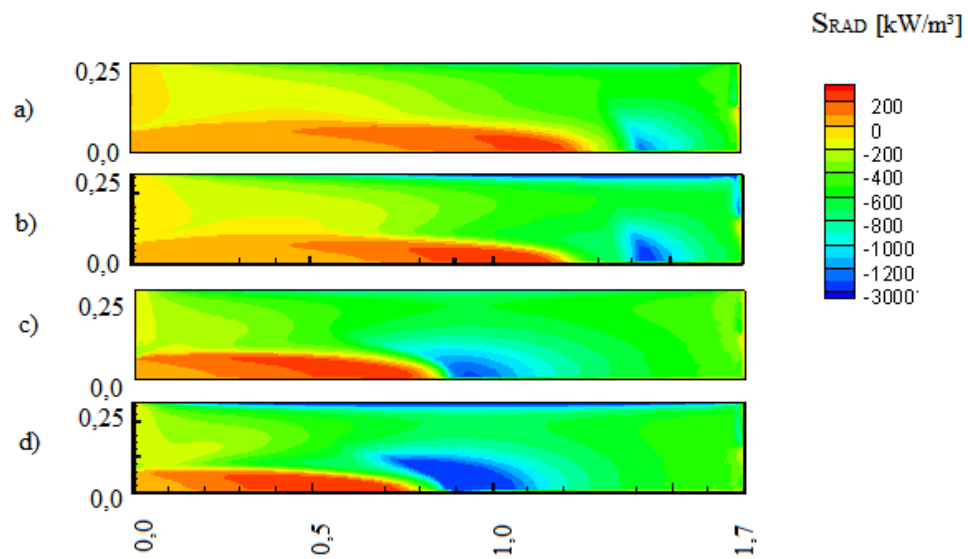


Figura 7.9 – Termo fonte de calor radiativo: (a) Desconsiderando as interações TRI com IT 6%, (b) Considerando as interações TRI com IT 6%, (c) Desconsiderando as interações TRI com IT 20%, (d) Considerando as interações TRI com IT 20%.

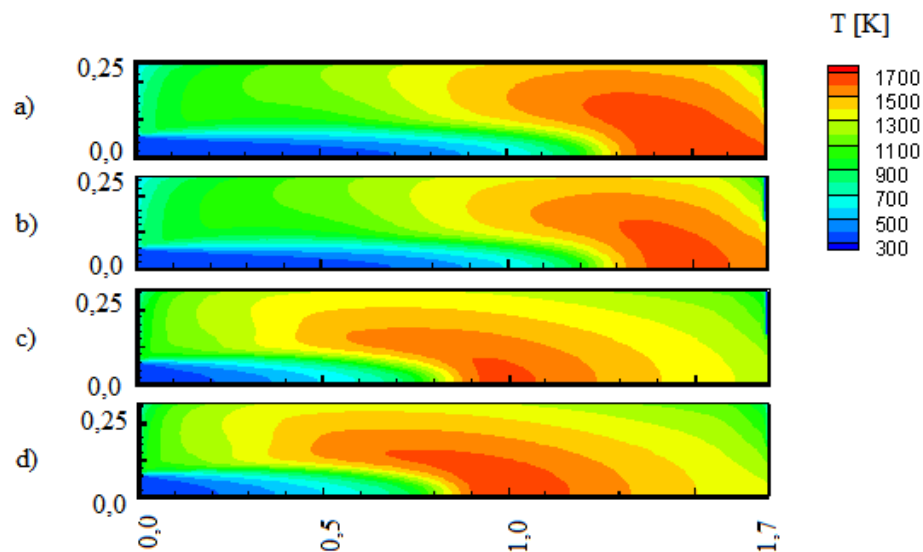


Figura 7.10 – Campos de temperatura: (a) Desconsiderando as interações TRI com IT 6%, (b) Considerando as interações TRI com IT 6%, (c) Desconsiderando as interações TRI com IT 20%, (d) Considerando as interações TRI com IT 20%.

Observa-se que com a utilização de promotores de turbulência mais intensos (aumento de IT) e desconsiderando as interações TRI, além do deslocamento da região dominada pela emissão de radiação térmica para mais próximo da entrada do combustor, já discutidos no

capítulo anterior, tem-se ainda o aumento considerável do termo fonte, em função da consideração da influência das flutuações turbulentas sobre o campo de radiação.

