

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

ESTUDO DAS INTERAÇÕES TURBULÊNCIA-RADIAÇÃO EM CHAMAS  
TURBULENTAS NÃO PRÉ-MISTURADAS DE GÁS NATURAL DILUÍDO EM CO<sub>2</sub> E H<sub>2</sub>

por

Larissa Domingues Lemos

Tese para obtenção do Título de  
Doutora em Engenharia

Porto Alegre, Outubro de 2020.

ESTUDO DAS INTERAÇÕES TURBULÊNCIA-RADIAÇÃO EM CHAMAS  
TURBULENTAS NÃO PRÉ-MISTURADAS DE GÁS NATURAL DILUÍDO EM CO<sub>2</sub> E H<sub>2</sub>

por

Larissa Domingues Lemos

Mestre em Engenharia

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

Doutora em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Co-orientador: Prof. Dr. Felipe Roman Centeno

Aprovada por:

Prof. Dr. Luís Fernando Figueira da Silva; PUC/RJ

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, PROMEC/UFRGS

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Thamy Cristina Hayashi; DEMEC/UFRGS

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Adriane Prisco Petry; PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 2 de Outubro de 2020.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais Marco e Cristina que sempre me incentivaram a estudar e com muito amor me apoiaram para que eu pudesse concluir esta pesquisa. A minha irmã Júlia, que incansavelmente revisou artigos, assistiu a ensaios de apresentações de congressos e me ajudou a fazer a resolver as mais diversas equações. Ao meu amor, William que esteve ao meu lado em todos os momentos, sempre me ajudou a enfrentar as dificuldades e fez com que eu acreditasse em mim.

As minhas amigas da vida toda, Nathália e Lauren, que mesmo longe geograficamente sempre me apoiaram e fizeram esse caminho mais feliz.

Aos amigos que eu tive a sorte de ter como colegas de laboratório e que alegraram meus dias ao longo do doutorado, em especial Aline, que sempre me passou tranquilidade, ao Gustavo, companhia de chimarrão e de discussão sobre CFD e ao Felipe, que sempre com um jeito racional de encarar as coisas me deu os conselhos mais sensatos.

Agradeço também aos meus amigos do Laboratório de Combustão, em especial Isaías e Luís que me ajudaram diretamente no procedimento experimental, mas também ao longo dos anos vem ajudando com minhas dúvidas sobre o complexo fenômeno da combustão. Ao André agradeço pelas conversas sobre CFD e por ser uma pessoa que entendeu as minhas frustrações ao implementar casos e encontrar inúmeros erros.

Aos meus orientadores, Francis e Felipe que sempre contribuíram para meu trabalho e incentivaram o meu crescimento como pesquisadora. Ao professor Fernando que foi meu professor de combustão e me ajudou a entender diferentes modelos numéricos.

A todos os funcionários e professores do PROMEC e ao CNPq pela bolsa de estudos concedida.

## RESUMO

A determinação precisa do fluxo de calor radiativo emitido por chamas turbulentas envolve a modelagem das interações turbulência-radiação (TRI). Este trabalho apresenta a modelagem computacional de um conjunto de chamas difusivas turbulentas e analisa o impacto da modelagem da interação entre turbulência e radiação na determinação da transferência radiativa. O combustível utilizado é gás natural diluído em CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>. A cinética química é resolvida com um modelo baseado no conceito de *flamelets*, o *steady laminar diffusion flamelet* (SLDF). Para incorporar os efeitos da turbulência em *flamelets* laminares utiliza-se o método de funções densidade de probabilidade (PDFs). O fluxo de calor radiativo é calculado com o método de discretização espacial de ordenadas discretas enquanto o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) é empregado para a integração espectral. A turbulência é resolvida através da modelagem RANS, utilizando *k-ε* padrão. Duas metodologias TRI são comparadas. A primeira baseia-se na autocorrelação da temperatura e correlação entre coeficiente de absorção e temperatura, sendo o coeficiente de absorção modelado como dependente apenas da temperatura local. Na segunda abordagem, também baseada na autocorrelação da temperatura e correlação entre coeficiente de absorção e temperatura, o coeficiente de absorção é calculado considerando a dependência da temperatura local e da concentração das espécies participantes. Três soluções numéricas, considerando também o caso em que são negligenciados os efeitos TRI, são comparadas com dados experimentais para o fluxo de calor radiativo. A variância de temperatura é calculada de duas formas, na primeira utiliza-se uma equação de transporte e na segunda através do método PDF. A solução é obtida com o código ANSYS Fluent acoplado a funções definidas pelo usuário (UDFs) utilizadas para modificações do modelo WSGG e incorporação dos efeitos TRI. Os resultados indicam boa concordância entre os modelos que consideram TRI com os dados experimentais para o fluxo de calor radiativo, especialmente para o modelo que considera o coeficiente de absorção dependente da temperatura e concentrações locais.

Palavras-chave: Interações turbulência-radiação; WSGG; Combustão turbulenta; Transferência de calor por radiação; Chama gás natural/ CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>.

## ABSTRACT

An accurate computation of the radiative heat flux emitted by turbulent flames involves the modeling of turbulence-radiation interactions (TRI). This study considers a set of non-premixed turbulent flames, in which the fuel is natural gas with CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> dilution with ambient air as the oxidant. The radiative exchange is numerically solved using the weighted-sum-of-gray-gases (WSGG) gas model for the spectral integration and the discrete ordinates method for the directional integration of the radiative transfer equation (RTE). The steady laminar diffusion flamelet (SLDF) model is used to solve the chemical kinetics. To account for the turbulence-chemistry interaction, the mean scalars are calculated by a presumed probability density function (PDF) approach. Turbulence is calculated with the k-ε standard model. The impact of TRI modeling is performed employing two methodologies. Three numerical results are compared with measured experimental data for the radiative heat flux. In the first case, the radiative heat flux is obtained neglecting TRI effects. The second case is based on the correlation between the absorption coefficient and the temperature self-correlation considering that the absorption coefficient is only dependent on the mean local temperature. The third case is obtained with newly obtained correlations based on both the mean temperature and the species mole concentrations for modelling the dependency of the absorption coefficient. The temperature variance is obtained in two ways, using a transport equation and directly of PDF approach. The solution is obtained using ANSYS/Fluent code coupled with user-defined functions (UDFs) to compute RTE/WSGG/TRI formulations. The TRI models presented good agreement with experimental data, especially the new emission model.

**Keywords:** Turbulence-radiation interaction, weighted-sum-of-gray-gases, turbulent combustion, radiative heat transfer, natural gas/CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> flame.

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1	Objetivos	3
1.2	Revisão Bibliográfica	3
<b>1.2.1</b>	<b>Modelagem da Turbulência em Escoamentos Reativos</b>	<b>4</b>
<b>1.2.2</b>	<b>Estudos sobre TRI</b>	<b>6</b>
1.3	Contribuição do Trabalho	12
1.4	Organização do Trabalho	13
<b>2</b>	<b>MODELAGEM DO PROCESSO DE COMBUSTÃO TURBULENTA</b>	<b>14</b>
2.1	Equações da conservação de massa	14
2.2	Equação da conservação de energia	15
2.3	Equação do balanço da quantidade de movimento	16
2.4	Modelagem da Turbulência	18
<b>2.4.1</b>	<b>Modelagem RANS</b>	<b>18</b>
<b>2.4.2</b>	<b>Modelo <math>k-\varepsilon</math></b>	<b>18</b>
<b>2.4.3</b>	<b>Tratamento para regiões próximas às paredes</b>	<b>20</b>
2.5	Modelo <i>Steady Laminar Diffusion Flamelet</i> (SLDF)	21
<b>2.5.1</b>	<b>Fração de mistura</b>	<b>24</b>
<b>2.5.2</b>	<b>Construção da Tabela Termoquímica Laminar</b>	<b>25</b>
2.6	Incorporação dos Efeitos da Turbulência	27
<b>3</b>	<b>RADIAÇÃO TÉRMICA</b>	<b>32</b>
3.1	Corpo negro	32
3.2	Intensidade de radiação térmica	34
3.3	Intensidade de radiação em meios participantes	35
<b>3.3.1</b>	<b>Atenuação da intensidade de radiação devido à absorção</b>	<b>35</b>
<b>3.3.2</b>	<b>Aumento da intensidade de radiação devido à emissão</b>	<b>38</b>
<b>3.3.3</b>	<b>Equação de transferência radiativa</b>	<b>40</b>
3.4	Modelos espectrais do coeficiente de absorção	40
<b>3.4.1</b>	<b>Alargamento por colisão</b>	<b>41</b>
<b>3.4.2</b>	<b>Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza</b>	<b>42</b>

3.5	Modelos espaciais para solução da equação de transferência radiativa.....	45
<b>3.5.1</b>	<b>Método das ordenadas discretas – DOM .....</b>	<b>47</b>
3.6	Interação Turbulência-Radiação .....	48
<b>3.6.1</b>	<b>Modelagem considerando o efeito da temperatura .....</b>	<b>48</b>
<b>3.6.2</b>	<b>Modelagem considerando o efeito da Temperatura e das Concentrações .....</b>	<b>52</b>
<b>3.6.3</b>	<b>Modelagem utilizando modelo de combustão PDF .....</b>	<b>57</b>
<b>4</b>	<b>METODOLOGIA.....</b>	<b>58</b>
4.1	Procedimento experimental .....	58
4.2	Modelagem numérica .....	59
4.3	Estudo da qualidade de malha .....	62
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO.....</b>	<b>68</b>
5.1	Caso 1 .....	69
5.2	Caso 2 .....	79
5.3	Caso 3 .....	88
5.4	Estudo do Caso 1 empregando o campo de variância de temperatura obtido da abordagem PDF .....	97
	<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>109</b>
5.5	Propostas para trabalhos futuros .....	111
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>113</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Estruturas microscópicas em uma chama multidimensional [adaptada de Van Oijen, 2014].	21
Figura 2.2 – Grandeza das escalas em um escoamento reativo turbulento [Deon, 2016].	22
Figura 2.3 – Configuração de chama difusiva tipo contracorrente [Hoerlle, 2015].	23
Figura 2.4 – Esquema de uma chama não pré-misturada turbulenta [Deon, 2016].	25
Figura 2.5 – Esquema de solução dos <i>flamelets</i> laminares e armazenamento dos escalares reativos [Deon, 2016].	27
Figura 2.6 – Esquema gráfico da função densidade de probabilidade adaptada [Tennekes e Lumley, 1972].	27
Figura 3.1 – Emissão da radiação por uma área diferencial $dA$ de um ângulo sólido $d\omega$ [Adaptado de Incropera e De Witt, 2008].	34
Figura 3.2 – Intensidade incidente sobre um elemento de espessura $dS$ que absorve e espalha [Adaptado de Siegel e Howell, 2002].	36
Figura 3.3 – Geometria esférica para dedução do aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante [Adaptado de Siegel e Howell, 2002].	39
Figura 3.4 – Coeficiente de absorção baseado na pressão em três temperaturas de $CO_2$ .	41
Figura 3.5 – Representação de três gases cinzas para um meio participante [Mauren et al. 2008].	42
Figura 4.1 – Descrição do experimento.	59
Figura 4.2 – Fluxograma com etapas empregadas na solução do problema.	61
Figura 4.3 – Domínio computacional dos Casos 1 e 2.	62
Figura 4.4 – Domínio computacional do Caso 3.	63
Figura 4.5 – Divisão dos volumes de controle no refinamento da malha.	65
Figura 5.1 – Linhas utilizadas para avaliação dos resultados.	68
Figura 5.2 – (a) Contorno de temperatura; (b) Contorno de fração de mistura; (c) Vetores de velocidade; (d) Contorno <i>rms</i> da flutuação de temperatura.	70
Figura 5.3 – Temperatura na linha de centro.	71
Figura 5.4 – Resultados numéricos para temperatura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m.	72



Figura 5.5 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m.....	73
Figura 5.6 – Resultados numéricos para velocidade em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	74
Figura 5.7 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição. ....	75
Figura 5.8 – Contorno de (a) $\alpha_{TRI}$ ; (b) $\alpha_{TRII}$ ; (c) $\alpha_{TRIZ}$ . ....	78
Figura 5.9 – Contorno de (a) $\beta_{TRI}$ ; (b) $\beta_{TRII}$ ; (c) $\beta_{TRIZ}$ . ....	78
Figura 5.10 – (a) Contorno de temperatura; (b) Contorno de fração de mistura; (c) Vetores de velocidade; (d) Contorno <i>rms</i> da flutuação de temperatura. ....	80
Figura 5.11 – Temperatura na linha de centro.....	81
Figura 5.12 – Resultados numéricos para temperatura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	82
Figura 5.13 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m.....	83
Figura 5.14 – Resultados numéricos para velocidade em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	84
Figura 5.15 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição. ....	85
Figura 5.16 – Contorno de (a) $\alpha_{TRI}$ ; (b) $\alpha_{TRII}$ ; (c) $\alpha_{TRIZ}$ . ....	87
Figura 5.17 – Contorno de (a) $\beta_{TRI}$ ; (b) $\beta_{TRII}$ ; (c) $\beta_{TRIZ}$ . ....	87
Figura 5.18 – (a) Contorno de temperatura; (b) Contorno de fração de mistura; (c) Vetores de velocidade; (d) Contorno <i>rms</i> da variância de temperatura.....	89
Figura 5.19 – Temperatura na linha de centro.....	90
Figura 5.20 – Resultados numéricos para temperatura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	91
Figura 5.21 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a) $x = 0,55$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	92
Figura 5.22 – Resultados numéricos para velocidade em (a) $x = 0,55$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	93
Figura 5.23 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição. ....	94
Figura 5.24 – Fotografias da chama estudada no Caso 3, Quezada, 2018. ....	95
Figura 5.25 – Contorno de (a) $\alpha_{TRI}$ ; (b) $\alpha_{TRII}$ ; (c) $\alpha_{TRIZ}$ . ....	96
Figura 5.26 – Contorno de (a) $\beta_{TRI}$ ; (b) $\beta_{TRII}$ ; (c) $\beta_{TRIZ}$ . ....	96

Figura 5.27 – (a) Contorno <i>rms</i> da variância de temperatura; (b) Contorno <i>rms</i> da variância de temperatura obtido com abordagem PDF. ....	98
Figura 5.28 – Temperatura na linha de centro. ....	99
Figura 5.29 – Resultados numéricos para temperatura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	100
Figura 5.30 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	101
Figura 5.31 – Resultados numéricos para velocidade em (a) $x = 0,5$ m; (b) $x = 0,65$ m; (c) $x = 0,85$ m; (d) $x = 1,05$ m. ....	102
Figura 5.32 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição. ....	103
Figura 5.33 – Contorno de (a) $\alpha_{TRI}$ ; (b) $\alpha_{TRI1}$ ; (c) $\alpha_{TRI2}$ . ....	105
Figura 5.34 – Contorno de (a) $\beta_{TRI}$ ; (b) $\beta_{TRI1}$ ; (c) $\beta_{TRI2}$ . ....	105
Figura 5.35 – Temperatura na linha de centro. ....	106
Figura 5.36 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição. ....	107
Figura 5.37 – Termo de emissão calculado em cada abordagem com mesma escala para cada caso (a) $emi- TRI(T)-Tpdf$ , (b) $emi- TRI(X,T)-Tpdf$ , (c) $emi- TRI(T)$ , (d) $emi- TRI(X,T)$ . ....	108
Figura 5.38 – Termo de emissão calculado em cada abordagem com escala original (a) $emi- TRI(T)-Tpdf$ , (b) $emi- TRI(X,T)-Tpdf$ , (c) $emi- TRI(T)$ , (d) $emi- TRI(X,T)$ . ....	108

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$ [Dorigon et al., 2013].....	45
Tabela 3.2 – Constantes do modelo proposto por Fraga et al., 2020b.....	57
Tabela 4.1 – Quantidade de pontos para cada variável de controle nas tabelas termoquímicas para armazenamento dos escalares reativos .....	60
Tabela 4.2 – Resumo estudo da qualidade de malha.....	66
Tabela 4.3 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo obtido com diferente discretização angular .....	67
Tabela 5.1 – Temperatura máxima em cada caso.....	70
Tabela 5.2 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo experimental e numérico.....	75
Tabela 5.3 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica.....	76
Tabela 5.4 – Temperatura máxima em cada caso.....	81
Tabela 5.5 – Desvio médio entre o fluxo de calor radiativo experimental e numérico.....	85
Tabela 5.6 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica.....	86
Tabela 5.7 – Temperatura máxima em cada caso.....	90
Tabela 5.8 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo experimental e numérico.....	94
Tabela 5.9 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica.....	95
Tabela 5.10 – Temperatura máxima em cada caso.....	99
Tabela 5.11 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo experimental e numérico.....	103
Tabela 5.12 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica.....	104

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CFD	Dinâmica de fluídos computacional
DNS	Simulação numérica direta
DOM	Método de ordenadas discretas
SLDF	Modelo <i>flamelets</i> laminares
RTE	Equação da transferência radiativa
LBL	Modelo linha-por-linha
LES	Simulação de grandes escalas
OTFA	Aproximação da flutuação opticamente fina
PDF	Função densidade de probabilidade
RANS	Modelagem da turbulência com médias de Reynolds
TRI	Interação turbulência-radiação
WSGG	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza

## LISTA DE SIMBOLOS

$A$	Área, $m^2$
$a_j$	Coefficiente de ponderação do gás $j$ no modelo WSGG
$b_j$	Coefficiente polinomial no modelo WSGG
$C_{TRI1}$	Constante do modelo de cálculo das interações TRI
$C_{TRI2}$	Constante do modelo de cálculo das interações TRI
$D$	Diâmetro
$dA$	Elemento de área, $m^2$
$dv$	Elemento de volume, $m^3$
$d\omega$	Elemento de ângulos sólido, $sr$
$H$	Entalpia, $kJ \cdot kg^{-1}$
$h^0$	Entalpia de formação, $kJ \cdot kg^{-1}$
$\bar{h}^0$	Entalpia molar de formação na temperatura de referência, $kJ \cdot kg^{-1}$
$I$	Intensidade de radiação, $W \cdot m^{-2} \cdot sr^{-1}$
$K$	Coefficiente de extinção, $m^{-1}$
$k$	Energia cinética turbulenta, $m^2 \cdot s^{-2}$
$Le$	Número de Lewis
$N_G$	Número de gases cinza considerados no modelo WSGG
$Nu$	Número de Nusselt
$P$	Pressão, Pa
$P_{CO_2}$	Pressão parcial de $CO_2$ , atm
$P_{H_2O}$	Pressão parcial de $H_2O$ , atm
$P_k$	Termo de produção ou dissipação da energia cinética turbulenta, $W \cdot m^{-3}$
$Pr$	Número de Prandtl
$Pr_t$	Número de Prandtl turbulento
$q_R''$	Fluxo de calor, $W/m^2$
$S_{Rad}$	Termo fonte de calor radiativo, $W/m^3$
$\bar{s}^h$	Termo fonte da equação da conservação da energia, $W/m^3$

$q_i$	Irradiação, W/m <sup>2</sup>
T	Temperatura, K
$\overline{T'^2}$	Variância da flutuação da temperatura, K <sup>2</sup>
u	Vetor velocidade, m/s
V	Volume, m <sup>3</sup>
X	Fração molar
X <sub>R</sub>	Fração radiante
Y	Fração mássica
$y_\alpha$	Fração mássica da espécie $\alpha$ , kg <sub><math>\alpha</math></sub> · kg <sub>tot</sub> <sup>-1</sup>
W	Peso das quadraturas no método DOM
Z	Fração de mistura

## SÍMBOLOS GREGOS

$\alpha$	Absortividade
$\delta$	Desvio percentual entre resultados distintos
$\delta$	Função Delta de Dirac
$\varepsilon$	Emissividade
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
$\lambda$	Comprimento de onda, $\mu\text{m}$
$\Phi$	Variável genérica
$\kappa$	Coefficiente de absorção, $\text{m}^{-1}$
$\kappa_j$	Coefficiente de absorção do gás $j$ no modelo WSGG, $\text{m}^{-1}$
$\mu$	Viscosidade dinâmica
$\mu_t$	Viscosidade turbulenta
$\xi$	Variável genérica dependente do tempo
$\rho$	Massa específica da mistura
$\omega$	Ângulo sólido, sr.
$\chi$	Taxa de dissipação do escalar fração de mistura

## SUBÍNDICES

<i>A</i>	Espécies do processo de combustão
<i>B</i>	Corpo negro
<i>TRI, nonTRI</i>	Resultado incluindo TRI e desprezando as interações TRI
<i>I</i>	Radiação Incidente
<i>J</i>	Cada gás cinza no modelo WSGG
Máx	Valor máximo
TRI	Interação turbulência-radiação



## 1 INTRODUÇÃO

Combustão turbulenta está presente em diversas aplicações industriais, como turbinas a gás, fornos, caldeiras, motores de foguetes, em diferentes tipos de queimadores, motores de combustão interna, entre outras. A turbulência promove a mistura dos reagentes, favorece o transporte de calor e com isso intensifica a combustão. A radiação térmica possui papel importante na modelagem da combustão. A transferência de calor por radiação influencia diretamente na temperatura da chama, que por sua vez influencia na cinética das reações químicas e no campo de velocidades. Portanto, à medida que a turbulência promove o aumento de temperatura da chama, a perda de calor por radiação promove a redução na temperatura da chama e a combinação entre estes fenômenos é estudada na interação turbulência-radiação. A interação entre turbulência e radiação (TRI) pode aumentar significativamente a emissão radiativa de uma chama, em até 60 % segundo Li e Modest, 2002a. Dessa forma, a determinação da temperatura e do fluxo de calor radiativo de uma chama turbulenta envolve a modelagem TRI [Coelho, 2004; Modest, 2003].

As chamas turbulentas não pré-misturadas são mais comuns devido ao maior controle do processo de combustão quando comparado com chamas pré-misturadas. Neste trabalho, é escolhido um conjunto de chamas difusivas para estudar os impactos da modelagem TRI sobre o fluxo de calor radiativo emitido pela chama, sobre a temperatura, concentrações das espécies químicas e velocidade. Sendo este um problema complexo, envolvendo efeitos altamente não lineares, a solução envolve diferentes modelos acoplados, que necessitam ser avaliados em conjunto por não ser possível, em geral, dissociar seus efeitos e incertezas em cálculos globais.

Neste trabalho, cinética química é resolvida com o modelo *steady laminar diffusion flamelet* (SLDF), formalizado por Peters, 1984. O modelo *flamelet* considera a chama multidimensional como um grupo de estruturas de chamas laminares quase unidimensionais denominadas “*flamelets*”. Cada *flamelet* é submetido às condições locais do escoamento, resultando em sua convecção e estiramento, mas mantendo a estrutura interna. Dessa forma, a estrutura laminar dos flamelets pode ser previamente calculada e então tabulada em um banco de dados contendo os escalares reativos mais importantes, parametrizados por um pequeno número de variáveis de controle. Esta metodologia é capaz de fornecer resultados precisos em comparação com dados experimentais [Emami e Fard, 2012].

A modelagem da turbulência é realizada com base nas equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds (RANS - *Reynolds-average Navier-Stokes*). Mesmo com metodologias mais avançadas, como a simulação de grandes escalas (LES - *large eddy simulation*), a abordagem RANS ainda continua amplamente empregada, principalmente em aplicações de engenharia. Isso se deve à relativa facilidade de implementação e robustez. Neste trabalho, o modelo de fechamento utilizado é o  $k-\varepsilon$  padrão, que apresenta resultados precisos para uma chama difusiva do tipo jato [Yang et al., 2019; Sukirt et al., 2019].

As simulações de escoamentos turbulentos reativos não podem ser satisfatoriamente computadas com os campos médios dos escalares, o que estabelece a necessidade de modelos que considerem o efeito de suas flutuações. A função de densidade de probabilidade (PDF) fornece resultados confiáveis em problemas de combustão [Ziani, et al., 2013]. A vantagem dos modelos PDF é a dependência da função de probabilidade com as flutuações reais. Neste modelo, a média e a variância são os parâmetros-chave da função de probabilidade. Os efeitos de turbulência são incorporados nos *flamelets* laminares através de PDFs.

A radiação térmica, principal objeto deste estudo, pode dominar a transferência de calor em uma chama, o que requer o emprego de métodos precisos para se obterem resultados satisfatórios para o termo fonte radiativo e, conseqüentemente, temperatura de chama e demais parâmetros. A radiação térmica em gases de combustão possui dependência altamente complexa com o comprimento de onda, com a dificuldade adicional da intensa não-homogeneidade dos campos de temperatura e concentrações de espécies. Além disso, a radiação térmica envolve propagação direcional no espaço, o que requer ferramentas específicas de análise, como o ângulo sólido.

O modelo espectral empregado neste trabalho é o da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG- *weighted-sum-of-gray-gases*), enquanto o modelo direcional escolhido é o método das ordenadas discretas (DOM - *discrete ordinates method*). O modelo WSGG considera que o espectro possa ser dividido em um certo número de gases cinzentos com coeficiente de absorção constantes com a adição, além de janela transparentes. Esta combinação apresentou resultados precisos em trabalhos recentes [por exemplo, em Yi et al., 2017; Fonseca et al., 2018; Coelho e França, 2018].

A equação da transferência radiativa (RTE- *radiative transfer equation*) pode ser perfeitamente aplicável às quantidades instantâneas do transporte turbulento, enquanto o modelo de turbulência (RANS) empregado no presente estudo fornece apenas quantidades médias. Desta forma, para analisar a influência do TRI é necessário decompor as variáveis em

componentes médios e flutuantes que requerem modelagem para resolver o problema do fechamento [Coelho, 2007]. Neste trabalho, duas modelagens são utilizadas. A primeira, proposta por Snegirev, 2004, considera a correlação combinada entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação da temperatura. Ao modelar a correlação entre coeficiente de absorção e temperatura, considera-se apenas a dependência do coeficiente de absorção com a temperatura, negligenciando assim a dependência com a concentração das espécies participantes. A segunda modelagem, recentemente proposta em Fraga et al., 2020b, considera a autocorrelação de temperatura e a correlação entre coeficiente de absorção e temperatura. Neste modelo, a dependência do coeficiente de absorção com a temperatura e concentrações das espécies participantes é levada em consideração. Os resultados numéricos são comparados com resultados experimentais para fluxo de calor radiativo a fim de analisar o desempenho de cada modelagem.

## **1.1 Objetivos**

O principal objetivo desta pesquisa é analisar numericamente o impacto da interação turbulência-radiação em chamas difusivas turbulentas de gás natural,  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2$ . Sendo a combustão turbulenta um fenômeno de alta complexidade, diversas modelagens serão realizadas a fim de se obterem resultados satisfatórios.

Para realizar a análise numérica, os objetivos consistem em comparar os resultados de quatro diferentes modelagens para temperatura, fração de mistura e velocidade em quatro linhas radiais e na linha central do domínio estudado.

No estudo do fluxo de calor radiativo, busca-se a composição adequada para a medição experimental, com características específicas que se adequam a modelagem numérica.

Por fim, o resultado obtido para fluxo de calor radiativo em três diferentes modelagens é comparado com dados experimentais. Com os resultados de cada caso é possível avaliar o impacto das diferentes modelagens em três chamas diferentes.

## **1.2 Revisão Bibliográfica**

Ao considerar a complexidade dos fenômenos envolvidos em uma chama turbulenta, resolver as equações para o escoamento, a turbulência, a cinética química e a radiação térmica

é inviável. Dessa forma, a fim de se estabelecerem as metodologias que conduzem a resultados satisfatórios, nesta seção são discutidos os principais estudos na literatura focados no tema desta pesquisa.

### **1.2.1 Modelagem da Turbulência em escoamentos Reativos**

Escoamentos turbulentos estão presentes em diversas aplicações de engenharia. Os modelos de fechamento da turbulência tornam-se necessários com a aplicação da média de Reynolds às equações de Navier-Stokes, inevitavelmente introduzindo incertezas na solução do problema.

A presença da turbulência na combustão introduz uma nova dificuldade à modelagem. A mistura entre combustível e oxidante acontece em nível molecular, em uma escala muito menor que escalas das estruturas da turbulência. Assim, ao mesmo tempo que a turbulência promove a mistura entre os reagentes, em geral, as reações se dão apenas entre os menores vórtices do escoamento. Os escoamentos turbulentos caracterizam-se por ter um comportamento difusivo, dissipativo, aleatório, tridimensional e transiente [Tennekes e Lumley, 1972]. Estima-se que a solução das diversas escalas dos escoamentos turbulentos reativos apenas se consolide em algumas décadas [Pope, 2013].

Na simulação numérica direta (DNS), as equações de conservação de quantidade de movimento, massa, energia e concentrações são resolvidas em todas as escalas do escoamento. A discretização espacial e temporal deve ser suficientemente fina para capturar todas as escalas dos fenômenos físicos [Silva Freire et al., 2002]. Com isso, a solução numérica se torna pouco viável na solução de problemas mais complexos, mesmo com os recursos computacionais atuais, se restringindo a problemas com baixos números de Reynolds [Coelho, 2002].

O primeiro trabalho utilizando DNS para um estudo TRI foi apresentado por Wu et al., 2005. No estudo, uma chama turbulenta pré-misturada foi modelada como unidimensional; utilizou-se o mecanismo de reação de um passo; e a radiação térmica foi calculada com o método de Monte Carlo, considerando o meio participante como cinza.

Ainda que existam limitações computacionais, a abordagem DNS não utiliza aproximações e assim é a metodologia que melhor reproduz o fenômeno físico. Diante das dificuldades computacionais, Smagorinsky, 1963, utilizou a ideia de decomposição das escalas de Reynolds para propor uma modelagem em que, ao invés de se separarem as médias

e flutuações, há a separação das altas frequências das baixas frequências, utilizando um processo de filtragem.

Na simulação de grandes escalas (LES) as equações governantes passam por uma filtragem espacial, de forma que as grandes e pequenas escalas da energia cinética do escoamento são separadas nas equações governantes de Navier-Stokes. Assim, as estruturas turbulentas que transportam energia e quantidade de movimento, classificadas como grandes escalas, são resolvidas diretamente das equações, enquanto as menores estruturas, chamadas de sub-malha, são modeladas [Silva Freire et al., 2002].

O método LES apresenta-se como uma opção intermediária entre RANS e DNS. Com este método, é possível superar algumas limitações da abordagem RANS, pois é resolvido diretamente o campo transiente e tridimensional do escoamento até uma escala de comprimento que é viável à capacidade computacional, apenas modelando as escalas menores. Considera-se que as menores estruturas tendem a ser mais homogêneas e isotrópicas, justificando sua modelagem.

Para problemas de combustão mais complexos, ainda deve-se considerar que a cinética química ocorre em escalas menores que a menor escala do campo do escoamento e não há como separá-la em escalas de magnitudes distintas, apresentando uma dificuldade a ser considerada.

Em Gupta et al., 2013, foi aplicada a modelagem LES (*Large-Eddy Simulation*) com o modelo de transporte da função PDF para solução do escoamento com combustão, acoplados ao método de Monte Carlo para solução da RTE, utilizando o método linha-por-linha para a integração espectral da radiação. A chama utilizada para esta implementação foi a Sandia D. A partir dela, foram construídas outras três chamas aplicando um fator de escala e uma correlação para inclusão de fuligem numérica. A modelagem LES, no contexto TRI, pode ser encontrada também em Roger et al., 2011, Snegirev et al., 2017, Miranda et al., 2019.

A modelagem da turbulência baseada nas equações de Navier-Stokes em médias de Reynolds (RANS - *Reynolds-Average Navier-Stokes*) ainda encontra amplo emprego, devido à facilidade de implementação e de convergência numérica de diferentes problemas. Emami e Fard, 2012, empregaram o modelo  $k-\varepsilon$  padrão com a constante  $C_{\varepsilon-1}$  modificada de 1,44 para 1,6, proposto por Pope, 1978 e Morse, 1980, com um modelo de *flamelets* transientes. O trabalho apresenta boa concordância com as medições experimentais, utilizando redes neurais, para os valores médios de temperatura, fração de mistura e fração mássica das espécies em uma chama turbulenta não pré-misturada de  $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ .

No trabalho de Deon, 2016, apresenta-se uma comparação de diferentes modelos RANS: o  $k-\varepsilon$  padrão (empregado na sua versão original e com mais duas modificações nas suas constantes), o  $k-\varepsilon$  *realizable*, o  $k-\omega$  padrão e o  $k-\omega$  *shear-stress transport* na solução de um jato turbulento de propano, não reativo e isotérmico, circundado por uma corrente paralela de ar. A comparação entre os modelos RANS considerou a eficiência na predição dos valores médios da velocidade longitudinal e transversal, fração mássica de propano e massa específica da mistura. Um dos modelos de melhor desempenho foi o  $k-\varepsilon$  padrão, também com a constante  $C_{\varepsilon-1}$  modificada; com este modelo, foi simulada a chama DLR-A com modelos para simplificação da cinética química baseados no conceito de *flamelets*, comparando SLDF e FGM (*flamelet-generated manifold*). Na solução da radiação térmica, empregou-se o modelo WSGG combinado ao DTRM (*discrete transfer radiation model*).

No contexto de estudos TRI, em Yang et al., 2019, foi analisado o efeito da transferência de calor por radiação em um processo de oxi-combustão. O modelo de turbulência empregado foi  $k-\varepsilon$  padrão, também com a constante  $C_{\varepsilon-1}$  modificada. Para modelar a radiação térmica foi utilizado WSGG e os efeitos TRI foram avaliados no termo de emissão seguindo a proposta de Snegirev, 2004. Os resultados indicaram que os efeitos TRI impactaram o campo de temperatura e o fluxo de calor radiativo nas paredes. O aumento do fluxo de calor radiativo chegou a 45% em um dos casos considerados.

No trabalho de Sukirt et al., 2019, a modelagem RANS foi empregada em uma chama turbulenta difusiva. Os modelos espectrais empregados para radiação térmica foram WSGG e SLW (*spectral-line WSGG*). Um estudo comparativo entre modelos de turbulência, entre  $k-\varepsilon$  padrão,  $k-\varepsilon$  padrão modificado (constante  $C_{\varepsilon-1}$  de 1,44 para 1,6),  $k-\varepsilon$  *realizable* e *Reynolds stress model* indicou que o modelo  $k-\varepsilon$  padrão modificado apresentou os resultados com maior concordância com dados experimentais. A análise TRI foi empregada no termo de emissão, seguindo a proposta de Snegirev, 2004. O efeito TRI apresentou maior evidência quando empregado com o modelo SLW.

### 1.2.2 Estudos sobre TRI

Em escoamentos reativos turbulentos, os campos de concentração de espécies e de temperatura estão submetidos a flutuações, o que gera flutuações no fluxo de calor radiativo. Sendo os fenômenos dependentes entre si, não é possível tratá-los separadamente. Esta seção

apresenta trabalhos que evidenciam a importância do TRI no estudo de escoamentos e chamas turbulentas.

O primeiro estudo sobre as interações TRI [Foster, 1969] mostrou que as propriedades radiativas de uma chama turbulenta estariam incorretas se as flutuações turbulentas fossem negligenciadas, sendo estes resultados confirmados experimentalmente [Amin e Foster, 1973].

Germano, 1978, publicou o primeiro trabalho numérico sobre as interações TRI, baseando-se na hipótese de que as flutuações de temperatura e concentrações de espécies eram aleatórias e que o meio participante era cinza.

Kabashnikov e Kmit, 1979, introduziram a modelagem da flutuação opticamente fina (*optically thin fluctuation approximation* – OTFA), ainda muito utilizada atualmente. Eles estudaram os efeitos combinados das flutuações do coeficiente de absorção e da temperatura sobre a radiação e introduziram a hipótese OFTA, que assume que o livre caminho médio da radiação é muito maior do que a escala integral do escoamento turbulento.

Em Coelho, 2002, a intensidade de radiação total média foi determinada usando o modelo *spectral-line-weighted-sum-of-gray-gases* - SLW para contabilizar as propriedades radiativas dos gases participantes e foram utilizadas duas abordagens para avaliar TRI. A primeira metodologia, considerada a solução exata, utilizou um modelo estocástico; os valores médios das propriedades radiativas foram obtidos a partir da solução instantânea da RTE. A segunda abordagem utiliza a RTE média no tempo e avalia as correlações TRI (sendo elas, a autocorrelação do coeficiente de absorção, a correlação entre coeficiente de absorção e temperatura e autocorrelação de temperatura). Ao desconsiderar completamente os efeitos TRI a intensidade da radiação foi subestimada; ao avaliar somente a influência das flutuações de temperatura os resultados indicaram que a intensidade da radiação foi superestimada.

Segundo Coelho, 2004, a intensidade de radiação total média foi calculada e comparada com os resultados das mesmas abordagens do trabalho de 2002 para o cálculo das interações TRI, porém as propriedades radiativas do meio foram calculadas usando os modelos *statistical narrow band* - SNB e *correlated-k* - CK. Os resultados seguiram a mesma tendência daqueles apresentados em Coelho, 2002.

Li e Modest, 2002a, aplicaram o método *composition probability density function* - *composition PDF*), no qual as concentrações das espécies e a temperatura são tratadas como variáveis estatísticas para estudar os efeitos das interações TRI. Segundo os autores este método permite que termos não-fechados resultantes do processo de médias de Reynolds na

RTE possam ser calculados de forma exata e os outros podem ser modelados usando a hipótese OTFA. As propriedades radiativas dos gases foram obtidas com o modelo (*full-spectrum correlated-k* - FSCK). Os cálculos indicaram que ocorria aumento dos fluxos radiativos nas paredes como um resultado das interações TRI, e que a desconsideração das interações TRI conduzia a valores subestimados para a transferência de calor por radiação, fazendo com que os níveis de temperatura dentro da câmara fossem superestimados.

Li e Modest, 2002b, aplicaram novamente o método *composition* PDF com o objetivo de verificar a importância das interações TRI em chamas turbulentas e quais seriam as principais correlações que deveriam ser consideradas nas simulações. A chama estudada foi a Sandia D, uma chama de metano-ar com dados experimentais detalhados. Naquele trabalho foram propostos fatores de multiplicação para simular chamas com espessuras ópticas maiores. Os resultados apresentaram a mesma tendência do trabalho anterior [Li e Modest, 2002a].