Verifica-se que o termo fonte de calor radiativo calculado incluindo as interações TRI é maior do que aquele calculado sem as interações, este resultado está de acordo com Coelho, 2007, que comenta que as interações TRI podem aumentar significativamente a intensidade radiante de chamas turbulentas de metano ou gás natural.

Como pode ser visto nas Figuras 7.10, as interações TRI possuem um papel de relevância sobre o campo de temperaturas. As temperaturas máximas da chama para os diferentes cenários estão mostradas na Tabela. 7.4.

Tabela 7.4 – Temperatura máxima na chama nos cenários estudados

Promotor de turbulência	$T_{máx}$ [K] sem TRI	$T_{máx}$ [K] com TRI
6%	1692,3	1650,3
20%	1730,7	1683,4

Como visto, a temperatura máxima diminuiu 42 K com o promotor de turbulência mais fraco e 47,3 K com o promotor de turbulência mais intenso quando se consideram as interações TRI, estes resultados estão de acordo com Coelho, 2007, no qual afirma que a transferência de calor radiativa conduz a chamas mais frias, especialmente quando se consideram as interações TRI. Ainda, observa-se que a influência das interações TRI sobre a temperatura máxima na chama se mostraram mais importantes com a consideração do promotor de turbulência mais intenso, embora a diferença para o promotor mais fraco não seja elevada (redução de 2,5% em $T_{máx}$ para o promotor mais fraco, e de 2,7% em $T_{máx}$ para o promotor mais intenso).

A Figura 7.11 apresenta os perfis de temperatura e de frações molares de CH₄, CO₂, H₂O, O₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara, considerando os resultados das simulações dos dois cenários (considerando as interações TRI e desconsiderando as interações TRI). Na sequência é apresentada na Figura 7.12 com o perfil de fração volumétrica de fuligem na linha de centro da câmara de combustão.