A chama Sandia D foi estudada também por Coelho et al., 2003, o modelo de turbulência foi o *Reynolds stress model* – RSM. Foi utilizada a aproximação OTFA, a radiação térmica foi modelada com o método de ordenadas discretas e o modelo espectral SLW tratando o meio como cinza e não-cinza. A influência das interações TRI sobre a transferência de calor radiativa foi investigada considerando-as através somente da autocorrelação de temperatura ou de forma completa, considerando ambos os termos de autocorrelação do coeficiente de absorção e correlação entre coeficiente de absorção e função de Planck. Entre as conclusões, a evidência da natureza espectral da radiação que deve ser considerada para obter um resultado preciso da transferência de calor por radiação. A interação TRI aumentou a transferência radiativa por um fator de aproximadamente 30 % para chama estudada, independente da consideração de interação apenas da autocorrelação da temperatura ou completa.

Snegirev, 2004, utilizando o método de Monte Carlo, um método estatístico, para transferência de calor radiativa na modelagem de chamas difusivas turbulentas, considerou um mecanismo de cinética química de combustão com três etapas, incluindo fuligem. As equações de transporte foram resolvidas na forma média de Favre, utilizando para fechamento o modelo  $k-\varepsilon$  padrão. O autor considerou o efeito das interações TRI no cálculo da emissão de radiação (para a absorção, foi considerada a hipótese OTFA), permitindo a consideração da autocorrelação de temperatura e a correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura. Os resultados da modelagem das chamas mostraram boa concordância quando comparados



com dados experimentais; a importância de considerar as interações TRI foi evidenciada através da melhoria dos resultados obtidos para a fração radiante, a qual possuía valores experimentais para ser comparada. Os resultados obtidos em Snegirev, 2004, são empregados neste trabalho e comparados com outro modelo para termo de emissão da RTE e com dados experimentais para o fluxo de calor radiativo.

De acordo com a revisão realizada por Coelho, 2007 sobre a literatura em TRI, entende-se que a maioria dos trabalhos que estudam as interações TRI está baseada na hipótese OTFA, a qual considera que as flutuações do coeficiente de absorção não são correlacionadas com as flutuações da intensidade de radiação. Entretanto, existe uma faixa de espessuras ópticas intermediárias, em que a espessura óptica,  $\tau_\eta$ , não é  $\tau_\eta \gg 1$  e também não é  $\tau_\eta \ll 1$ . Nesse caso, os vórtices turbulentos não são nem opticamente finos, nem opticamente espessos, na qual a hipótese OTFA não seria satisfatória.

Estudos numéricos foram apresentados em Habibi et al., 2007a, e 2007b, avaliando as interações TRI em simulações RANS da chama difusiva não-luminosa Sydney HM1 e da chama Sandia D. O modelo RSM foi utilizado para a turbulência e a cinética química através de *flamelets* laminares, considerando a aproximação de escalar conservado com função PDF para a interação entre turbulência e cinética química. A radiação térmica foi resolvida com o método de ordenadas discretas em combinação com o modelo WSGG para solução da RTE. Foram analisados casos negligenciando as interações TRI, considerando somente a autocorrelação do coeficiente de absorção, contabilizando somente a autocorrelação de temperatura, considerando a autocorrelação do coeficiente de absorção e a autocorrelação de temperatura sem considerar a correlação cruzada entre elas, e por fim contabilizando a correlação cruzada entre o coeficiente de absorção e a temperatura. Os autores entenderam que a radiação não afeta a estrutura da chama, no sentido de que os campos de velocidades, temperaturas e concentrações de espécies são muito pouco afetados mesmo com a inclusão das interações TRI, obtendo o resultado da diminuição na temperatura média em regiões de alta temperatura, concluindo que a emissão é o processo dominante nas chamas opticamente finas.

Gupta et al., 2013, utilizaram a modelagem LES juntamente com a função PDF para solução do escoamento com combustão, acoplados a um método de Monte Carlo para solução da RTE, e a integração LBL (*line-by-line*) para solução espectral. A chama estudada foi a Sandia D, assim como em outras três chamas construídas a partir dela, aplicando uma correlação para inclusão de fuligem, criando assim chamas artificiais com efeitos radiativos

que podem ser estudados, uma vez que a fração radiativa da chama Sandia D é somente de aproximadamente 5%. Conforme reportado em outros trabalhos [Li e Modest, 2002a e 2002b] os resultados mostraram que os termos mais importantes são a correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura e a autocorrelação de temperatura. Outro resultado apresentado neste trabalho é o termo absorção TRI ser mais importante em meios opticamente espessos.

O trabalho proposto por Centeno et al., 2016, analisa o TRI em uma chama de metano em uma câmara de combustão. A modelagem da turbulência foi realizada com  $k-\varepsilon$  padrão. O modelo de combustão utilizado foi o EBU- Arrhenius com reação de combustão em duas etapas. O modelo de turbulência utilizado foi  $k-\varepsilon$  padrão. A modelagem do TRI foi baseada no trabalho de Snegirev, 2004, o modelo espectral utilizado foi o WSGG. O modelo linha-por-linha também foi empregado no cálculo do termo fonte radiativo, mas em simulações desacopladas entre a radiação e a dinâmica de fluidos computacional, para avaliar os modelos WSGG e de gás cinza. Os resultados obtidos com o modelo WSGG apresentaram uma melhor concordância com os dados experimentais; o efeito do TRI melhorou ainda mais esta concordância.

Yi et al., 2017, analisaram a influência do TRI na combustão turbulenta de metano sob  $O_2/CO_2$ , seguindo o trabalho proposto por Centeno et al., 2016. Foram comparados resultados com os modelos espectrais WSGG e gás cinza. A modelagem da turbulência foi realizada com o  $k-\varepsilon$  padrão e a cinética química com o EBU - Arrhenius. A correlação entre o coeficiente de absorção e a temperatura seguiu a proposta de Snegirev, 2004. Os resultados foram comparados com os obtidos em Centeno et al., 2016 com boa concordância, validando sua metodologia. Os resultados mais distantes do experimental foram, em ordem, negligenciando a radiação térmica, com a modelagem espectral do gás cinza negligenciando TRI. Mesmo com a modelagem do gás cinza considerando TRI os resultados não foram satisfatórios; apenas com o modelo WSGG, especialmente considerando TRI, houve boa concordância.

Fraga et al., 2017, estudaram a influência do TRI em um escoamento não reativo com escoamento em alta temperatura. A partir da modelagem da turbulência com LES, foram obtidos dados transientes para comparação com simulação independente inicializada com campos de temperatura e escoamentos médios. Os modelos espectrais de gás cinza e WSGG foram utilizados na avaliação da transferência de calor radiativa; em ambos os casos; houve impacto no fluxo de calor radiativo e no termo fonte radiativo, mas foram consideravelmente maiores com a modelagem WSGG.

Krishnamoorthy e Rahman, 2018 realizaram uma análise estatística a partir da

comparação com medições experimentais das propriedades radiativas de quatro chamas de oxcombustível, de  $\text{CH}_4/\text{H}_2$ , e construíram, através de curvas de ajuste, uma relação para autocorrelação de temperatura. Esta correlação foi invariante frente ao enriquecimento de hidrogênio no combustível e com o número de Reynolds da saída do jato de combustível. A autocorrelação de temperatura e a correlação cruzada entre coeficiente de absorção e temperatura foram modeladas em termos da temperatura RMS (*root-mean-square*). Com as correlações obtidas os efeitos do TRI geraram um aumento em 40 % da fração radiante e redução da concentração de saída de CO em 30 %. Os resultados indicaram ainda que há considerável absorção na chama devido a altas concentrações dos gases participantes na transferência de calor radiativa, o que conduz a erros na modelagem OFTA para estas chamas.

No trabalho de Ren et al., 2018 foram consideradas as interações turbulência-radiação e turbulência-cinética química, TCI (*turbulence-chemistry interactions*). O método utilizado foi o *Presumed* PDF. A radiação foi resolvida com um método baseado em Monte Carlo e a parte espectral com o linha-por-linha. Com o *Presumed* PDF foi resolvida a fração de mistura, a taxa de dissipação escalar e a entalpia para contabilizar os efeitos do TRI. A metodologia de inclusão do TRI nos métodos Monte Carlo e linha-por-linha foi validada com o método linha-por-linha unidimensional considerado exato. A chama utilizada para avaliar os resultados foi a Sandia D.

O estudo de uma chama turbulenta não pré-misturada de  $\text{CH}_4/\text{H}_2$  [Yang et al., 2018], em uma câmara de combustão, considerando pressões atmosféricas e elevadas mostrou que considerar os efeitos do TRI conduz a resultados mais próximos dos dados experimentais. A análise numérica da inclusão da perda de calor por radiação indica redução da temperatura da chama em cerca de 60 K até 140 K. Ao considerar o TRI, o termo fonte radiativo é maior do que aquele sem TRI, o que leva a uma diminuição da temperatura em cerca de 13 K até 60 K. A inclusão do TRI aumenta a perda líquida de calor radiativo em cerca de 50% à pressão elevada. O modelo empregado para contabilizar os efeitos do TRI nas simulações RANS foi proposto inicialmente por Snegirev, 2004. A formulação também utilizada em Centeno et al., 2016, Yi et al., 2018 e empregada neste trabalho para uma comparação entre as metodologias TRI.

Um estudo comparativo foi apresentado em Fraga et al., 2020a, para analisar TRI na escala sub-malha, no contexto de simulações LES, em simulações acopladas e desacopladas para chama Sandia D. Diferentes abordagens TRI foram empregadas, entre elas a proposta de Snegirev, 2004, concluindo que a variância de temperatura, quando estimada com maior

precisão, conduz a uma maior contribuição da correlação de temperatura.

O trabalho de Fraga et al., 2020b, propôs um novo modelo TRI para emissão de radiação em simulações RANS. O modelo baseou-se nas decomposições de Reynolds da temperatura e do coeficiente de absorção médio de Planck. Uma expansão em série de Taylor multi-variável foi utilizada para determinar o coeficiente de absorção em função da temperatura e da concentração de espécies. As constantes do modelo foram determinadas usando estatísticas obtidas de simulações LES de alta resolução em chamas tipo piscina. O modelo apresentou um erro na estimativa direta da emissão radiativa de cerca de 25 %, o que foi considerado uma melhoria significativa quando comparado às aproximações já existentes, que apresentam erros totais acima de 40 %. O coeficiente de absorção médio também apresentou maior precisão, com um erro total de 16 %. O novo modelo, também empregado neste trabalho, é comparado com o proposto por Snegirev, 2004, e com dados experimentais para fluxo de calor radiativo de uma chama difusiva do tipo jato.

### **1.3 Contribuição do Trabalho**

Esta pesquisa de doutorado constitui um estudo inédito da aplicação e comparação com dados experimentais de dois modelos TRI para o termo de emissão da equação da transferência radiativa em uma chama turbulenta difusiva. O estudo, utilizando abordagens RANS para turbulência, considera ainda a comparação entre duas formas de obtenção do campo de variância de temperatura, que apresenta um papel fundamental nas abordagens RANS do TRI.

A simulação numérica, construída no CFD Ansys Fluent, foi possível através da programação e implementação de rotinas definidas pelo usuário, em linguagem de programação C. Com isso, as rotinas constituem novas ferramentas numéricas a serem empregadas em futuros estudos.

A análise numérica do desempenho das duas metodologias para a inclusão dos efeitos TRI em uma chama turbulenta é a maior contribuição deste trabalho. Como será apresentado, os resultados avaliando as diferenças entre os casos que consideram e negligenciam os efeitos de TRI evidenciam a necessidade da modelagem TRI para obtenção de resultados confiáveis. Uma outra contribuição da pesquisa foi a realização de dois novos conjuntos de medição do fluxo de calor radiativo para chamas turbulentas realizadas no Laboratório de Combustão da UFRGS, o que possibilitou a obtenção de novos dados para o estudo da combustão turbulenta.

## 1.4 Organização do Trabalho

Este trabalho se divide em seis Capítulos. O primeiro Capítulo consiste na introdução do tema de pesquisa. No segundo Capítulo são apresentadas as equações governantes para o processo de combustão turbulenta: conservação de massa, princípio da quantidade de movimento, conservação de energia e de espécies químicas. Além disso, apresentam-se o modelo de turbulência RANS e o equacionamento dos modelos SLDF e PDF para a cinética química.

As equações relativas aos fenômenos da radiação térmica, e os conceitos necessários para o entendimento da interação turbulência radiação são apresentadas no terceiro Capítulo.

O quarto Capítulo apresenta a metodologia empregada, o problema estudado, incluindo as condições de contorno o estudo da qualidade de malha e a discretização angular.

O quinto Capítulo apresenta os resultados obtidos. São comparadas as soluções numéricas com os resultados experimentais para o conjunto de chamas estudado.

O sexto Capítulo apresenta as conclusões, com uma breve recapitulação dos resultados obtidos e proposta de continuidade desta pesquisa.

## 2 MODELAGEM DO PROCESSO DE COMBUSTÃO TURBULENTA

As equações que descrevem um escoamento reativo turbulento são apresentadas neste Capítulo. O objetivo deste Capítulo é modelar numericamente uma chama turbulenta não pré-misturada, apresentando as equações de conservação das variáveis resolvidas, a modelagem da cinética química e por fim, a modelagem da turbulência. A radiação térmica será apresentada no próximo Capítulo.

As chamas não pré-misturadas são aquelas nas quais os reagentes estão inicialmente separados, e o oxidante e o combustível se combinam através da difusão. Assim, a mistura e a combustão se dão simultaneamente.

### 2.1 Equações da conservação de massa

As equações são apresentadas utilizando a média ponderada na massa, denominada decomposição de Favre. O conceito geral do método RANS não é afetado, conforme apresentado no trabalho de Kamal et al., 2015, ao comparar resultados experimentais obtidos de técnicas de medição tidas como baseadas em médias de Reynolds e médias de Favre. Os autores utilizaram a técnica de velocimetria por imagem de partículas (PIV), baseada em médias temporais de Reynolds, e anemometria com Doppler a laser (LDA) baseada em médias de Favre. Os resultados indicam boa concordância entre as técnicas de medição.

A decomposição de Favre expressa o valor instantâneo de um escalar em um valor médio e uma flutuação, na qual esse valor médio é definido através da ponderação do valor instantâneo pela massa específica do fluido. Sua utilização conduz a equações mais simples para os campos médios das variáveis dependentes, se adaptando melhor às técnicas estatísticas desenvolvidas para a combustão turbulenta em códigos CFD.

A decomposição de Favre para um escalar  $\phi$  qualquer é definida por:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\rho}, \quad (2.1)$$

onde a barra indica os termos nos quais são aplicadas médias temporais simples e o til indica aplicação da média de Favre. A decomposição em média estatística e flutuante é dada por:

$$\phi(t) = \tilde{\phi} + \phi''(t), \quad (2.2)$$

sendo  $\phi'' = 0$ .

A equação da conservação de massa, considerando regime permanente é expressa por:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u}) = 0, \quad (2.3)$$

onde  $\bar{\rho}$  é a massa específica e  $\mathbf{u}$  vetor velocidade do escoamento.

Sendo a velocidade do fluido pequena se comparada à velocidade do som no meio, consira-se o regime de baixo número de Mach,  $Ma$ , e pode-se assumir que as variações na massa específica da mistura dependem mais de variações da temperatura do que da pressão, de forma que a equação de estado utilizada para calcular a massa específica do fluido é dada por

$$\bar{\rho} = \frac{p^0 MW}{R_u T}, \quad (2.4)$$

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

## 2.2 Equação da conservação de energia

A equação da conservação da energia pode ser escrita de múltiplas formas, em termos da energia total, energia interna, da temperatura ou da entalpia. Neste caso será apresentada a equação em termos da entalpia. Considerando regime permanente, assumindo número de Lewis unitário, de acordo com Jones e Whitelaw, 1982:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{h}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{Pr} \nabla \tilde{h} \right) + \bar{S}_h, \quad (2.5)$$

onde  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento modelado com base na condutividade térmica turbulenta,  $\lambda_t$  através da relação  $Pr_t = C_p \mu_t / \lambda_t$ .

A definição de entalpia  $h$  é dada pelo somatório das entalpias de cada espécie:

$$h = \sum_{\alpha} y_{\alpha} h_{\alpha}, \quad (2.6)$$

sendo a  $y_{\alpha}$  a fração mássica média de cada espécie  $\alpha$  da mistura e  $h_{\alpha}$  entalpia média de cada espécie  $\alpha$  dada por:

$$h_{\alpha} = h_{\alpha}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,\alpha} dT, \quad (2.7)$$

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

$$c_p = \sum_{\alpha} y_{\alpha} c_{p,\alpha} \quad (2.8)$$

O termo fonte da equação da conservação da energia,  $\bar{S}_h$  é constituído por um termo fonte de calor radiativo  $S_{rad}$  calculado por:

$$S_{rad} = -\nabla \cdot \vec{q}_r, \quad (2.9)$$

onde  $\vec{q}_r$  representa o fluxo de calor radiativo. Posteriormente será apresentado com maior detalhamento o termo fonte radiativo, visto que sua determinação e comparação constitui um dos objetivos desta pesquisa.

### 2.3 Equação do balanço da quantidade de movimento

A equação do balanço da quantidade de movimento é dada por:



$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot (\tilde{\boldsymbol{\tau}} - \bar{\rho} \mathbf{u}'' \mathbf{u}'') + \bar{\rho} \mathbf{g}, \quad (2.10)$$

na qual  $\mathbf{g}$  é o vetor aceleração gravitacional,  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$  é o tensor das tensões viscosas, o qual assumindo a hipótese de Stokes para um fluido newtoniano é dado por:

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \mu \left[ \nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} \nabla \tilde{\mathbf{u}} \mathbf{I} \right], \quad (2.11)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $\mathbf{I}$  o tensor identidade. O termo  $\mathbf{u}'' \mathbf{u}''$  representa tensões aparentes. Sua modelagem considera a aproximação de Boussinesq, na qual as tensões turbulentas podem ser consideradas análogas às tensões presentes em escoamentos laminares [Wilcox, 2006]:

$$-\bar{\rho} \mathbf{u}'' \mathbf{u}'' = \mu_t \left[ \nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T \right] - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \mathbf{I}, \quad (2.12)$$

sendo  $\tilde{k}$  a energia cinética turbulenta e  $\mu_t$  a viscosidade turbulenta. As variáveis independentes são  $\bar{\rho}$ ,  $\mathbf{u}$  e  $\mathbf{u}'' \mathbf{u}''$  isso faz com que o número de incógnitas seja superior ao número de equações, o que conduz a necessidade de novas equações para fechar o problema. As equações utilizadas neste trabalho são apresentadas na Seção 2.4.

A aproximação de Boussinesq considera que a turbulência é isotrópica (a intensidade da turbulência é igual nas direções ortogonais do escoamento). A viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , não é uma propriedade física do fluido, mas sim uma característica do escoamento que indica o nível de turbulência local. A determinação da viscosidade turbulenta dependerá do modelo de turbulência adotado. Os modelos algébricos obtêm a viscosidade turbulenta através do comprimento de mistura introduzido por Prandtl, 1925, nos modelos de uma equação a viscosidade turbulenta depende da energia cinética das flutuações turbulentas  $k$ , introduzido por Prandtl em 1945. Os modelos de duas equações apresentados por Kolmogorov, 1942, resolvem a equação de transporte para energia cinética turbulenta  $k$  e uma equação de transporte adicional para outro parâmetro, a taxa de dissipação de energia por unidade de volume, sendo a viscosidade turbulenta função dos dois parâmetros. Há modelos que não utilizam a aproximação de Boussinesq, os modelos de transporte de tensões [Wilcox, 2006].

## 2.4 Modelagem da Turbulência

Escoamentos turbulentos são mais comuns em aplicações industriais e em condições naturais [Silva Freire et al.,2002]. A turbulência se caracteriza por flutuações rápidas e aleatórias nas propriedades do escoamento. Combinada a reações químicas a turbulência costuma ser vantajosa considerando que ela beneficia a mistura dos reagentes e o transporte de calor. Porém vórtices intensos podem causar extinção local da chama, o que poderia prejudicar a eficiência da combustão [Law, 2006]. Nesta seção é descrito o modelo  $k-\varepsilon$  padrão, empregado neste trabalho.

### 2.4.1 Modelagem RANS

O método RANS precisa de modelos de fechamento para dar conta das novas variáveis que surgem nas equações de Navier-Stokes durante sua decomposição. Há diferentes modelos de fechamento disponíveis, construídos para diferentes problemas. Ao definir um modelo de fechamento adequado, a metodologia RANS pode fornecer resultados satisfatórios.

A abordagem RANS é muito difundida devido à facilidade de implementação e convergência, assim como na simulação de escoamentos complexos e de elevado número de Reynolds.

### 2.4.2 Modelo $k-\varepsilon$

O modelo de duas equações  $k-\varepsilon$  é um dos modelos mais robustos disponíveis atualmente, a robustez se relaciona ao fato de poder ser empregado em diversos tipos de problemas e apresentar facilidade de convergência. O modelo foi originalmente proposto por Launder e Spalding, 1972. A versão do modelo empregada neste trabalho possui uma modificação, proposta em Morse, 1980 e Pope, 1978. A modificação consiste em um ajuste da constante do modelo  $C_{\varepsilon 1}$  de 1,44 para 1,6. O ajuste foi necessário porque as constantes do modelo original não permitiam prever o campo de velocidades de jatos circulares [Pope 1978]. A constante de modificação foi determinada com vários dados experimentais e numéricos, que mostraram resultados precisos para uma chama difusiva turbulenta e tem sido

empregada em chamas do tipo jato em diversos trabalhos [Emami e Fard, 2012; Ziani et al., 2013; Sukirt et al., 2019].

As equações de conservação para energia cinética turbulenta  $k$ , e a dissipação  $\varepsilon$ , em regime permanente são dadas por:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{k}) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] + G_k + G_b - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (2.13)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (G_k + C_{\varepsilon 3} G_b) - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (2.14)$$

O termo  $G_k$  representa a geração de energia cinética turbulenta devida aos gradientes da velocidade média e  $G_b$  devido aos efeitos de empuxo,  $C_{\varepsilon 1}$  e  $C_{\varepsilon 2}$  são as constantes que controlam a produção e a destruição da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta,  $C_{\varepsilon 3}$  controla os efeitos devidos ao empuxo,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  correspondem aos números de Prandtl turbulentos para  $k$  e  $\varepsilon$ :

O termo  $G_k$  é modelado de acordo com a aproximação de Boussinesq, como:

$$G_k = -\bar{\rho} u'' v'' \nabla \tilde{\mathbf{u}} \quad (2.15)$$

$$G_k = \mu_t \tilde{\mathbf{S}}^2, \quad (2.16)$$

onde  $\tilde{\mathbf{S}}^2$  é o módulo do tensor da taxa de deformação média:

$$\tilde{\mathbf{S}}^2 \equiv \sqrt{2 \tilde{\mathbf{S}}_{ij} \tilde{\mathbf{S}}_{ij}}, \quad (2.17)$$

sendo:

$$\tilde{\mathbf{S}}_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T \right] \quad (2.18)$$

O termo  $G_b$ , que controla a geração de energia cinética turbulenta devido aos efeitos de empuxo, é modelado como:

$$G_b = -\mathbf{g} \frac{\mu_t}{\bar{\rho} \text{Pr}_t} \nabla \bar{\rho} \quad (2.19)$$

A viscosidade turbulenta  $\mu_t$  é calculada relacionando  $k$  e  $\varepsilon$ :

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.20)$$

Os valores das constantes modificadas do modelo são [Pope, 1978 e Morse, 1980]:

$$C_{1\varepsilon} = 1,60 \quad C_{2\varepsilon} = 1,92 \quad C_{3\varepsilon} = \tanh \left| \frac{\tilde{v}}{u} \right| \quad C_\mu = 0,09 \quad \sigma_k = 1,0 \quad \sigma_\varepsilon = 1,3$$

### 2.4.3 Tratamento para regiões próximas às paredes

A presença das paredes afeta o escoamento turbulento, os vórtices próximos possuem escalas menores de comprimento e altas frequências. Próximo às paredes, na região viscosa, a lei da parede é empregada conforme Launder e Spalding, 1974. Numericamente isso se refere ao primeiro volume de controle junto a parede. Na camada interior da região viscosa, mais próxima da parede, em  $y^+ \leq 11,225$  é aplicado um perfil de velocidade longitudinal linear. Para a região mais externa, em que  $y^+ > 11,225$ , é aplicado um perfil logarítmico. Dessa forma pode-se escrever:

$$\begin{aligned} y^+ \leq 11,225 &\rightarrow u^+ = y^+ \\ y^+ > 11,225 &\rightarrow u^+ = \frac{1}{K} \ln(Ey^+), \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde  $y^+ = y(\bar{\rho} C_\mu^{1/4} k^{1/2} \mu^{-1})$  é a dimensão característica adimensional,  $u^+ = u \bar{\rho} C_\mu^{1/4} k^{1/2} / u^*$  é a velocidade característica adimensional,  $u^* = (\tau_w / \bar{\rho})^{1/2}$  é velocidade de fricção em que  $\tau_w$  é a tensão cisalhante na parede, e  $y$  é a distância a partir da parede. No perfil logarítmico  $K$  é a constante de von Kármán igual a 0,4187 e uma constante empírica igual a 9,793 [ANSYS,

2011a]. Os termos  $\tilde{k}$  e  $\tilde{\varepsilon}$  também são modelados, devido a condição de equilíbrio entre produção e destruição da energia cinética turbulenta combinada a consideração de tensão cisalhante constante na região viscosa, chega-se a condição de gradiente nulo de  $\tilde{k}$  na parede:

$$\frac{\partial \tilde{k}}{\partial y} = 0.$$

A produção da energia cinética turbulenta também é alterada em sua modelagem próxima a parede:

$$G_k = \left( \frac{\tau_w^2}{K_y \bar{\rho} C_\mu^{1/4} \tilde{k}^{1/2}} \right), \quad (2.22)$$

sendo  $\tilde{\varepsilon}$  obtido através da relação:

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \tilde{k}^{3/2}}{K_y} \quad (2.23)$$

## 2.5 Modelo *Steady Laminar Diffusion Flamelet* (SLDF)

O modelo *steady laminar diffusion flamelet* (SLDF) baseia-se no conceito de *flamelets*. A ideia principal dos *flamelets* consiste em modelar uma chama multidimensional por um conjunto de elementos de chama quase unidimensionais [Peters, 1984], conforme Figura 2.1.

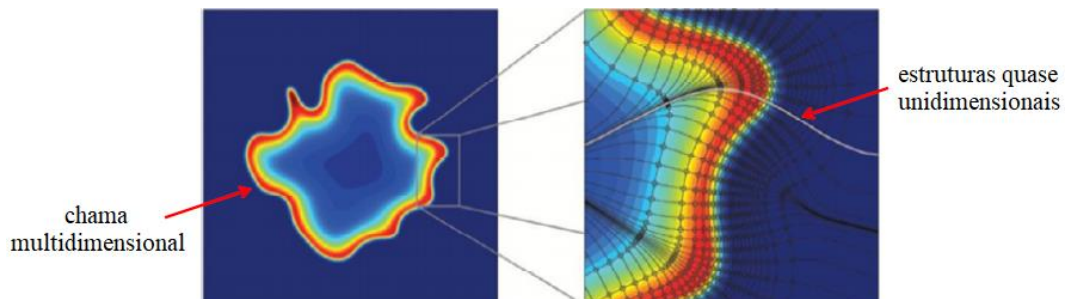


Figura 2.1 – Estruturas microscópicas em uma chama multidimensional [adaptada de Van Oijen, 2014].

A premissa física para esta modelagem deve-se a ideia de a espessura dos elementos de chama serem menores que o tamanho dos vórtices de Kolmogorov, que possuem as menores escalas da turbulência do escoamento, e assim mantém sua estrutura laminar interna preservada. Ainda que os elementos de chama sejam transportados e deformados por condições locais do escoamento, suas características fundamentais se mantêm, conforme Figura 2.2. Se os vórtices de Kolmogorov forem menores que a espessura dos elementos de chama, o caso de intensa turbulência, a estrutura interna se modificaria e este tipo de modelagem falharia.

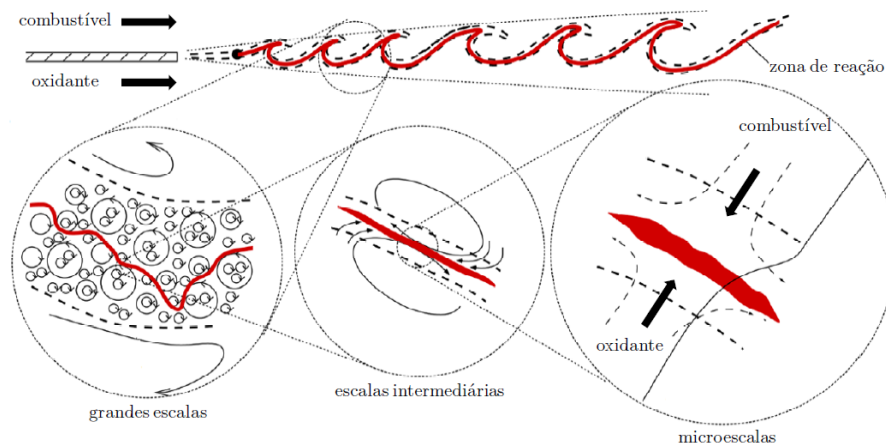


Figura 2.2 – Grandeza das escalas em um escoamento reativo turbulento [Deon, 2016].

Cada *flamelet* (elementos de chama quase unidimensionais) é submetido a condições locais do campo do escoamento, resultando na sua convecção e alargamento, sem destruir sua estrutura interna laminar. Dessa forma pode-se descrever a estrutura local da chama através de poucas variáveis. A estrutura laminar dos *flamelets* é pré-calculada, resolve-se os principais escalares reativos, temperatura, massa específica da mistura, frações mássicas das espécies químicas. Estas variáveis são tabuladas, parametrizadas em função de variáveis de controle e armazenadas em um banco de dados.

Durante a simulação apenas as equações de transporte para as variáveis de controle precisam ser resolvidas, uma vez determinados os valores das variáveis de controle, pode-se recuperar os escalares armazenados no banco de dados a partir deles. A solução dos *flamelets* pode ser realizada com códigos de chamas unidimensionais, com mecanismos de cinética química detalhados, como GRI-Mech, utilizado neste trabalho.

A combustão não pré-misturada, onde o combustível e o oxidante inicialmente estão separados, é associada aos *flamelets* difusivos de contracorrente. Nesta configuração o

combustível e o oxidante, são direcionados um contra o outro por bicos injetores axissimétricos, conforme a Figura 2.3. Estas chamas apresentam grande interesse devido às suas características aproximadamente unidimensionais, pois os gradientes radiais são muito menores que os axiais, podendo ser negligenciados nas equações de transporte das espécies químicas e da energia.

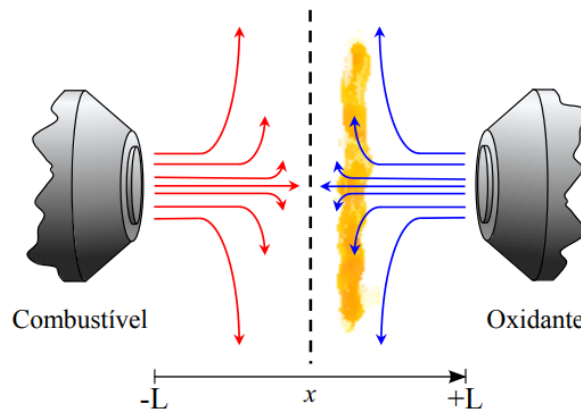


Figura 2.3 – Configuração de chama difusiva tipo contracorrente [Hoerlle, 2015].

Os jatos opostos criam um plano de estagnação, representado pela linha pontilhada. A localização do plano de estagnação depende da ordem de grandeza dos fluxos de quantidade de movimento iniciais dos jatos de combustível e oxidante. Se os fluxos forem iguais o plano de estagnação se localizará na metade da distância entre as saídas dos dois bocais. Se um fluxo de quantidade de movimento linear cresce em relação ao outro o plano de estagnação é empurrado para uma posição mais próxima do escoamento com menor fluxo.

A chama não pré-misturada é estabelecida entre os dois bocais na posição na qual a fração de mistura atinge seu valor estequiométrico. Ao diminuir a distância entre os bocais ou aumentar a quantidade de movimento linear na saída a chama é deformada de maneira a comprimi-la longitudinalmente e estirá-la na direção transversal. A baixa taxa de estiramento da chama, caso em que a distância entre os bocais é grande ou o fluxo de movimento é baixo, produz grande tempo de residência química. O caso contrário, onde há maior taxa de estiramento da chama, menor distância entre os bocais ou maior vazão do escoamento, o tempo de residência química do escoamento diminui. Com isso os reagentes passam muito rapidamente pela zona de reação e a combustão é incompleta. A taxa de estiramento muito alta pode levar à extinção da chama.

As equações para descrever a estrutura dos *flamelets* podem se basear no conceito de fração de mistura  $Z$ , escalar que representa a fração mássica do material proveniente do combustível. As variáveis do processo de combustão serão representadas em função do espaço de  $Z$  em detrimento do espaço físico.

### 2.5.1 Fração de mistura

A fração de mistura  $Z$ , tem diferentes formulações, mas em qualquer definição deve assumir 0 no escoamento do oxidante e 1 no escoamento do combustível. Dessa forma a fração de mistura é muito utilizada na modelagem de chamas não pré-misturadas, uma vez que os escoamentos de combustível e oxidante estão inicialmente separados. No escoamento a fração de mistura  $Z$ , assumirá valores entre 1 e 0. Nos combustíveis compostos por hidrocarbonetos, a definição utilizada é a de Bilger, 1988:

$$Z = \frac{2(Y_C - Y_{C2})/W_C + 0,5(Y_H - Y_{H2})/W_H - 0,5(Y_O - Y_{O2})/W_O}{2(Y_{C1} - Y_{C2})/W_C + 0,5(Y_{H1} - Y_{H2})/W_H - 0,5(Y_{O1} - Y_{O2})/W_O}, \quad (2.24)$$

onde  $Y_a$  e  $W_a$  são respectivamente, as frações mássicas e massas atômicas correspondentes a carbono, hidrogênio e oxigênio presentes na mistura e os índices 1 e 2 se referem às condições das correntes de combustível e de oxidante respectivamente.

Assim, a fração de mistura indica como é a composição da mistura em cada ponto da malha, mas especialmente de carbono, hidrogênio e oxigênio. Nesse sentido a fração de mistura estequiométrica,  $Z_{st}$ , é a proporção ideal destes átomos para que ocorra a combustão completa. Cada combustível vai ter sua fração de mistura estequiométrica. Esse conceito é fundamental no modelo dos *flamelets*, permitindo o mapeamento de uma chama completa.

A equação de transporte para fração de mistura, para chama unidimensional na qual usa-se a direção genérica  $x$  e assumindo número de Lewis unitário, pode ser escrita por:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u Z) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_z \frac{\partial Z}{\partial x} \right), \quad (2.25)$$



onde  $D_z$  é o coeficiente de difusão da fração de mistura. Além da fração de mistura, no modelo SLDF, os resultados são parametrizados por alguma taxa de dissipação do escalar característica.

### 2.5.2 Construção da Tabela Termoquímica Laminar

Para descrever a estrutura laminar da chama em termos da fração de mistura usa-se a Eq. 2.25 juntamente com a solução do campo do escoamento. A Figura 2.4 apresenta a frente de chama como a posição na qual a fração de mistura é estequiométrica:

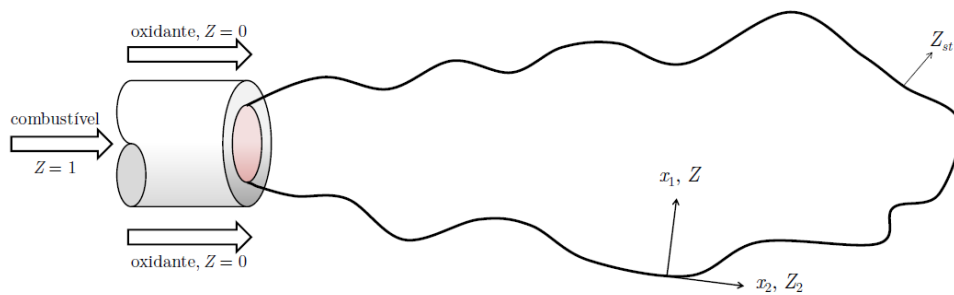


Figura 2.4 – Esquema de uma chama não pré-misturada turbulenta [Deon, 2016].

As equações derivadas para descrever os *flamelets*, considerando regime estacionário [Peters, 1984 e 1986, Claramunt et al., 2006]:

$$0 = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 y_\alpha}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_\alpha \quad (2.26)$$

$$0 = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_\alpha h \dot{\omega}_\alpha + \frac{1}{2c_p} \rho \chi \left( \frac{\partial c_p}{\partial Z} + \sum_\alpha c_{p,\alpha} \frac{\partial y_\alpha}{\partial Z} \right) \frac{\partial T}{\partial Z} \quad (2.27)$$

A taxa de dissipação do escalar,  $\chi$ , é um parâmetro que quantifica a influências dos efeitos multidimensionais do escoamento. A taxa de dissipação do escalar varia ao longo do *flamelet* e possui diferentes modelagens, neste caso a equação empregada é dada por [Kim e Williams, 1997]:

$$\chi = \frac{a_s}{4\pi} \frac{3(\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1)^2}{2\sqrt{\rho_\infty/\rho} + 1} \exp\left\{-2\left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)\right]^2\right\}, \quad (2.28)$$

sendo  $\operatorname{erfc}^{-1}$  o inverso da função erro complementar,  $\rho_\infty$  é a massa específica da corrente no oxidante puro e  $a_s$  é a taxa de deformação característica do *flamelet*, dada por:

$$a_s = \frac{V}{2d}, \quad (2.29)$$

onde  $V$  é a velocidade relativa entre os jatos de combustível e do oxidante e  $d$  é a distância entre os bicos de saída dos jatos. A taxa de deformação característica é utilizada como um parâmetro prescrito para a solução das equações.

A tabela termoquímica é construída através da solução das Equações (2.26) e (2.27), as condições de contorno são a temperatura e as frações mássicas das espécies químicas nas correntes de combustível ( $Z=1$ ) e oxidante ( $Z=0$ ). Neste trabalho as equações são resolvidas para diferentes condições de deformação da chama, controlada através da taxa de estiramento  $a_s$ . Inicia-se próximo ao equilíbrio químico, nas menores taxa de estiramento e aumenta-se até a extinção completa da chama. As taxas de produção/destruição de massa são resolvidas diretamente com o mecanismo de cinética química apresentado.