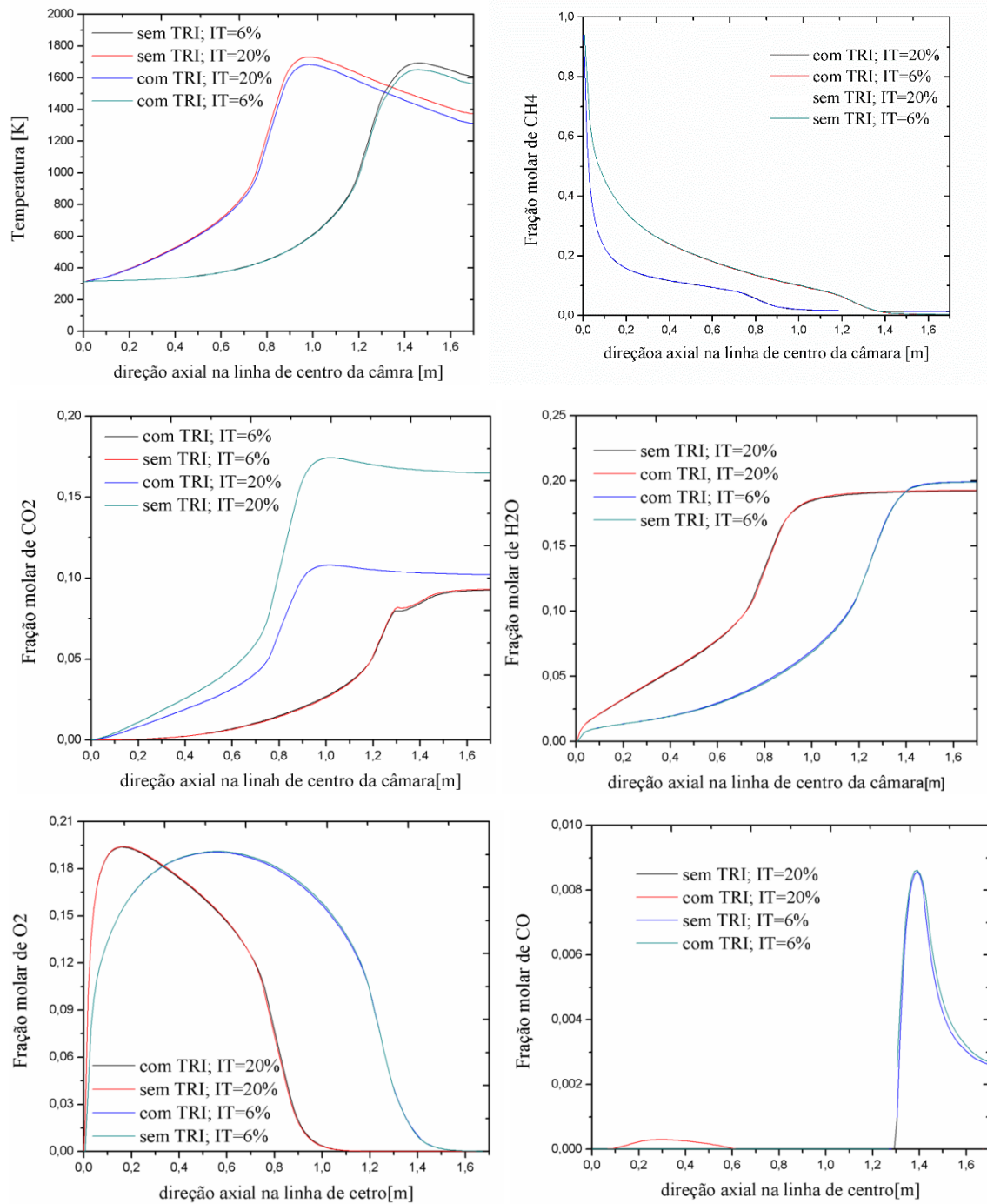


Figura 7.11- Perfis axiais de temperatura e de frações molares temporais médias de CH₄, CO₂, H₂O, O₂ e de CO ao longo da linha de centro da câmara para os casos estudados.

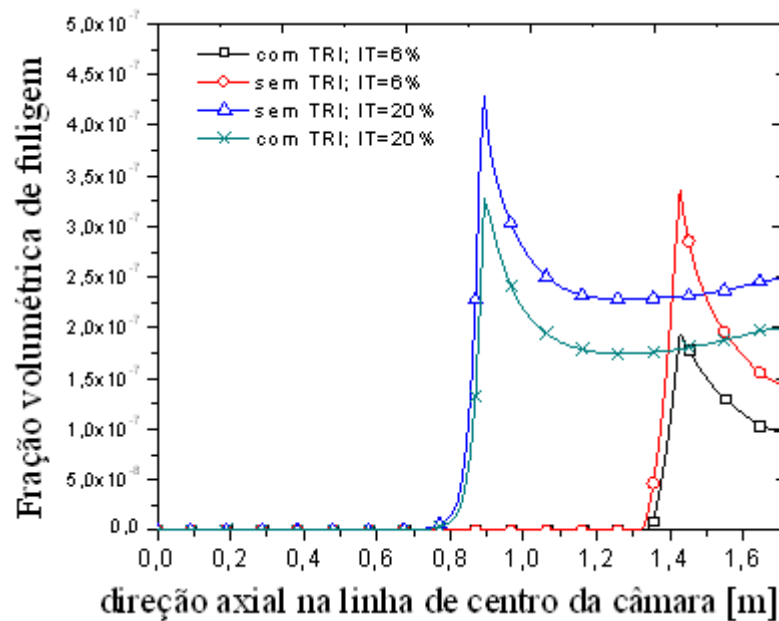


Figura 7.12– Fração volumétrica da fuligem para os casos estudados.

Observa-se na Figura 7.12 que com o aumento da intensidade do promotor de turbulência há uma alteração da posição do ponto de máxima concentração de fuligem, já discutidos no capítulo anterior; além disso quando as interações TRI são consideradas, observa-se um aumento de concentração de fuligem. Assim, ao considerar as interações TRI nos cálculos, o aumento no termo fonte radiativo (Figura 7.9) pode ser explicado tanto como consequência das flutuações turbulentas de temperatura (conforme a modelagem adotada para as interações TRI apresentada na Seção 3.5, Equação 3.33, deste trabalho), quanto pelo aumento na quantidade de fuligem.