Com os resultados destas equações, as soluções para temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas das espécies são armazenadas em função das variáveis de controle, neste caso, fração de mistura e taxa de dissipação do escalar característica. Para a taxa de dissipação característica usa-se neste trabalho o seu valor obtido na condição estequiométrica  $\chi_{st}$ . Assim, temperatura, densidade e frações mássicas são então armazenadas em função das variáveis de controle  $Z$  e  $\chi_{st}$  formando uma tabela bidimensional. A Figura 2.5 representa o procedimento de solução dos *flamelets* laminares e sua parametrização em função de  $Z$  e  $\chi_{st}$ . As equações de transporte calculadas durante a simulação fornecem os resultados das variáveis de controle, permitindo que se encontre na tabela os valores de temperatura, fração mássica e massa específica da mistura.

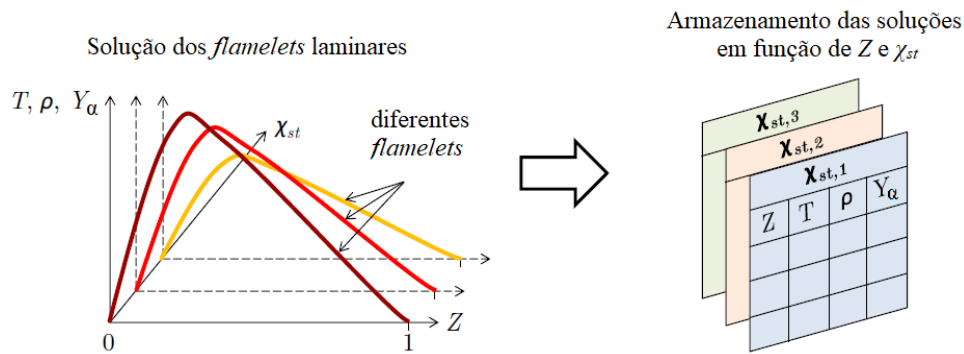


Figura 2.5 – Esquema de solução dos *flamelets* laminares e armazenamento dos escalares reativos [Deon, 2016].

## 2.6 Incorporação dos Efeitos da Turbulência

O método da função densidade de probabilidade (PDF – *probability density function*) propõe uma descrição estatística das flutuações dos escalares do escoamento. A função densidade de probabilidade  $P(\zeta)$  de uma variável genérica  $\zeta$  pode ser interpretada como fração de tempo na qual uma porção de fluido, em determinada coordenada espacial, passa na vizinhança do estado  $\zeta$  [Tennekes e Lumley, 1972]. A Figura 2.6 apresenta a variação de  $\zeta$  ao longo do tempo.

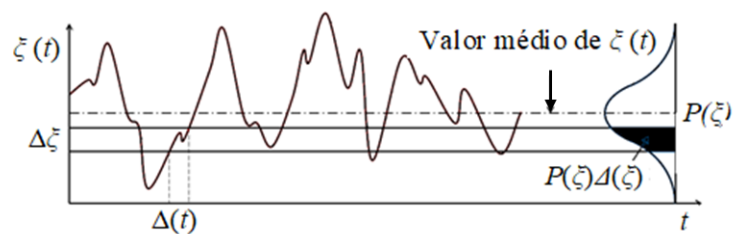


Figura 2.6 – Esquema gráfico da função densidade de probabilidade adaptada [Tennekes e Lumley, 1972].

A Figura 2.6 apresenta a variável genérica  $\zeta$  que passa em uma determinada fração de tempo na faixa indicada por  $P(\zeta)\Delta(\zeta)$ , sendo seu valor correspondente à área sob a curva:

$$P(\xi)\Delta\xi = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_n (\Delta t)_n, \quad (2.30)$$

onde  $T$  é a escala de tempo total avaliado,  $\Delta t$  é a quantidade de tempo que  $\xi$  passa na faixa  $\Delta(\xi)$  e  $n$  é a quantidade de vezes que isso ocorre. Assim,  $P(\xi)$  determina que a probabilidade de encontrar  $\xi(t)$  entre  $\xi$  e  $\Delta(\xi)$  é igual ao tempo dispendido nestas posições.

Neste trabalho, usa-se a função distribuição beta, que vem sendo empregada em diversos trabalhos, conforme Liu et al., 2002 e Cao et al., 2012, para modelar a função densidade de probabilidade da fração de mistura em combustão turbulenta não pré-misturada e inicialmente proposta por Janicka e Kollman, 1979:

$$P(\xi) = \frac{\xi^{\gamma-1}(1-\xi)^{\beta-1}}{\int_0^1 \xi^{\gamma-1}(1-\xi)^{\beta-1} d\xi}, \quad (2.31)$$

onde  $\gamma$  e  $\beta$  são parâmetros de ajuste, dados por:

$$\gamma = \bar{\xi} \left[ \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi^{n2}} - 1 \right] \quad (2.32)$$

$$\beta = (1-\bar{\xi}) \left[ \frac{\bar{\xi}(1-\bar{\xi})}{\xi^{n2}} - 1 \right], \quad (2.33)$$

sendo  $\bar{\xi}$  e  $\overline{\xi^{n2}}$ , respectivamente a média e a variância da variável  $\xi(t)$ . A função beta é utilizada porque pode assumir diferentes formas e permite a obtenção do valor médio de uma variável, o primeiro momento estatístico central, como também sua variância, o segundo momento estatístico central.

No caso em que são assumidos desprezíveis os efeitos da flutuação de  $\xi$ , a sua PDF se resume a delta de Dirac,  $\delta$ :

$$P(\xi) = \delta(\xi - \bar{\xi}) \quad (2.34)$$

No limite, a função delta de Dirac obedece às propriedades:

$$\delta(\xi - \bar{\xi}) = \begin{cases} 0 & \text{para } \xi \neq \bar{\xi} \\ 1 & \text{para } \xi = \bar{\xi} \end{cases} \quad (2.35)$$

O que significa que, se desprezadas as flutuações de  $\xi$ , toda sua distribuição de probabilidades se concentrará no seu valor médio,  $\bar{\xi}$ .

A função  $\beta$ -PDF é definida no intervalo  $[0,1]$ , a função é normalizada de forma que a área sob sua curva seja unitária:

$$\int_0^1 P(\xi) d\xi = 1 \quad (2.36)$$

É possível calcular os valores médios de um escalar qualquer  $\phi$ , dependente de  $\xi$  através da integração com as PDFs. Escrevendo através da decomposição de Favre,  $P(\xi)$  passa a ser  $P(\xi)$ , definida por [Coelho, 2007]:

$$P(\xi) = \frac{\overline{\rho(\xi) P(\xi)}}{\bar{\rho}(\xi)} \quad (2.37)$$

Dessa forma, um escalar qualquer pode ser calculado por:

$$\varphi(\xi, \xi''^2) = \int_0^1 \varphi(\xi) P(\xi, \xi, \xi''^2) d\xi \quad (2.38)$$

O que implica que a função  $P$  descrita acima depende da própria variável  $\xi$ , de sua média e sua variância. Dessa forma os resultados obtidos para temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas das espécies provenientes da solução dos *flamelets* laminares, incorporam-se aos efeitos da turbulência através das PDFs. Na determinação dos valores médios de uma propriedade qualquer  $\phi$  (temperatura, massa específica da mistura e frações mássicas) a função  $P$  vai depender, da fração de mistura, da taxa de dissipação do escalar,  $P(Z, \chi_{ST})$  conforme a equação:

$$\varphi = \iint \varphi(Z, \chi_{ST}) P(Z, \chi_{ST}) dZ d\chi_{ST} \quad (2.39)$$

No entanto, uma significativa aproximação pode ser feita ao assumir independência estatística, de forma que,  $P_Z(Z)P_\chi(\chi_{ST})$ . A forma  $\beta$  PDF é assumida por  $P_Z$  e as equações para  $Z$  e  $Z^{n2}$  são resolvidas para uma específica probabilidade  $P_Z$ . As flutuações de  $\chi_{ST}$  são negligenciadas, então a PDF para  $\chi$  é definida por uma função delta de Dirac. Assim, a Eq. (2.39) pode ser escrita, já em função das variáveis de interesse e integrando em seus respectivos limites:

$$T, \bar{\rho}, Y_\alpha = \int_0^{\chi_{ex}} \int_0^1 T, \rho, Y_\alpha(Z, \chi_{st}) P_Z(Z, Z, Z^2) \delta(\chi_{st} - \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (2.40)$$

Em resumo, três simplificações são feitas nessa modelagem. A primeira consiste em assumir a independência estatística entre as variáveis e as probabilidades são consideradas individuais. A segunda é desprezar os efeitos das flutuações de  $\chi_{ST}$  no cálculo dos valores médios dos escalares reativos, resumindo a PDF em uma função delta de Dirac. A terceira consiste em negligenciar o efeito do ganho ou perda de entalpia sobre as frações mássicas médias das espécies, empregando as frações mássicas obtidas da solução adiabática, evitando um pré-processamento de *flamelets* não adiabáticos. A temperatura é obtida a partir das Equações (2.4) e (2.5). A massa específica da mistura, por fim, é então recalculada a partir da equação de estado para os gases ideais (2.2).

Dessa forma, nesta simplificação empregada pelo CFD, mesmo em um problema adiabático a modelagem não estabelece vínculo direto da fração mássica com a entalpia. O que representa uma dificuldade na modelagem deste trabalho, uma vez que há perdas de calor. A implementação de *flamelets* adiabáticos que permitam vínculo direto com fração mássica e entalpia deve ser alvo de estudos futuros. As frações mássicas são encontradas na tabela através dos valores de fração de mistura e taxa de dissipação e com estes valores obtêm-se a temperatura via equações acima mencionadas. A nova temperatura afeta a massa específica da mistura, o que gera a mudança da fração de mistura e sua variância e com isso os campos das espécies são afetados.

A taxa de dissipação do escalar média é modelada neste trabalho por uma equação algébrica que relaciona flutuações da fração de mistura com as escalas de turbulência do escoamento. Sendo o modelo de turbulência empregado o  $k-\varepsilon$  padrão, a expressão proposta por Janicka e Peters, 1982, é dada por:

$$\chi_{st} = \frac{C_\chi \varepsilon Z^{n^2}}{k}, \quad (2.41)$$

onde  $C_\chi$  é uma constante e seu valor proposto por Jones e Whitelaw, 1982, é 2 considerando um jato reativo axissimétrico. A Eq. (2.42) apresenta relação entre a taxa de dissipação do escalar média e a variância da fração de mistura. Com isso se faz necessário duas equações de transporte adicionais para fração de mistura média e sua variância. A equação de transporte para fração de mistura média, em regime permanente, assumindo número de Lewis unitário:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}) = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{ct}} \right) \nabla \tilde{Z} \right] \quad (2.42)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} Z^{n^2}) = \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\mu}{S_c} + \frac{\mu_t}{S_{ct}} \right) \nabla Z^{n^2} \right] + C_g \mu_t (\nabla \tilde{Z})^2 - \bar{\rho} C_\chi, \quad (2.43)$$

onde  $C_g$  é uma constante, igual a 2,86 de acordo com Jones e Whitelaw, 1982. A partir das Equações (2.42) a (2.44) são então obtidos os valores locais das variáveis de controle e com elas são buscadas na tabela termoquímica as demais variáveis.

### 3 RADIAÇÃO TÉRMICA

Um sistema radiante consiste em um sistema no qual a transferência de calor é dominada pela radiação térmica. Todo corpo com temperatura não nula emite radiação em alguma faixa do espectro eletromagnético, sendo assim, a principal forma de transferência de calor do universo. A transferência de calor por radiação é relevante em processos industriais de aquecimento, resfriamento e secagem, assim como nos métodos de conversão de energia que envolvem a combustão de combustíveis fósseis.

A radiação térmica emitida é diretamente proporcional à temperatura da superfície elevada na quarta potência, dessa forma pode-se evidenciar a importância deste meio de transferência de calor, por exemplo, em fornos industriais que apresentam elevadas temperaturas. O primeiro conceito para melhor compreender a natureza complexa da radiação térmica é o conceito de corpo negro, apresentado na próxima seção.

#### 3.1 Corpo negro

O corpo negro é uma idealização teórica de um corpo físico, nele toda a energia radiante incidente é absorvida, independente da direção e do comprimento de onda. Essa idealização é importante porque estabelece um padrão de comparação para a absorção e emissão de corpos reais. O nome corpo negro tem como origem o fato de que um corpo que absorve toda a radiação que nele incide pareceria negro aos olhos de uma pessoa.

O poder emissivo espectral hemisférico de um corpo negro, chamado de  $e_{\eta b}(\eta, T)$  (W/m<sup>2</sup>μm), é a energia emitida por uma superfície negra por unidade de tempo, por unidade de área e por unidade de intervalo de número de onda  $d\eta$ , em torno de  $\eta$ . Essa energia é função do número de onda através da distribuição espectral de Planck, dada por:

$$e_{\eta b}(\eta, T) = \frac{2\pi C_1 \eta^3}{\exp\left(\frac{C_2 \eta}{T}\right) - 1}, \quad (3.1)$$

na qual  $T$  (K) é a temperatura,  $\eta$  (μm) é o número de onda e  $C_1$  e  $C_2$  são constantes, respectivamente:  $0,59552137 \times 10^8$  Wμm<sup>4</sup>/(m<sup>2</sup>sr) e  $1,4387752 \times 10^4$  μmK. Da integração da



distribuição espectral de Planck, Eq. (3.2), em todos os comprimentos de onda, resulta a lei de Stefan-Boltzmann, Eq. (3.3).

$$e_b = \sigma T^4, \quad (3.2)$$

na qual  $e_b$  (W/m<sup>2</sup>) é o poder emissivo total do corpo negro e  $\sigma = 5,6704 \times 10^8$  W/(m<sup>2</sup>K<sup>4</sup>) é a constante de Stefan-Boltzmann.

A intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro, cuja unidade é W/m<sup>2</sup>, independe da direção e é dada por:

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

A emissividade é uma propriedade da superfície e pode ser definida como a razão entre a radiação emitida pela superfície e a radiação emitida pelo corpo negro à mesma temperatura. Assim, a emissividade hemisférica total, Eq. (3.4) representa a média sobre todas as direções e comprimentos possíveis.

$$\varepsilon(T) = \frac{e(T)}{e_b(T)} \quad (3.4)$$

Em um meio de gases participantes esse parâmetro é denominado emitância. A emitância espectral  $\varepsilon_\eta$  estabelece o quanto de energia é emitida em cada número de onda comparado com a energia emitida por um corpo negro. A emitância total é a integração em todo o espectro da intensidade de radiação emitida por um meio participante comparada ao poder emissivo total de um corpo negro [Siegel e Howell, 2002]:

$$\varepsilon(T) = \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b} \varepsilon_\eta(T) d\eta}{\int_0^\infty I_{\eta,b} d\eta} \quad (3.5)$$

A Lei de Kirchoff permite igualar a emitância à absorptância,  $\varepsilon_\eta = \alpha_\eta$ , sendo a absorptância a fração da energia incidente absorvida pelo gás participante. Substituindo a absorptância espectral ( $1 - \exp(-a_\eta S)$ ), e sendo  $a_\eta = p \cdot \kappa_\eta$ , chega-se à equação para emitância total:

$$\varepsilon(T) = \pi \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b} [1 - \exp(-\kappa_\eta p S)] d\eta}{\sigma T^4}, \quad (3.6)$$

sendo  $pS$  o produto da pressão parcial pelo caminho, em atm·m, e  $\kappa_\eta$  o coeficiente de absorção do meio participante, em  $m^{-1}$ .

### 3.2 Intensidade de radiação térmica

A intensidade de radiação espectral é definida como a energia que deixa uma superfície por unidade de tempo, unidade de área normal à direção de propagação da radiação e unidade de ângulo sólido centrado na direção de propagação da radiação [Siegel e Howell, 2002]. Para um elemento de área  $dA$ , em um meio participante, a Figura 3.1 apresenta a representação da emissão de radiação emitida em uma direção especificada pelos ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  a partir de um sistema de coordenadas esféricas. A área  $dA_n$  através da qual a radiação incide compreende um ângulo sólido  $d\omega$ :

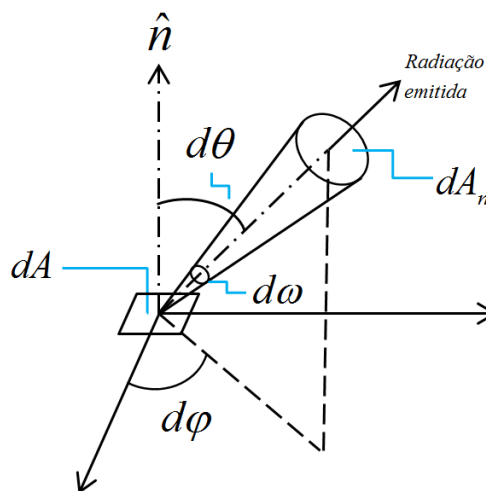


Figura 3.1 – Emissão da radiação por uma área diferencial  $dA$  de um ângulo sólido  $d\omega$   
[Adaptado de Incropera e De Witt, 2008].

A intensidade de radiação espectral  $I_\eta$  é dada por:

$$I_\eta(\eta, \theta, \phi) \equiv \frac{dq}{dA \cos \theta d\omega d\eta}, \quad (3.7)$$

onde a intensidade de radiação espectral,  $I_\eta$  possui unidade de  $W/(m^2 \cdot \mu m \text{ sr})$ ,  $dq/d\eta \equiv dq_\eta$  é a taxa na qual a radiação de número de onda  $\eta$  deixa  $dA$  e passa através de  $dA_\eta$ . Escrevendo a equação para  $dq_\eta$ :

$$dq_\eta = I_\eta(\eta, \theta, \phi) dA \cos \theta d\omega, \quad (3.8)$$

sendo a unidade de  $dq_\eta$   $W/\mu m$ . O ângulo sólido  $d\omega$  é definido como  $\sin \theta d\theta d\phi$ . Conhecendo  $I_\eta$  pode-se determinar a emissão para qualquer ângulo sólido ao longo de um número de onda através da Eq. (3.8).

### 3.3 Intensidade de radiação em meios participantes

Um meio participante absorve, emite e espalha radiação térmica. Para determinar a taxa de transferência de calor em um meio participante deve-se resolver a equação de transferência radiativa (*radiative transfer equation* RTE). A RTE deverá ser resolvida no espaço e no espectro e poderá se determinar os efeitos de atenuação da intensidade devido à absorção e ao espalhamento e o aumento de intensidade devido à emissão e devido ao espalhamento na direção do caminho da intensidade provenientes de outras direções.

#### 3.3.1 Atenuação da intensidade de radiação devido à absorção

A radiação espectral de intensidade  $I_\eta$  incide na direção normal a um elemento de volume de espessura  $dS$  que absorve e espalha radiação, Figura 3.3. A medida que a radiação passa através de  $dS$ , sua intensidade é reduzida devido à absorção e ao espalhamento.

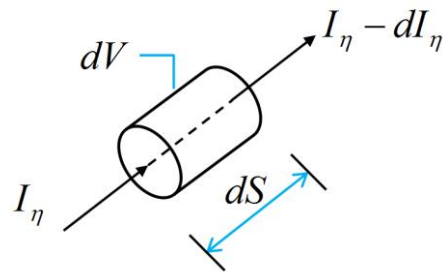


Figura 3.2 – Intensidade incidente sobre um elemento de espessura  $dS$  que absorve e espalha  
[Adaptado de Siegel e Howell, 2002].

A redução pode ser determinada através da magnitude da intensidade local com um coeficiente de proporcionalidade  $K_\eta$ :

$$dI_\eta = -K_\eta(S)I_\eta dS, \quad (3.9)$$

onde  $K_\eta$  é o coeficiente de extinção espectral do meio, em unidade de  $m^{-1}$  e é função da temperatura, pressão, composição do material e número de onda da radiação incidente, assim  $K_\eta = K_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$ . A integral da equação (3.9) sobre um comprimento finito de caminho  $S$ , é dada por:

$$\int_{I_\eta(0)}^{I_\eta(S)} \frac{dI_\eta}{I_\eta} = -\int_0^S K_\eta(S^*) dS^*, \quad (3.10)$$

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

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

Com isso chega-se à Lei de Bouguer (Eq. 3.11), que indica a atenuação exponencial da intensidade espectral ao longo de um caminho conforme ela atravessa um meio que absorve e espalha. O coeficiente de extinção é constituído por duas partes: absorção ( $\kappa_\eta$ ) e espalhamento ( $\sigma_{S\eta}$ ), de forma que:

$$K_{\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_{\alpha}) = \kappa_{\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_{\alpha}) + \sigma_{S\eta}(\eta, T, p, \bar{c}_{\alpha}) \quad (3.12)$$

A unidade dos coeficientes de absorção  $\kappa_{\eta}$  e espalhamento  $\sigma_{S\eta}$  é  $\text{m}^{-1}$ . É possível também definir o coeficiente de extinção por unidades de massa específica:

$$K_{\eta,m} = \kappa_{\eta,m} + \sigma_{S\eta,m} = \frac{K_{\eta}}{\rho} = \frac{\kappa_{\eta}}{\rho} + \frac{\sigma_{S\eta}}{\rho}, \quad (3.13)$$

sendo  $\rho$  a massa específica das espécies participantes. Conforme Modest, 1993, o coeficiente de extinção pode ser escrito em função da pressão parcial da mistura das espécies participantes:

$$K_{\eta,p} = \kappa_{\eta,p} + \sigma_{S\eta,p} = \frac{K_{\eta}}{p} = \frac{\kappa_{\eta}}{p} + \frac{\sigma_{S\eta}}{p}, \quad (3.14)$$

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

Neste trabalho o espalhamento será negligenciado, ou seja,  $\sigma_{S\eta,p} \approx 0$ , segundo Modest, 1993, o espalhamento pode ser desprezado em casos em que não há significativa formação de fuligem, como nas chamas estudadas neste trabalho. Com isso,  $K_{\eta,p} \approx \kappa_{\eta,p}$ . Substituindo o coeficiente de extinção na equação (3.9) chega-se a:

$$dI_{\eta} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}dS, \quad (3.15)$$

considerando que o coeficiente de absorção  $\kappa_{\eta}$  não depende da posição, ou seja, em uma situação com propriedades uniformes, então a Lei de Bouguer se torna:

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0)\exp(-\kappa_{\eta}S) \quad (3.16)$$

O coeficiente de absorção  $\kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$  depende fortemente do espectro  $\eta$ , da temperatura, pressão e concentração e, sendo parâmetro fundamental no problema, maiores informações sobre o coeficiente de absorção serão apresentadas na seção 3.4.

O fator exponencial na Lei de Bouguer pode ser definido como uma quantidade adimensional, de forma que:

$$\tau_\eta(S) = \int_0^S \kappa_\eta(S^*) dS^* , \quad (3.17)$$

onde  $\tau_\eta(S)$  é a espessura óptica do caminho de comprimento  $S$ , substituindo na Eq. (3.9), chega-se a:

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp(-\tau_\eta(S)) , \quad (3.18)$$

pode-se dizer que a espessura óptica é uma medida de como a trajetória  $S$  atenua a radiação de um dado comprimento de onda. A espessura óptica grande fornece grande atenuação. Se o meio possui propriedades uniformes de composição, temperatura e pressão, a Eq. (3.16), pode ser reescrita:

$$\tau_\eta(S) = K_\eta S \quad (3.19)$$

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

### 3.3.2 Aumento da intensidade de radiação devido à emissão

A emissão no interior de um meio participante pode ser entendida considerando um volume elementar  $dV$  do meio, conforme a Figura 3.3, com um coeficiente de absorção  $\kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha)$ . Assume-se que  $dV$  está no centro de uma cavidade esférica com superfície negra de raio  $R$  com temperatura uniforme  $T$ . O espaço entre  $dV$  e a superfície da cavidade

está preenchido com um meio não-participante. A intensidade espectral incidente sobre  $dA_s$  em  $dV$ , emitida pelo elemento  $dA$  sobre a superfície da cavidade é  $I_\eta(S,0) = I_{\eta,b}(\eta,T)$ . A alteração da intensidade em  $dV$  como resultado de absorção é  $-I_\eta(0)\kappa_\eta dS = -I_{\eta,b}(\eta,T)\kappa_\eta dS$ . A energia absorvida pelo volume diferencial dado por  $dSdA_s$  é  $I_{\eta,b}(\eta,T)\kappa_\eta dSdA_s d\eta d\omega$  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  $dV$ , de forma a obter  $I_{\eta,b}(\eta,T)\kappa_\eta dVd\eta d\omega$ . A energia incidente sobre  $dV$  pode ser determinada integrando sobre todos os ângulos sólidos, chegando a  $4\pi\kappa_\eta I_{\eta,b}(\eta,T)dVd\eta$ .

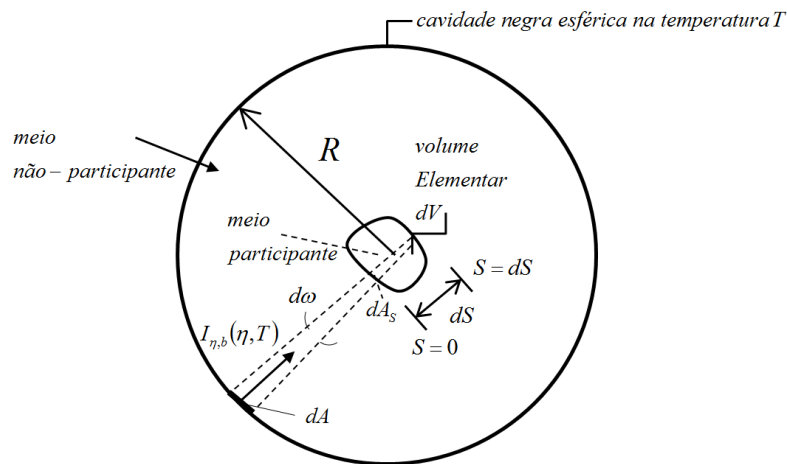


Figura 3.3 – Geometria esférica para dedução do aumento de intensidade de radiação devido à emissão em um meio participante [Adaptado de Siegel e Howell, 2002].

A emissão espectral por um volume elementar isotérmico é dada por:

$$4\pi\kappa_\eta I_{\eta,b}(\eta,T)dVd\eta = 4\pi E_{\eta,b}(\eta,T)dVd\eta \quad (3.20)$$

O volume  $dV$  considerado é suficientemente pequeno de tal forma que a energia emitida dentro de  $dV$  escape antes de ser reabsorvida no interior do volume. Para as condições apresentadas, a emissão é uniforme em todas as direções, assim a energia espectral emitida por um volume elementar em qualquer direção,  $dI_{\eta,e}$ , é obtida dividindo a Eq. (3.20) por  $4\pi d\eta$  e pela área da seção transversal  $dA_s$ :

$$dI_{\eta e}(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) = \kappa_\eta(\eta, T, p, \bar{c}_\alpha) I_{\eta, b}(\eta, T) dS \quad (3.21)$$

### 3.3.3 Equação de transferência radiativa

A equação da transferência radiativa define a intensidade de energia radiativa,  $dI_\eta$ , em um meio que emite e absorve energia ao longo de um caminho,  $dS$ , é dada pela soma das Equações (3.15) e (3.21):

$$dI_\eta = -\kappa_\eta(S) I_\eta dS + \kappa_\eta(S) I_{b, \eta}(S) dS \quad (3.22)$$

Ressalta-se que as parcelas de atenuação da intensidade de radiação no meio em decorrência do espalhamento são negligenciadas neste trabalho. Conforme citado anteriormente, o espalhamento pode ser negligenciado em casos em que não há significativa formação de fuligem. Dessa forma o equacionamento para o espalhamento não foi apresentado. Maiores informações podem ser obtidas em Siegel e Howell, 2002.

## 3.4 Modelos espectrais do coeficiente de absorção

Durante a emissão de energia radiativa, fótons são liberados pelos gases participantes, enquanto na absorção de energia eles são capturados. Dessa forma a energia da partícula emissora ou absorvedora é reduzida ou aumentada, respectivamente. Há três tipos de transições de níveis de energia relacionados a emissão e absorção de energia, são eles *bound-bound*, *bound-free (free-bound)*, e *free-free*. Cada transição de um nível de energia para outro está associado a uma determinada frequência (ou número de onda), o espectro de radiação é composto por linhas espectrais de espessura infinitesimal posicionadas nesta frequência específica. As propriedades radiativas dos gases possuem forte dependência espectral, conforme a Fig. 3.5.



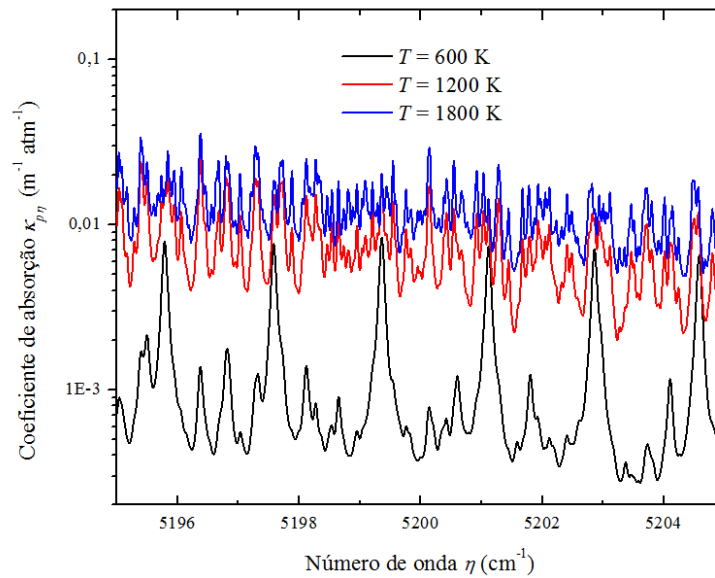


Figura 3.4 – Coeficiente de absorção baseado na pressão em três temperaturas de CO<sub>2</sub>.

Efeitos de alargamento resultam em linhas com largura espectral finita, ou seja, possuem uma faixa finita de número de onda ao redor do número de onda de transição  $\eta_{ij}$ . Entre os mecanismos de alargamento pode-se citar o natural, Doppler, por colisão e Stark. Em aplicações de engenharia o alargamento natural geralmente é pequeno quando comparado com outros mecanismos e é usualmente negligenciado. O alargamento Doppler se torna importante em altas temperaturas. O alargamento Stark ocorre na presença de fortes campos elétricos que perturbam fortemente os níveis de energia do gás participante. A maior contribuição no alargamento de linhas espectrais, para condições de engenharia envolvendo radiação no infravermelho é por colisão, apresentado a seguir [Siegel e Howell, 2002].

### 3.4.1 Alargamento por colisão

Com o acréscimo da pressão do gás, a taxa de colisão dos átomos ou molécula aumenta. As colisões podem perturbar os estados de energia dos átomos e moléculas, resultando em alargamento por colisão das linhas espectrais. O modelo do alargamento da linha baseia-se no perfil de Lorentz:

$$\frac{\kappa_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_C / \pi}{\gamma_C^2 + (\eta - \eta_{ij})^2}, \quad (3.23)$$

$S_{ij}$  é a intensidade de linha, dada por  $S_{mn} = \int_0^{\infty} \kappa_{\eta,ij}(\eta) d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} \kappa_{\eta,ij}(\eta) d(\eta - \eta_{ij})$ . Sendo  $\gamma_c$  a meia largura do alargamento, determinado pela taxa de colisão, aproximado por:

$$\gamma_c = \frac{1}{2\pi c_0} \frac{4\sqrt{\pi} D^2 p_g}{(M k_B T)^{1/2}}, \quad (3.24)$$

onde  $D$  é o diâmetro da molécula,  $M$  é a massa da molécula, e  $p_g$  é a pressão parcial do gás e  $k_B$  é a energia cinética da molécula.

Conforme a Eq. (3.24), a meia largura por colisão é proporcional à pressão e inversamente proporcional à temperatura, indicando que o alargamento por colisão é dominante em situações com altas pressões e baixas temperaturas. Segundo com Wang e Modest, 2004, o perfil de Lorentz apresenta bons resultados para casos em que a pressão total é maior ou igual a 1 atm e a temperatura é inferior a 2500 K.

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

A solução da RTE, Eq. (3.22) envolve a determinação do comportamento espectral do coeficiente de absorção. O modelo de soma ponderada de gases cinza (WSGG) foi proposto por Hottel e Sarofin, 1967 e baseia-se na proposta de substituição da variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinza. Em cada gás cinza o coeficiente de absorção pode ser considerado constante, conforme a Figura 3.5:

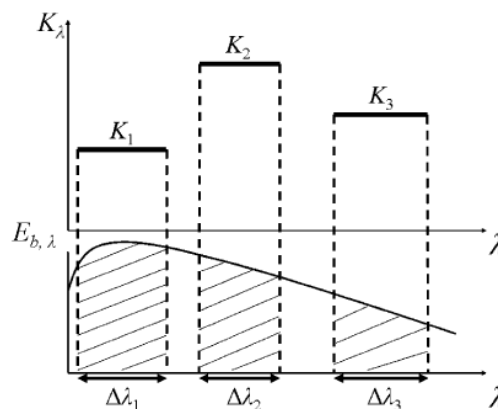


Figura 3.5 – Representação de três gases cinzas para um meio participante [Mauren et al. 2008].

Neste modelo a integração da emitância espectral, para o cálculo da emitância total ao longo de um caminho é calculada por:

$$\varepsilon(pS) = \sum_{i=0}^{N_G} a_j(T) (1 - e^{-\kappa_j pS}), \quad (3.25)$$

onde  $\kappa_j$  é o coeficiente de absorção por unidade de pressão e  $a_j$  é o correspondente ao coeficiente de ponderação para o  $j$ -ésimo gás cinza, e  $N_G$  é o número de gases cinza considerados. O coeficiente de ponderação depende apenas da temperatura do gás e representa a fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza  $\kappa_j$ .

Segundo Smith et al., 1982, os coeficientes de ponderação  $a_j$  podem ser representados por um polinômio:

$$a_j(T) = \sum_{k=1}^K b_{j,k} T^{k-1}, \quad (3.26)$$

onde  $b_{j,k}$  corresponde aos coeficientes polinomiais,  $K-1$  é o grau do polinômio e  $j$  é o gás cinza ( $j=1, \dots, N_G$ ). Smith et al., 1982, obtiveram coeficientes polinomiais para ajustar valores de emitância total de mistura gasosa de vapor de água e dióxido de carbono para temperaturas de 600 K a 2400 K, e produto de pressão parcial pelo caminho de 0,001 atm·m até 10 atm·m.

Para as janelas espectrais o coeficiente de absorção é nulo, entretanto, a fim de se garantir o balanço de energia, o coeficiente de ponderação  $a_0$  é diferente de zero e calculado conforme:

$$a_0(T) = 1 - \sum_{j=1}^{N_G} a_j \quad (3.27)$$

O coeficiente de absorção é obtido para cada gás em separado. Para misturas, o coeficiente de absorção para cada gás cinza pode ser calculado como uma função da pressão total,  $p$ , e da concentração das espécies participantes ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ) conforme:

$$\kappa_j = \kappa_{p,j} p (X_{CO_2} + X_{H_2O}) \quad (3.28)$$

Smith et al., (1982), obtiveram os coeficientes  $\kappa_j$  e  $a_j$  para misturas de dióxido de carbono e vapor de água baseado nos valores de emitância total obtidos pelo modelo de banda larga exponencial (EWB - *exponential wide band*). São estas correlações incorporadas no Ansys Fluent, 2011b.

Modest, 1991, demonstrou que o modelo WSGG pode ser empregado com qualquer método de solução espacial da equação da transferência radiativa:

$$\frac{dI_j}{dS} = -p_a \kappa_{p,j} I_j + p_a \kappa_{p,j} a_j I_b \quad (3.29)$$

Sendo  $p_a$  a pressão parcial, definida por  $p_a = p(X_{CO_2} + X_{H_2O})$  e  $p$  a pressão total (1,0 atm neste trabalho). Após a solução da Eq. (3.29) para cada gás cinza  $j$ , a intensidade total local  $I$ , necessária para o cálculo do fluxo de calor radiativo e do termo fonte radiativo, pode ser determinada somando a contribuição de cada intensidade parcial de gás cinza, incluindo a intensidade parcial relacionada para as janelas transparentes, na qual  $j = 0$ , com  $\kappa_{p,j} = 0$ :

$$I = \sum_{j=0}^j I_j \quad (3.30)$$

O termo fonte radiativo pode ser determinado por:

$$S_{Rad} = -\nabla \cdot \vec{q}_R = \kappa_j \left[ \left( \int_{4\pi} I d\omega \right) - 4\pi I_b \right] \quad (3.31)$$

No trabalho de Dorigon et al., (2013) foram propostos novos coeficientes para o modelo WSGG, realizando o ajuste das curvas de emitância total em relação às calculadas a partir da integração linha-por-linha, usando as linhas espectrais obtidas através da base de dados espectrais HITEMP 2010. Os coeficientes foram obtidos para 4 gases cinza para uma mistura de dióxido de carbono e vapor de água para razões de pressão parcial  $p_{H_2O} / p_{CO_2} = 1$

e  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$  (Tabela 3.1) e são válidas para temperaturas entre 400K e 2500K. São apresentadas apenas as correlações obtidas para  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$ , utilizadas neste trabalho.

Tabela 3.1 - Coeficientes do modelo WSGG para  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$  [Dorigon et al., 2013]

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

As correlações propostas por Dorigon et al., 2013, apresentam resultados mais precisos, quando comparados com as obtidas por Smith et al., 1982, visto que utiliza base de dados espectrais mais atuais. Orbegoso et al., 2016, em seu estudo numérico da transferência de calor por radiação em processos de combustão turbulenta com diferentes modelagens, incluindo o modelo WSGG, concluiu que os diferentes modelos apresentam discrepâncias menores do que com a solução linha-por-linha, e entendeu-se que estes resultados são fortemente influenciados pela modelagem da combustão, evidenciando a dependência entre os fenômenos.

No trabalho de Rodrigues, 2016, foram encontradas significativas diferenças entre as correlações obtidas por Smith et al., 1982 utilizando o código Ansys Fluent, com as correlações propostas por Dorigon et al., 2013, incorporadas a simulação via sub-rotinas programadas em linguagem C, chamadas de UDFs (*user defined functions*). Neste trabalho, um teste realizado com o modelo WSGG do código Ansys Fluent apresentou pico de fluxo de calor radiativo 50% inferior que o calculado com a sub-rotina UDF.