Devido a uma dependência das taxas de reações químicas pela temperatura, se esperava que os cálculos de radiação afetassem os cálculos referentes à formação e ao consumo das espécies envolvidas no processo. No entanto a variação considerando/desconsiderando as interações TRI é imperceptível, exceto na fração molar de CO_2 , que diminui com as interações TRI. Este resultado em que as frações molares das espécies não terem sido influenciadas pela contabilização das interações TRI pode estar relacionada com o mecanismo de reação empregado no presente trabalho, o qual é um mecanismo global de dois passos, além do modelo de combustão para o cálculo das taxas das reações, que é relativamente simplificado. O uso de um mecanismo detalhado e de modelos de combustão mais avançados poderiam mostrar diferentes efeitos das interações TRI, embora a modelagem aqui empregada tenha obtido bons resultados ao comparar seus resultados com

os dados experimentais.

A Tabela 7.5 apresenta os resultados obtidos para as taxas de transferência de calor por convecção e por radiação na parede cilíndrica da câmara de combustão. Observa-se que ao contrário do capítulo anterior quando a taxa de convecção se manteve constante com o aumento da intensidade de turbulência, neste caso a transferência de calor por convecção aumentou quando se desconsiderou as interações TRI, uma vez que os gradientes de temperatura na câmara foram maiores neste caso, devido ao menor termo fonte de calor radiativo que se obteve no cenário sem TRI (ao comparar com o cenário com TRI). Conforme esperado a transferência de calor radiativa aumentou quando as interações TRI foram consideradas, pois o termo fonte de calor radiativo é maior quando se considera as interações TRI. Comparando os cenários de cálculo com e sem as interações TRI, a taxa de transferência de calor por radiação aumentou em 21%, para ambos os promotores de turbulência estudados. Na Figura 7.13 se verificam aumentos significativos no fluxo de calor radiativo sobre a parede lateral da câmara de combustão ao contabilizar os efeitos das interações TRI, corroborando com os resultados apresentados na Tabela. 7.5.

Tabela 7.5 – Taxa de transferência de calor na parede cilíndrica da câmara de combustão para os cenários estudados

	IT = 6%	IT = 20%
taxa somente convecção com TRI [kW]	56,1	58,7
taxa somente convecção sem TRI [kW]	70,1	74,8
taxa somente radiação com TRI [kW]	104,0	193,9
taxa somente radiação sem TRI [kW]	106,6	160,3
taxa total (radiação+convecção) com TRI [kW]	190,9	252,6
taxa total (radiação+convecção) sem TRI [kW]	181,7	235,1

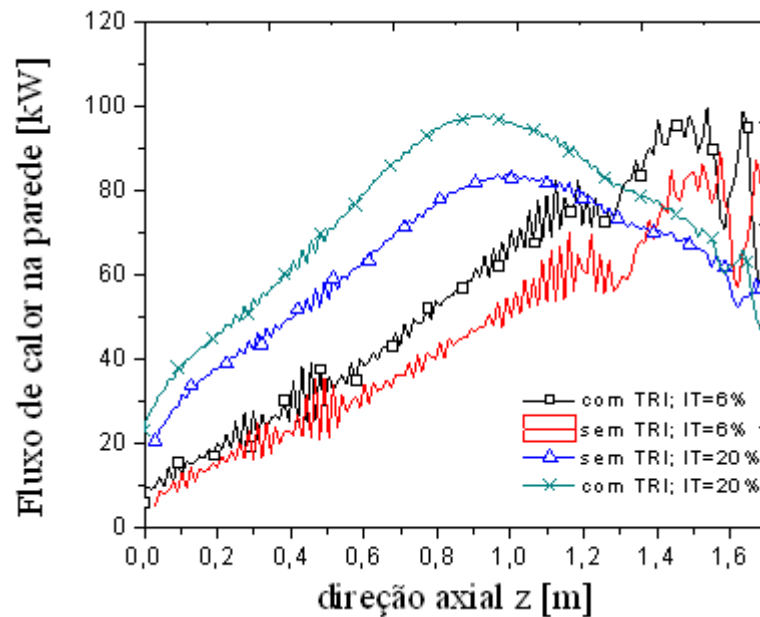


Figura 7.13– Fluxo de calor radiativo sobre a parede radial da câmara de combustão para os cenários estudados

A taxa líquida de transferência radiativa e a fração radiativa foram calculadas e os resultados estão mostrados na Tabela. 7.6. Tanto a taxa líquida de transferência radiativa, quanto a correspondente fração radiativa, para a chama em estudo possuem valores significativos. Observa-se que a consideração das interações TRI possuiu um efeito importante sobre estes parâmetros, assim como foi para as taxas e fluxos na parede apresentadas acima. Ao considerar os efeitos das interações TRI, a fração radiativa aumentou em 25% (de 18,4% para 23,0%) para o caso com $IT = 6\%$, enquanto o aumento foi de 17% (de 28,0% para 32,8%) para o caso com $IT = 20\%$.