### 3.5 Modelos espaciais para solução da equação de transferência radiativa

Segundo Modest, 2003, os fenômenos que tornam complexos os problemas de transferência de calor radiativa podem ser agrupados em quatro categorias, que justificam o uso da modelagem numérica frente à sua solução exata. São elas:

- Geometria: os problemas podem ser unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais.
- Campo de temperatura: a situação mais simples é considerar o meio participante isotérmico e com a temperatura conhecida. Porém, para casos mais complexos, a transferência de calor por radiação é combinada com condução e/ou convecção, portanto o perfil de temperatura é desconhecido e não uniforme.
- Espalhamento: a solução de problemas de radiação é significativamente simplificada se o meio não espalha. No entanto, quando o espalhamento é considerado, geralmente considera-se espalhamento isotrópico (problemas considerando espalhamento anisotrópico são escassos e ainda limitados a problemas lineares).
- Propriedades radiativas: a maioria dos meios participantes possuem propriedades radiativas com comportamento não-cinzas (dependência espectral), e que dependem também da temperatura e da concentração de espécies.

Grande parte dos trabalhos, atualmente, envolvendo transferência de calor por radiação utiliza um dos seguintes métodos para a solução da RTE: método de harmônicas esféricas, método de ordenadas discretas (*discrete ordinates method*- DOM); método das zonas; método de Monte Carlo; e método de transferência discreta (*discrete transfer radiation model*- DTRM). Os métodos de harmônicas esféricas e DOM fazem aproximações direcionais, enquanto o método das zonas faz aproximações espaciais, com subdivisões da cavidade em subvolumes finitos isotérmicos. O método de Monte Carlo, por outro lado, é um método estatístico, no qual fótons são lançados no interior da cavidade e cada um é acompanhado, contabilizando em que ponto são absorvidos, emitidos ou espalhados. O método de transferência discreta é uma combinação de características dos métodos das ordenadas discretas, das zonas e Monte Carlo [Modest, 2003].

Segundo Bidi et al., 2008, em simulações de radiação em processos de combustão, o método das ordenadas discretas é a melhor escolha para a solução da RTE, uma vez que com este método pode-se considerar os efeitos radiativos de gases não-cinzas e os efeitos de espalhamento, e ainda é válido para amplas faixas de espessuras ópticas. O método das ordenadas discretas apresenta ainda boa relação entre precisão dos resultados e demanda computacional [Coelho, 2007, Bidi et al., 2008].

### 3.5.1 Método das ordenadas discretas – DOM

A transferência de calor radiativa é efetivamente computada na equação da conservação de energia como o negativo do divergente do fluxo de calor radiativo, Eq. (3.31). O método das ordenadas discretas, proposto por Chandrasekhar, 1960, é baseado em uma representação discreta da dependência direcional da intensidade radiativa. Dessa forma a solução para o problema de transporte radiativo é encontrada resolvendo a RTE para um conjunto de direções discretas que totalizam o ângulo sólido  $4\pi$ . A RTE é então escrita para cada ordenada direcional discreta e seus termos integrais são substituídos por quadraturas numéricas somadas para todas as direções discretas.

No DOM as integrais são substituídas por quadraturas numéricas, uma forma genérica de apresentá-las seria:

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\omega = \sum_{m=1}^M w_m f(\vec{s}_m), \quad (3.32)$$

onde  $M$  é o número de direções e  $w_m$  são os pesos das quadraturas associadas as direções  $\vec{s}_m$ . A RTE, Eq. (3.22) pode ser aproximada por um conjunto  $M$  de equações,

$$dI_\eta(S, \vec{s}_m) = -\kappa_\eta(S) I_\eta(S, \vec{s}_m) dS + \kappa_\eta(S) I_{b,\eta}(S) dS \quad (3.33)$$

O fluxo de calor radiativo espectral, dentro do meio ou em uma superfície, é determinado por:

$$\vec{q}_{rad\eta}(S) = \int_{4\pi} I_\eta(S, \vec{s}) \vec{s} d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S) \vec{s}_m \quad (3.34)$$

Maiores detalhes, casos com espalhamento, e informações sobre o DOM são encontrados em Raithby e Chui, 1990 e Modest, 2003.

### 3.6 Interação Turbulência-Radiação

A interação turbulência radiação é usualmente modelada, no termo de absorção da RTE, com a aproximação OTFA e se mostrou válida em diferentes chamas e diversos problemas [Li e Modest 2002a, Coelho et al., 2003]. Para o termo de emissão da RTE há diferentes abordagens, neste trabalho são empregados dois modelos, apresentados nas seções a seguir.

#### 3.6.1 Modelagem considerando o efeito da temperatura

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

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\overline{\kappa I} + \overline{\kappa I_b} \quad (3.35)$$

O primeiro termo da RTE pode ser escrito como a soma da média, indicada pela barra, com a flutuação indicada pelo subíndice linha:

$$\overline{\kappa I} = \overline{\kappa I} + \overline{\kappa' I'} \quad (3.36)$$

Pela aproximação OTFA  $\overline{\kappa' I'} \approx 0$ , assume-se que o livre caminho médio da radiação é muito maior que a escala integral do escoamento turbulento. Reescrevendo a RTE, abrindo  $I_b$  como  $\sigma T^4 / \pi$ :

$$\frac{d\bar{I}}{dS} = -\overline{\kappa I} + \frac{\overline{\kappa \sigma T^4}}{\pi} \quad (3.37)$$

Extraindo as constantes no termo de emissão:



$$\frac{d\bar{l}}{dS} = -\bar{\kappa}\bar{l} + \frac{\sigma}{\pi} \overline{\kappa T^4} \quad (3.38)$$

Pode-se entender então que o segundo termo do lado direito da RTE é proporcional a  $\overline{\kappa T^4}$ . Fazendo 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:

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa}\bar{T}^4 \left( 1 + \frac{6\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + \frac{4\overline{T'^3}}{\bar{T}^3} + \frac{\overline{T'^4}}{\bar{T}^4} + \frac{4\overline{\kappa'T'}}{\bar{\kappa}\bar{T}} + \frac{6\overline{\kappa'T'^2}}{\bar{\kappa}\bar{T}^2} + \frac{4\overline{\kappa'T'^3}}{\bar{\kappa}\bar{T}^3} + \frac{\overline{\kappa'T'^4}}{\bar{\kappa}\bar{T}^4} \right) \quad (3.39)$$

Segundo proposta de Snegirev, 2004, apenas as correlações de ordem mais baixa são suficientes para modelar o problema:

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa}\bar{T}^4 \left( 1 + \frac{6\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + \frac{4\overline{\kappa'T'}}{\bar{\kappa}\bar{T}} \right) \quad (3.40)$$

Os termos  $\overline{T'^2}$  e  $\overline{\kappa'T'}$  necessitam ser modelados como funções dos parâmetros médios do escoamento. Segundo Habibi et al., 2007a, as concentrações das espécies possuem menor influência sobre as interações TRI quando comparadas a temperatura. Dessa forma, Snegirev, 2004, propõe desprezar as flutuações das concentrações das espécies para calcular  $\overline{\kappa'T'}$ , a mesma aproximação é utilizada em Centeno et al., 2016, Yi et al., 2018, Yang et al., 2019. Com isso, o coeficiente de absorção que depende da temperatura e da concentração das espécies participantes é modelado por uma série de Taylor que considera apenas a dependência da temperatura, dessa forma  $\kappa(T) = \kappa(\bar{T} + T')$ . A série de Taylor é escrita por:

$$\kappa(T) \approx \kappa(\bar{T}) + T' \left. \frac{\partial \kappa}{\partial T} \right|_{\bar{T}} + \frac{T'^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \right|_{\bar{T}} + \dots \quad (3.41)$$

Fazendo a média da equação (3.41) chega-se ao termo  $\bar{\kappa}$ , mas deseja-se obter  $\kappa'$ , então usa-se a relação  $\kappa' = \kappa - \bar{\kappa}$ . Ao multiplicar por  $T'$  e aplicar a média chega-se a uma aproximação, novamente considerando apenas o termo de ordem mais baixa como suficiente para modelagem:

$$\overline{\kappa' T'} = \overline{T'^2} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} + \frac{\overline{T'^3}}{3} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}} - \frac{\overline{T' T'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}} + \dots \approx \overline{T'^2} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \quad (3.42)$$

Substituindo  $\overline{\kappa' T'}$  na Eq. (3.34), chega-se a [Snegirev, 2004]:

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \bar{T}^4 \left( 1 + \frac{6\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + \frac{4\overline{T'^2}}{\bar{\kappa} \bar{T}} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \right) \quad (3.43)$$

Duas constantes foram obtidas através de ajustes na relação experimental entre  $\frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2}$  e  $\frac{\overline{\kappa T^4}}{\bar{\kappa} \bar{T}^4}$ :

$$\overline{\kappa T^4} = \bar{\kappa} \bar{T}^4 \left( 1 + C_{TRI1} \frac{6\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} + C_{TRI2} \frac{4\overline{T'^2}}{\bar{\kappa} \bar{T}} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}} \right) \quad (3.44)$$

A Eq. (3.44) será usada como uma aproximação para  $\overline{\kappa T^4}$  permitindo a inclusão das flutuações turbulentas de temperatura. As constantes do modelo,  $C_{TRI1}$  e  $C_{TRI2}$  são consideradas valendo 2,5 e 1,0, respectivamente, propostas em Snegirev, 2004. Pode-se considerar que esta é uma correção de um fator  $\alpha$ :

$$\alpha_{TRI} = \left( 1 + C_{TRI1} \frac{\overline{6T'^2}}{\overline{T}^2} + C_{TRI2} \frac{\overline{4T'^2}}{\overline{\kappa T}} \left. \frac{\partial \kappa}{\partial T} \right|_{\overline{T}} \right) \quad (3.45)$$

Assim, voltando pra RTE:

$$\frac{d\overline{I}}{ds} = -\overline{\kappa I} + \alpha_{TRI} \overline{\kappa I_b} \quad (3.46)$$

Considerando aplicação do modelo WSGG, a RTE pode ser escrita conforme Eq. (3.29), o coeficiente de absorção pode ser expresso por  $\kappa_j a_j$  e portanto na Eq.(3.45) a derivada do coeficiente de absorção conduz a derivada do coeficiente de ponderação  $a_j$ :

$$\alpha_{TRI} = \left( 1 + C_{TRI1} 6 \frac{\overline{T'^2}}{\overline{T}^2} + C_{TRI2} 4 \frac{\overline{T'^2}}{a_j(\overline{T}) \overline{T}} \left. \frac{\partial a_j}{\partial T} \right|_{\overline{T}} \right) \quad (3.47)$$

A derivada do coeficiente de ponderação é expressa por:

$$\frac{\partial a_j}{\partial T} = \sum_{k=1}^{j+1} (k-1) b_{j,k} T^{k-2} \quad (3.48)$$

Com isso, a RTE pode ser escrita por:

$$\frac{d\overline{I}_j}{ds} = -p_a \kappa_{p,j} \overline{I}_j + \alpha_{TRI} p_a \kappa_{p,j} a_j(\overline{T}) \overline{I}_b(\overline{T}) \quad (3.49)$$

O único termo a ser determinado na Eq. (3.45) é a variância da flutuação da

temperatura e uma equação de transporte adicional será utilizada, conforme proposto por Snegirev, 2004:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho \bar{u} \overline{T'^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \rho \bar{v} \overline{T'^2} \right) = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \left( \mu + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \overline{T'^2}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\mu_t}{Pr_t} \left( \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right)^2 - C_T \rho \overline{T'^2} \frac{\varepsilon}{k}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde  $C_T = 2,0$  é a constante do modelo. Observa-se que a equação se relaciona ao modelo  $k-\varepsilon$  padrão, sendo a energia cinética turbulenta  $k$  e taxa de dissipação  $\varepsilon$  parte do termo fonte da equação de transporte. Segundo Snegirev, 2004, a condição de contorno para esta equação de transporte é variância da flutuação da temperatura nula nas fronteiras. A Eq. (3.50) será resolvida juntamente com as equações governantes do escoamento.

Por outro lado, o modelo PDF apresentado na seção 2.6 permite a obtenção da variância da temperatura através da integração com a função beta, segundo Enami e Fard, 2012, a variância para temperatura pode ser obtida por:

$$\overline{T'^2} = \int_0^1 \left( T(Z, \chi_{ST}) - \bar{T} \right)^2 P(Z) dZ \quad (3.51)$$

Dessa forma, a variância de temperatura obtida diretamente do modelo PDF será empregada na modelagem do termo de emissão da RTE e seu resultado será comparado com a proposta original de Snegirev, 2004.

### 3.6.2 Modelagem considerando o efeito da Temperatura e das Concentrações

A modelagem considerando os efeitos da temperatura e concentrações das espécies participantes baseia-se no trabalho de Fraga et al., 2020b. A proposta consiste em modelar o termo de emissão, mas diferentemente do proposto por Snegirev, 2004, em que o coeficiente de absorção foi determinado a partir de uma Série de Taylor no qual apenas a dependência da temperatura foi considerada (Eq. 3.41), em Fraga et al., 2020b, o coeficiente de absorção foi determinado a partir de uma Série de Taylor de multivariáveis, considerando a dependência da temperatura  $T$  e as espécies  $X$ . A seguir será apresentado o desenvolvimento do modelo

proposto por Fraga et al., 2020b. A expansão em Série de Taylor de multivariáveis é apresentada na Eq. (3.52) para uma função genérica  $f(x, y)$ :

$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)(x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)(y - y_0) + \frac{1}{2!} \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0)(x - x_0)^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0, y_0)(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0)(y - y_0)^2 \right] \quad (3.52)$$

Considerando  $\kappa(T, X)$ , assumindo que  $f = \kappa$ ,  $x = T$ ,  $y = X$ ,  $x_0 = \bar{T}$ ,  $y_0 = \bar{X}$ . Sabe-se que a variância pode ser obtida por:  $T' = T - \bar{T}$ ,  $X' = X - \bar{X}$ . Chega-se assim a:

$$\kappa(T, X) = \kappa(\bar{T}, \bar{X}) + \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} (T') + \frac{\partial \kappa}{\partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} (X') + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} (T')^2 + 2 \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} (T')(X') + \frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} (X')^2 \right] + \dots \quad (3.53)$$

Aplicando a média, sabe-se que  $\overline{T'} = 0$ , chega-se a:

$$\bar{\kappa}(T, X) = \kappa(\bar{T}, \bar{X}) + \frac{1}{2} \left[ \overline{T'^2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + 2 \overline{T'X'} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \overline{X'^2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \right] \quad (3.54)$$

Organizando-se os termos:

$$\bar{\kappa}(T, X) = \kappa(\bar{T}, \bar{X}) + \frac{\overline{T'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \overline{T'X'} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \frac{\overline{X'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \quad (3.55)$$

Sabendo que a dependência do coeficiente de absorção com as espécies participantes é linear, o último termo do lado direito é nulo. Assim:

$$\bar{\kappa}(T, X) = \kappa(\bar{T}, \bar{X}) + \frac{\overline{T'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \overline{T'X'} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \quad (3.56)$$

O objetivo é encontrar  $\kappa'$ , então usa-se a relação  $\kappa' = \kappa - \bar{\kappa}$ :

$$\begin{aligned} \kappa'(T, X) = & T' \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + X' \frac{\partial \kappa}{\partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \frac{T'^2}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + T'X' \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \frac{X'^2}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \\ & - \frac{\overline{T'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} - \overline{T'X'} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} - \frac{\overline{X'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Sabendo-se que  $\frac{\partial^2 \kappa}{\partial X^2} = 0$ , pois no modelo WSGG  $\frac{\partial \kappa}{\partial X} = cte$  para cada gás,

chega-se à seguinte relação:

$$\begin{aligned} \kappa'(T, X) = & T' \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + X' \frac{\partial \kappa}{\partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \frac{T'^2}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + T'X' \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \\ & - \frac{\overline{T'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} - \overline{T'X'} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \end{aligned} \quad (3.58)$$

Multiplicando-se pela Eq (4.7) por  $T'$ :

$$\begin{aligned} \kappa'T' = & T'^2 \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + T'X' \frac{\partial \kappa}{\partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + \frac{T'^3}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + T'^2 X' \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \\ & - \frac{T'\overline{T'^2}}{2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} - T'\overline{T'X'} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \end{aligned} \quad (3.59)$$

Utilizando a aproximação de que os termos significativos são o de menor ordem, assim como na proposta de Snegirev, 2004:

$$\overline{\kappa'T'} \approx \overline{T'^2} \left. \frac{\partial \kappa}{\partial T} \right|_{\bar{T}, \bar{X}} + \overline{T'X'} \left. \frac{\partial \kappa}{\partial X} \right|_{\bar{T}, \bar{X}} \quad (3.60)$$

No trabalho de Fraga et al., 2020b, para modelagem de  $\overline{T'X'}$  foram estabelecidas constantes através da relação entre  $\overline{T'X'}/\overline{T\bar{X}}$  e  $\overline{T'^2}/\overline{\bar{T}^2}$  através de resultados obtidos em uma simulação LES de chamas do tipo poça de etanol e metanol. Neste caso, os dados disponíveis apresentaram uma relação linear entre  $T'$  e  $X'$ . Para o termo  $\overline{\kappa'T'}$  não foi possível estabelecer uma curva de ajuste, com base nos resultados obtidos nas simulações LES, portanto a expressão em termos de  $\bar{\kappa}$  e  $\overline{T'^2}$ :

$$\overline{\kappa'T'} \approx \overline{T'^2} \left( c_{\kappa T,1} \left. \frac{\partial \kappa}{\partial T} \right|_{\bar{T}, \bar{X}} + c_{\kappa T,2} \frac{\bar{X}}{\bar{T}} \left. \frac{\partial \kappa}{\partial X} \right|_{\bar{T}, \bar{X}} \right) \quad (3.61)$$

Sendo  $c_{\kappa T,1} = 0,34$  e  $c_{\kappa T,2} = 0,72$ . Além disso, o coeficiente de absorção foi modelado utilizando a Eq (3.56), substituindo  $\overline{T'X'}$ :

$$\bar{\kappa}(T, X) = \kappa(\bar{T}, \bar{X}) + \overline{T'^2} \left( c_{\kappa,1} \left. \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \right|_{\bar{T}, \bar{X}} + c_{\kappa,2} \frac{\bar{X}}{\bar{T}} \left. \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \right|_{\bar{T}, \bar{X}} \right) \quad (3.62)$$

Com  $c_{\kappa,1} = 0,34$  e  $c_{\kappa,2} = 1,42$ . Com a aproximação do termo  $\overline{\kappa'T'}$  e do coeficiente de absorção, Fraga et al., 2020b, propõe um novo modelo para o termo de emissão da RTE no qual as concentrações das espécies participantes são consideradas, utilizando a expansão acima apresentada. Com isso os autores estabeleceram constantes que permitem a implementação do modelo em simulações RANS. O termo de emissão da RTE pode ser calculado por:

$$\overline{\kappa T^4} = \beta_{TRI} \bar{\kappa} \bar{T}^4, \quad (3.63)$$

onde  $\beta_{TRI}$  é o novo fator de correção proposto por Fraga et al., 2020b, calculado por:

$$\beta_{TRI} = \beta_{\bar{\kappa}} \left( 1 + f_T \sigma_{T^2} + f_{\kappa T} \sigma_{\kappa T} \right) \quad (3.64)$$

O termo  $\beta_{\bar{\kappa}}$  se relaciona a modelagem do coeficiente de absorção e é determinado por:

$$\beta_{\bar{\kappa}} = 1 + \frac{\overline{T'^2}}{\kappa(\bar{T}, \bar{X})} \left( c_{\kappa,1} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T^2} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + c_{\kappa,2} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial T \partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \right) \quad (3.65)$$

Os termos  $f_T$  e  $f_{\kappa T}$  são relacionados a autocorrelação da temperatura e correlação do coeficiente de absorção e temperatura, respectivamente e são calculados por:

$$f_T = a_T \sigma_{T^2} + b_T \quad (3.66)$$

$$f_{\kappa T} = a_{\kappa T} \sigma_{\kappa T} + b_{\kappa T} \quad (3.67)$$

Por fim, os fatores  $\sigma_{T^2}$  e  $\sigma_{\kappa T}$  são calculados por:

$$\sigma_{T^2} = 6 \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}^2} \quad (3.68)$$

$$\sigma_{\kappa T} = \frac{4}{\beta_{\bar{\kappa}} \kappa(\bar{T}, \bar{X})} \frac{\overline{T'^2}}{\bar{T}} \left( c_{\kappa T,1} \frac{\partial \kappa}{\partial T} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} + c_{\kappa T,2} \frac{\bar{X}}{\bar{T}} \frac{\partial \kappa}{\partial X} \Big|_{\bar{T}, \bar{X}} \right) \quad (3.69)$$

O resumo das constates utilizadas são apresentadas na Tabela 3.2:



Tabela 3.2 – Constantes do modelo proposto por Fraga et al., 2020b.