Os resultados desta seção mostraram que as interações TRI possuem efeitos importantes sobre a transferência de calor na câmara de combustão para ambas intensidades de promotores de turbulência, influenciando significativamente fluxos e taxas de calor, assim como o campo de temperaturas, embora não tenha tido influência importante no cálculo dos produtos da combustão (o que pode ter acontecido devido ao modelo de combustão adotado), comprovando assim a importância de contabilizar nos cálculos os efeitos das interações TRI, mesmo em se tratando de simulações RANS, onde estes efeitos devem ser modelados, por não estarem disponíveis as flutuações turbulentas das variáveis (temperatura e concentrações das espécies químicas).

Tabela 7.6 - Predições da taxa líquida de transferência radiativa e da fração radiativa.

	taxa radiativa líquida [kW] com TRI	taxa radiativa líquida [kW] sem TRI	f_{rad} [%] com TRI	f_{rad} [%] sem TRI
IT = 6%	138,5	110,9	23,0	18,4
IT = 20%	198,4	169,2	32,8	28,0

Adicionalmente, as Figuras 7.14 e 7.15 apresentam os campos de energia cinética turbulenta das flutuações de velocidade e do valor *rms* das flutuações de temperatura, respectivamente, para os dois promotores de turbulência estudados nesta seção.

Observa-se na Figura 7.14 que a consideração das interações TRI nos cálculos não influenciou de maneira acentuada o campo de energia cinética turbulenta. Contudo, considerando que a intensidade de turbulência pode ser definida como a razão entre a energia cinética associada às flutuações de velocidade (energia cinética turbulenta) e a energia cinética associada ao campo médio de velocidades, observa-se nesta figura que o aumento da intensidade de turbulência na entrada da câmara de combustão levou a um aumento importante na energia cinética na região da entrada da câmara, além de alterar o perfil do campo deste parâmetro. Estas alterações contribuíram com os resultados mostrados anteriormente, onde os campos de radiação e temperatura apresentaram os mesmos deslocamentos. Ainda, a Figura 7.15 mostra que com o aumento da intensidade do promotor de turbulência, o campo do valor *rms* das flutuações de temperatura também apresenta um deslocamento para próximo da entrada da câmara, como esperado, e também uma redução no seu valor máximo (de 625 K para 487 K). Conforme discutido acima sobre os resultados da Tabela. 7.6, onde o efeito das interações TRI foi menor para o caso com promotor de turbulência mais intenso, este comportamento do valor *rms* das flutuações de temperatura corrobora com aqueles resultados, uma vez que o efeito das interações TRI é modelado usando a variância das flutuações de temperatura (a qual é definida como o quadrado do valor *rms* das flutuações de temperatura).

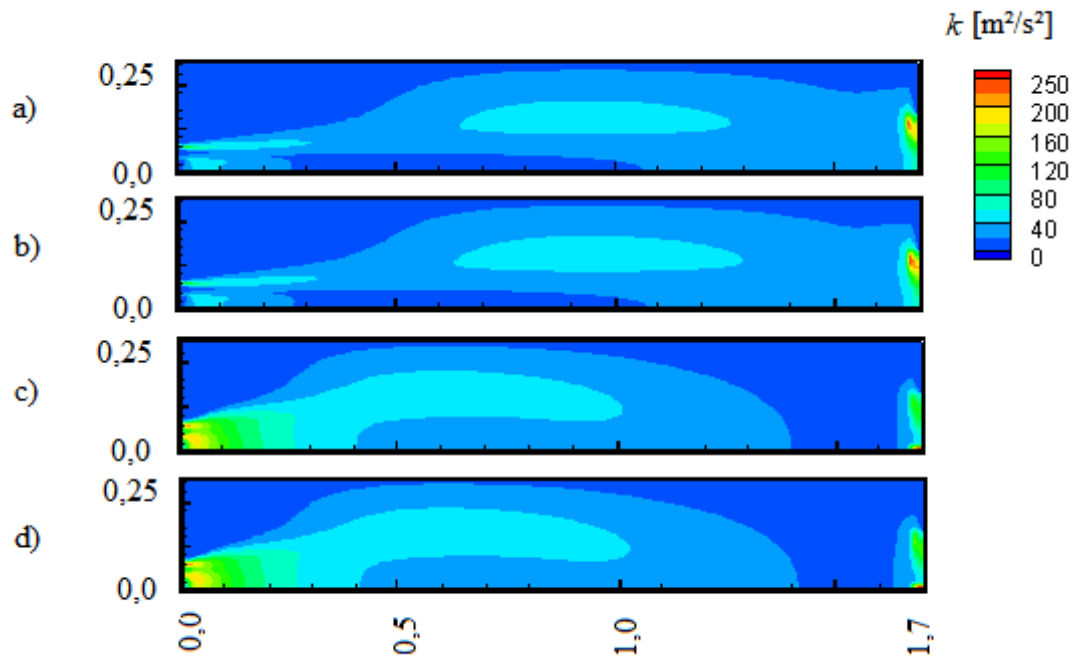


Figura 7.14- Campos de energia cinética turbulenta para os diferentes cenários:
 (a) com TRI, IT = 6%; (b) sem TRI, IT = 6%; (c) com TRI, IT = 20%; (d) sem TRI, IT = 20%.

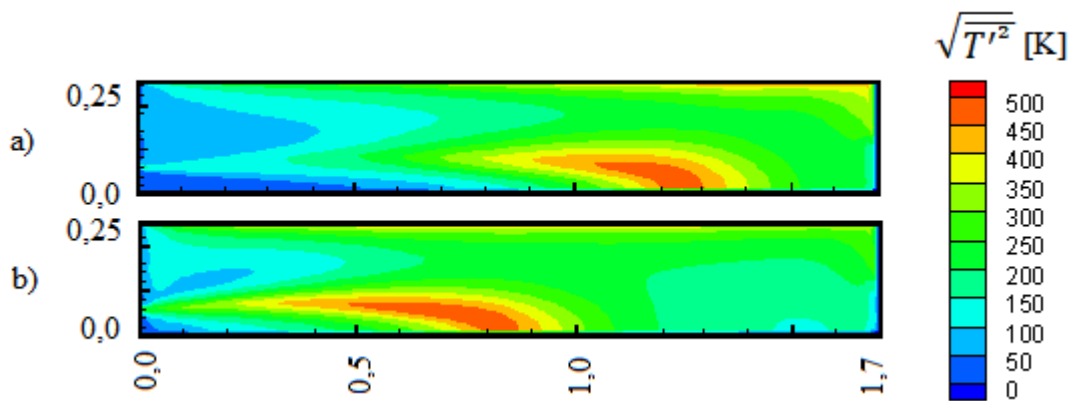


Figura 7.15- Campos do valor *rms* das flutuações de temperatura, $\sqrt{T'^2}$ (a) com TRI, IT = 6%; (b) com TRI, IT = 20%.

8 CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou simulações numéricas de uma chama turbulenta de metano e ar não pré-misturados em uma câmara cilíndrica, visando estudar o efeito de promotores de turbulência sobre seu comportamento térmico. Para simular os efeitos de promotores de turbulência partiu-se de um código já desenvolvido por Silva, 2005, e posteriormente modificado por Centeno, 2014.

A modelagem numérica utilizou o método de volumes finitos para a solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, espécies químicas, energia, e variância das flutuações de temperatura. O campo de fuligem foi calculado através dos modelos de Khan e Greeves, 1974, para a formação de fuligem, e de Magnussen e Hjertager, 1977, para a oxidação. Para as espécies gasosas foi utilizado um mecanismo de reação com dois passos para as espécies gasosas com o modelo de combustão *Eddy Breakup* – Arrhenius para cálculo das taxas de reação. O modelo $k-\varepsilon$ padrão foi empregado para modelagem da turbulência e o método de ordenadas discretas (DOM) foi empregado para resolver a equação de transferência radiativa (ETR). O modelo WSGG foi considerado para simular os efeitos radiativos dos gases e da fuligem, além de serem levados em consideração nas interações TRI sobre a transferência de calor radiativa.

Primeiramente foi avaliada a transferência de calor radiativa na câmara de combustão através da incorporação de promotores de turbulência na entrada do ar e do combustível. Para isso foi alterado o parâmetro intensidade de turbulência nas correntes de entrada, este procedimento foi utilizado para promotores de turbulência que produziam 3%, 6%, 15% e 20% de intensidade de turbulência na entrada do combustor.

A comparação entre distintos promotores de turbulência, mostraram que os campos de temperatura e do termo fonte de calor radiativo, assim como a transferência de calor para a parede da câmara e a fração radiativa sofreram variações com o aumento da intensidade de turbulência, pois a turbulência gerada elevou a mistura dos gases, aumentando seu desempenho térmico, resultando em uma maior taxa de transferência de calor na parede da câmara; comparando os casos extremos (com intensidades de turbulência de 3% e de 20%), obteve-se um aumento da taxa radiativa de 68,2 kW (aumento de 54,2%), demonstrando uma importante vantagem na utilização de promotores de turbulência.

Também foi observado que o aumento da turbulência fez com que a mistura de combustível e oxidante ocorresse mais próxima da entrada da câmara de combustão, fazendo

com que os campos de espécies gasosas, fuligem e temperatura tivessem seus valores máximos também posicionados mais próximos da entrada. Mesmo não influenciando de forma significativa nos valores máximos dos campos de H₂O e CO₂, os valores de fração volumétrica de fuligem e de temperatura foram aumentados com o uso de promotores de turbulência mais intensos.

Numa segunda avaliação, o estudo foi conduzido a comparar a influência do uso de promotores de turbulência sobre o efeito das interações turbulência-radiação (TRI). Neste caso, para realizar uma melhor comparação dos cenários, foram apresentados os resultados considerando o efeito de dois promotores de turbulência, os quais proporcionam intensidades de turbulência de 6% e de 20%.

Observa-se que as interações TRI possuem um papel importante sobre o campo de temperaturas, sendo que a temperatura máxima na câmara foi reduzida com o aumento da intensidade do promotor de turbulência quando se consideram as interações TRI nos cálculos; também se observa que a transferência de calor radiativa aumentou por volta de 20% quando as interações TRI foram consideradas.

Verifica-se que os efeitos sobre a transferência de calor na câmara de combustão para ambas intensidades de promotores de turbulência influenciaram o campo de temperaturas, fluxos e taxas de calor, enquanto em relação aos produtos de combustão não se mostrou ter uma grande influência (o que pode ter acontecido devido ao modelo de combustão adotado, deste modo comprovando a importância de contabilizar nos cálculos os efeitos das interações TRI).

Por fim, pode-se concluir que os objetivos do presente trabalho foram atingidos, investigando numericamente o efeito do uso de diferentes promotores de turbulência na entrada da câmara de combustão, possibilitando assim um estudo, ainda que incipiente, para otimizar as condições operacionais da câmara de combustão de tal forma a melhorar o seu desempenho térmico.

8.1 Sugestões de trabalhos futuros

Algumas propostas de continuidade da presente pesquisa podem ser sugeridas:

- Emprego de outros modelos de combustão para o cálculo das taxas das reações químicas;
- Emprego de outros mecanismos de reação (ainda globais, mas com mais passos, ou mesmo skeletal ou detalhado);

- Emprego de modelos de propriedades radiativas que permitam a participação das espécies químicas CO e CH₄, as quais, apesar de aparecerem em pequena quantidade na chama, podem contribuir para a transferência de calor radiativa;
- Utilização do código computacional desenvolvido como ferramenta para otimizar outras condições operacionais da câmara de combustão (além do uso de promotores de turbulência, pode-se estudar o efeito das vazões de entrada, do diâmetro do injetores de ar e de combustível, das temperaturas na entrada de ar e combustível, emprego de outros combustíveis, etc.);
- Aplicação do código computacional desenvolvido como ferramenta para a solução de outros problemas (geometrias, aplicações, etc.).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Brasil, Empresa de Pesquisa Energética. Balanço Energético Nacional 2017 – Ano base 2016: Relatório Síntese, Rio de Janeiro, EPE, 2017

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

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

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

Cassol, F., **Geração de soluções *benchmark* e avaliação de modelos de radiação térmica em processos de combustão**. Tese de Doutorado Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2013.

Cassol, F., Brittes, R., Centeno, F.R., Silva, C.V. and 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**, 2014.

Celik, I.B., Ghia, U., Roache, P.J., Freitas, C.J., Coleman, H., and 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., Brittes R., França F.H.R. and 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 and Radiative Transfer**, vol. 156, p. 1–11, 2015.

Centeno F.R., Brittes R., França F.H.R. and 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.R. and 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

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

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

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

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

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

Coelho, P.J. Turbulence–Radiation Interaction: From Theory to Application in Numerical Simulations, **Journal of Heat Transfer**, vol. 134, p. 1-13, 2002

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

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

Darbandi e Ghafourizadeh, Numerical Study of Inlet Turbulators Effect on the Thermal Characteristics of a Jet Propulsion-Fueled Combustor and Its Hazardous Pollutants Emission, **Journal. Heat Transfer** vol 139, 2017.

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

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

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

Ferreira C.M. **Desenvolvimento e caracterização de uma câmara de combustão DLN-Dry Low Nox com tecnologia LPP – Lean Premixed Prevaporized**. Dissertação de Mestrado em Ciências Mecânicas, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 2007.

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

Garréton, D. and Simonin, O. Final results. **Anais do First Workshop of Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces**, vol. 25, EDF-ERCOFTAC, p. 29 –

35, 1994.

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

Habibi, A., Merci, B. and Roekaerts, D., The importance of Turbulence-Radiation Interaction in RANS simulations of a turbulent non-premixed laboratory-scale bluff-body flame, **3rd European Combustion Meeting**, Crete, Grécia, 2007a.

Habibi, A., Merci, B., 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, 2007b.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Leuckel, W., Nastoll, W., and Zarzalis, N. Influence of Turbulence on Transient Premixed Flame Propagation Inside Closed Vessels, **Chem. Eng. Technol.**, 12(1), p. 226–233, 1989.

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

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

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

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.

Masoud Darbandi Majid Ghafourizadeh. Numerical Study of Inlet Turbulators Effect on the Thermal Characteristics of a Jet Propulsion-Fueled Combustor and Its Hazardous Pollutants Emission, **Journal of Heat Transfer** vol 139, 2017.

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

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

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

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

Nieckele, A.O., Naccache, M.F., Gomes, M.S.P., Carneiro, J.E. and Serfaty, R. Models

evaluations of combustion process in a cylindrical furnace, **Anais do 2001 ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition**, New York, NY, 2001

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

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

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

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

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

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

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

S.A. Hashemi, A. Fattahi, G.A. Sheikhzadeh and M.A. Mehrabian. Investigation of the effect of air turbulence intensity on NO_x emission in non-premixed hydrogen and hydrogen-hydrocarbon composite fuel combustion. **International journal of hydrogen energy** vol 36 p 10159 e 10168, 2011b.

Sadiki, A., Chrigui, M., Janicka, J. and Maneshkarimi, M. R.. Modeling and Simulation of Effects of Turbulence on Vaporization, Mixing and Combustion of Liquid-Fuel Sprays. **Flow Turbul. Combust.**, 75(1–4), p. 105–130, 2005.

Saqr, K.M., Aly, H.S., Sies, M.M. and Wahid, M.A. Effect of free stream turbulence on NO_x and soot formation in turbulent diffusion CH₄-air flames, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, vol. 37, p. 611–617, 2010.

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

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

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

Silva, C.V., **Simulação numérica da combustão turbulenta de gás natural em câmara cilíndrica**. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, 2005.

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

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

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

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

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

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

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

Woolley, R.M., Fairweather, M and Yunardi, Y. Conditional moment closure modeling of soot formation in turbulent, non-premixed methane and propane flames, **Fuel**, vol. 88, p. 393-407, 2009.

Yagi, S. and Iino, H. Radiation from soot particles in luminous flames, **Anais do 18th International Symposium on Combustion**, Pasadena, CA, p. 288-293, 1961.