$a_T$	0.273	$a_{\kappa T}$	1.33	$c_{\kappa,1}$	0.341	$c_{\kappa T,1}$	0.344
$b_T$	1.28	$b_{\kappa T}$	0.624	$c_{\kappa,2}$	1.42	$c_{\kappa T,2}$	0.715

Por fim, a RTE pode ser escrita por:

$$\frac{d\bar{I}_j}{ds} = -p_a \kappa_{p,j} \bar{I}_j + \beta_{TRI} p_a \kappa_{p,j} a_j(\bar{T}) I_b(\bar{T}) \quad (3.70)$$

O fluxograma da próxima seção descreve o processo de solução do código Ansys Fluent, com a inclusão de sub-rotinas definidas pelo usuário as quais são incorporados os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$ .

### 3.6.3 Modelagem utilizando modelo de combustão PDF

Por fim, uma possibilidade que permitiria resolver integralmente o termo de emissão da RTE seria utilizar a função densidade de probabilidade  $P(Z)$  apresentada anteriormente. Com isso, seria calculado diretamente o termo de emissão, sem a necessidade das correlações mencionadas acima, o que possibilitaria a obtenção do resultado preciso [Coelho 2007, Consalvi e Nmira, 2016]. Esta abordagem é apresentada como um trabalho futuro para esta pesquisa. Escrevendo conforme Coelho et al., 2003:

$$\overline{\kappa_j a_j I_b} = \int_0^1 \kappa_j(Z, \chi_{ST}) a_j(Z, \chi_{ST}) I_b(Z, \chi_{ST}) P(Z) dZ \quad (3.71)$$

## 4 METODOLOGIA

A ênfase deste trabalho é o estudo numérico da abordagem TRI para três chamas. Para avaliar a empregabilidade dos modelos estudados foi realizada uma comparação entre o fluxo de calor radiativo obtido numericamente com seu valor experimental. O fluxo de calor radiativo experimental foi obtido neste trabalho para duas chamas, para a terceira chama apenas foram utilizados os dados já disponíveis, produzidos em Quezada, 2018. A metodologia se divide em uma seção experimental e uma seção numérica.

### 4.1 Procedimento experimental

O procedimento experimental realizado nesta pesquisa é esquematizado na Figura 4.1. A mistura de combustível é composta de gás natural, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> sendo as composições discutidas nas seções de cada chama. A vazão de cada gás foi medida por controladores eletrônicos do tipo *Omega FMA-2600*, *Bronkhorst F-112AC* e *Bronkhorst F-112AC* com incertezas menores de  $\pm 0.8\%$  na escala de leitura. A mistura adequada das espécies foi fornecida através de um tubo de gás de 2 m antes da entrada do queimador.

O planejamento da composição da mistura foi realizado previamente, através de testes. Foram avaliados os seguintes aspectos: (i) chama livre de partículas de fuligem, dessa forma as chamas estudadas eram completamente azuis, (ii) escoamento turbulento, era necessário que a chama estivesse em regime de combustão turbulenta para estudar efeitos TRI, (iii) base da chama ancorada ao queimador, a modelagem numérica da cinética química empregada neste trabalho dependia desta configuração. Ao iniciar os testes com gás natural diluído em CO<sub>2</sub> foi possível perceber que para atingir regime turbulento e sem fuligem, a diluição de CO<sub>2</sub> seria superior a 50%. Com a composição de gás natural e CO<sub>2</sub>, o incremento da velocidade de entrada do combustível, que produz o aumento da turbulência da chama, produz também o descolamento da chama na base do queimador. Para resolver esta dificuldade foi incluído H<sub>2</sub>, o que garantiu que a chama permanecesse ancorada e favoreceu a formação de gás participante, (H<sub>2</sub>O), no processo de transferência de calor por radiação.

O queimador utilizado é do tipo jato convencional com diâmetro interno igual a 10,13 mm. As medidas do fluxo de calor radiativo foram feitas a uma distância radial de 0,3 m, em dezoito pontos paralelos ao eixo vertical da chama. A posição inicial é 0,36 m abaixo da saída do queimador, e foram realizadas medidas em passos de 9 cm.

As medidas de fluxo de calor radiativo foram obtidas com o transdutor de fluxo de calor radiativo MEDTHERM 64.05-20/ZnSeW-1C com a taxa de aquisição de dados de 3,3 Hz durante 20 s. O transdutor possui uma janela para tornar insignificante a transferência de calor por convecção. O material é seleneto de zinco que possui transmitância constante de 70 % em um espectro entre 0,7 – 17  $\mu\text{m}$  e ângulo de incidência de até 60 °. Intensidades de ângulos maiores de 60 ° representam menos de 1 % do total medido. O sensor foi resfriado com banho térmico de água para manter constante a temperatura de referência durante a medida. Cada medição de fluxo de calor radiativo corresponde ao valor médio, de uma série de medições, das intensidades produzidas pela chama subtraída da radiação de fundo.

As incertezas foram estimadas com desvio padrão de  $\pm 2\sigma$  e intervalo de confiança de 95 %. O procedimento de medição se baseou no trabalho de Quezada et al., 2020. Maiores informações a respeito dos equipamentos e da técnica de medição podem ser encontradas em Quezada, 2018.

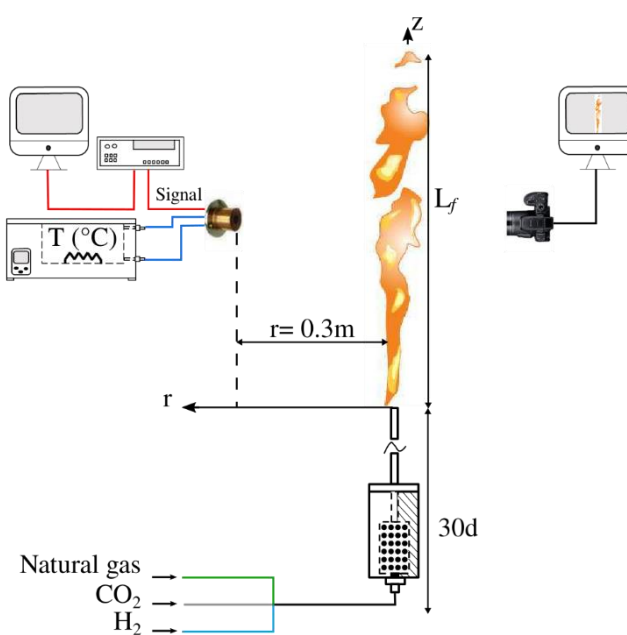


Figura 4.1 – Descrição do experimento.

## 4.2 Modelagem numérica

O código ANSYS Fluent, versão 19.0 foi utilizado para a obtenção da solução numérica. A modelagem da turbulência foi realizada com as equações RANS em regime estacionário. O modelo utilizado foi o  $k-\varepsilon$  padrão com a modificação da constante  $C_1$  de 1,44 para 1,60 conforme proposto por Pope, 1978 e Morse, 1980. As equações resolvidas para a

energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação são as Equações (2.13) e (2.14) respectivamente.

A solução reativa do escoamento baseia-se no modelo de combustão SLDF e possui uma etapa de pré-processamento e outra de processamento, conforme o fluxograma, Figura 4.2.

O pré-processamento consiste no cálculo dos *flamelets*, de acordo com as Equações (2.24) até (2.29). As taxas de produção/destruição das espécies foram resolvidas com o mecanismo de cinética química GRI-Mech 3.0 [Smith et al., 1999] que consiste em 325 reações químicas elementares e contém 53 espécies participantes, acoplado ao ChemKin versão 4.0, incorporado ao código Ansys Fluent, para a solução das equações de transporte e com base na tabela de polinômios da NASA [McBride et al., 1993] para o cálculo das propriedades termofísicas das espécies químicas. A taxa de dissipação do escalar estequiométrica inicia em  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  e tem passo de incremento de  $1 \text{ s}^{-1}$ . A tabela termoquímica é construída com as soluções laminares, parametrizadas em função de  $Z$  e  $\chi_{st}$ .

A integração dos valores médios para a temperatura, a massa específica da mistura e as frações mássicas das espécies é realizada conforme a Eq. (2.42). As variáveis de integração utilizadas nas PDFs são fração de mistura e da taxa de dissipação do escalar estequiométrica.

Cada variável de controle assumiu um valor fixo de pontos para sua composição, sendo empregado refinamento automático nas regiões nas quais são esperados maiores gradientes das propriedades armazenadas, em  $Z$  concentrado em torno da estequiometria, e em  $Z^{n2}$  mais próximo de 0. A quantidade de pontos utilizada é apresentada na Tabela 4.1. As chamas 1 e 2 estudadas são do mesmo combustível e, portanto, as mesmas tabelas foram utilizadas. A extinção de chama ocorre em  $112 \text{ s}^{-1}$ . Para a chama 3 a extinção ocorreu em  $100 \text{ s}^{-1}$ . Para a entalpia média da mistura, em ambos os casos foram utilizados 35 pontos para discretização.

Tabela 4.1 – Quantidade de pontos para cada variável de controle nas tabelas termoquímicas para armazenamento dos escalares reativos

	$Z$	$Z^{n2}$	$\chi_{st}$	$h$
Chamas 1 e 2	91	37	112	35
Chama 3	89	44	100	35

Ressalta-se que 14 espécies com as maiores frações mássicas foram incluídas às tabelas termoquímicas, são elas  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO$ ,  $H$ ,  $H_2$ ,  $O$ ,  $O_2$ ,  $OH$ ,  $N_2$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_3H_8$ . Segundo Galpin, 2008, apenas as 5 primeiras já representam 98,2 % da massa e energia total da mistura, e seguidas de  $N_2$  e  $O_2$  permitem uma descrição completa das propriedades de uma chama de metano e ar.

Estas são as etapas de pré-processamento, anteriores à solução de transporte do escoamento, reduzindo o tempo computacional, uma vez que não é preciso parar o processo de solução para calcular propriedades. O fluxograma do processo de solução, Figura 4.2, indica as etapas de pré-processamento e pós-processamento:

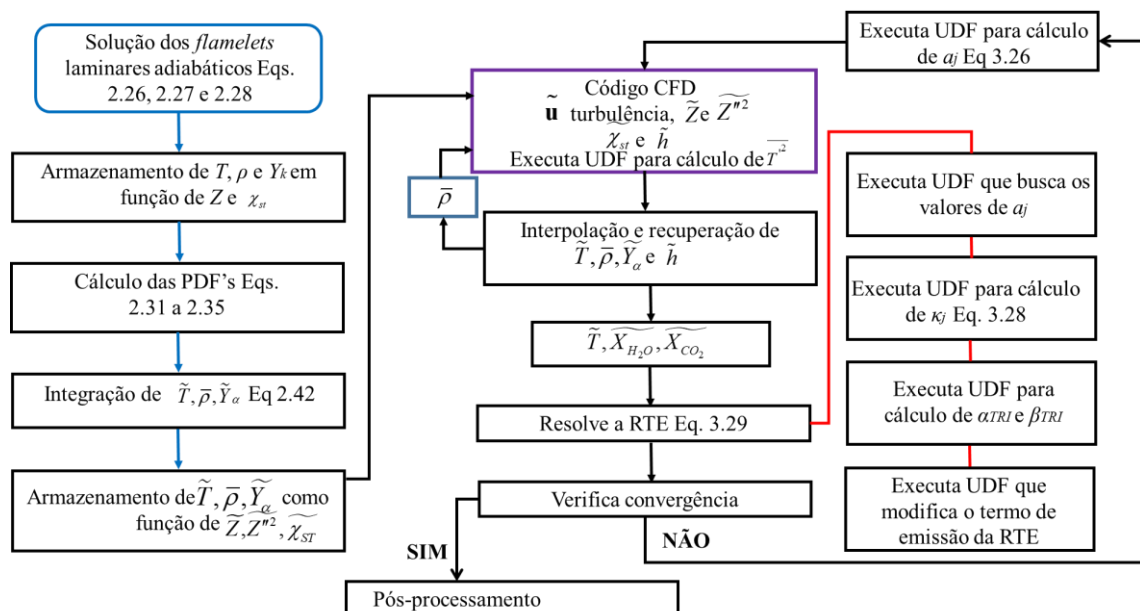


Figura 4.2 – Fluxograma com etapas empregadas na solução do problema.

As rotinas definidas pelo usuário, UDFs, possuem nome e estrutura própria no código ANSYS Fluent para a modificação de cada modelo. Ao iniciar o processo de solução é executado o cálculo dos fatores de ponderação  $a_j$ , do modelo WSGG (Eq. 3.26), para que, durante o processo de solução somente acesse o valor previamente calculado para  $a_j$  e o utilize na RTE. Durante o processamento da solução do escoamento devem ser resolvidas as equações utilizadas para determinar os valores locais das variáveis dependentes armazenadas na tabela termoquímica, são elas Equações (2.43), (2.44) e (2.45). A variância da temperatura, determinada a partir da equação de transporte (3.50) foi obtida com UDFs para equação de

transporte de um escalar e são executadas juntamente com as demais equações de transporte do escoamento.

São executadas 4 rotinas para o cálculo da RTE, para obtenção do fator de ponderação  $a_j$  do modelo WSGG, para o coeficiente de absorção  $\kappa_j$ , para os fatores TRI,  $\alpha_{TRI}$  ou  $\beta_{TRI}$ , e para a modificação do termo de emissão.

O esquema *upwind* de segunda ordem foi adotado para a discretização espacial. O esquema SIMPLE (*semi-implicit method for pressure linked equations*) [Patankar, 1980] foi utilizado no acoplamento entre pressão e velocidade. O critério de convergência de todas as equações foi de resíduos inferiores a  $10^{-6}$ .

### 4.3 Estudo da qualidade de malha

O problema foi reduzido a uma geometria bidimensional de simetria radial, conforme a Figura 4.3. Algumas especificações a respeito das condições de contorno do domínio já estão incluídas na Figura 4.3, a localização da entrada de combustível, o eixo de simetria, os contornos definidos como paredes.

Os Casos 1 e 2 possuem o mesmo domínio geométrico e o mesmo queimador cilíndrico, com 1,013 cm de diâmetro. A diferença entre eles consiste na vazão de entrada de combustível. O domínio utilizado é caracterizado, longitudinalmente, de um comprimento de 30,39 cm antes da saída do jato de combustível, calculado por  $30 \times$  diâmetro do queimador, o que garante que o escoamento seja plenamente desenvolvido [Fox et al., 2004]. O comprimento longitudinal de 220 cm foi utilizado a fim de garantir que a chama estivesse contida no domínio. A distância radial ao eixo da chama é de 30 cm, posição em que foram realizadas as medidas experimentais de fluxo de calor radiativo.

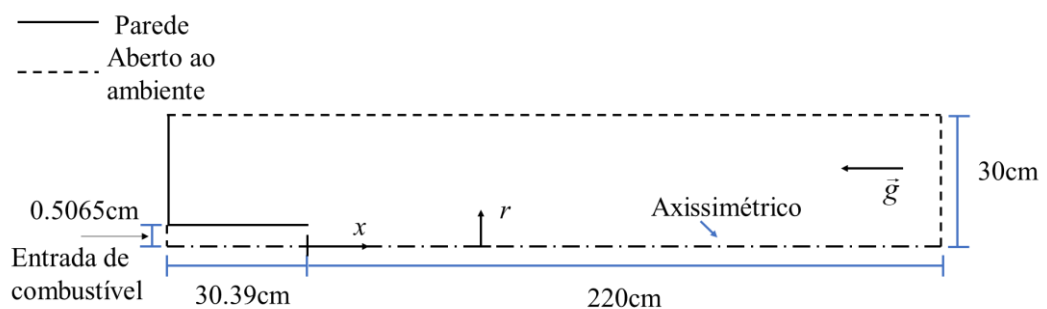


Figura 4.3 – Domínio computacional dos Casos 1 e 2.

Para o Caso 3, outro queimador cilíndrico foi utilizado, com diâmetro do tubo de combustível 1,655 cm. O domínio consiste, longitudinalmente, de um comprimento de 49,65 cm antes da saída do jato de combustível, calculado por  $30 \times$  diâmetro do queimador. Seguido de 215 cm após a saída do queimador, o que corresponde a  $2 \times$  comprimento de chama,  $L_f$ . Apenas a terceira chama possui a medida experimental de comprimento de chama. A distância radial ao eixo da chama é de 52,85 cm, o que corresponde a meio  $L_f$ . O domínio computacional do Caso 3 é apresentado na Figura 4.4.

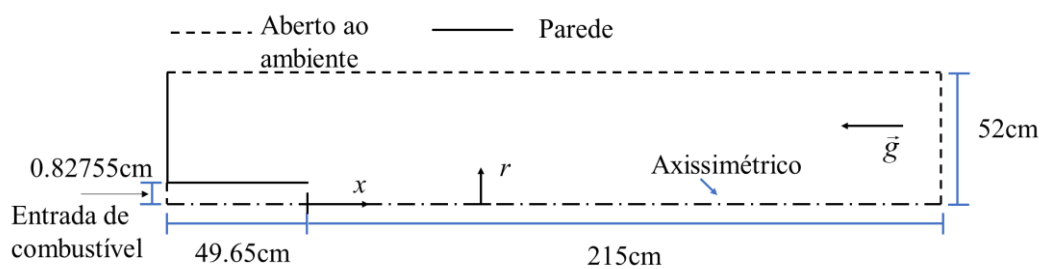


Figura 4.4 – Domínio computacional do Caso 3.

Os elementos das malhas são retangulares e não uniformes, o estudo da qualidade de malha foi feito através do *grid convergence index*, GCI. A análise estima a precisão da solução numérica, avaliando a porcentagem de desvio da solução numérica em relação ao seu valor assintótico. O GCI para a melhor malha pode ser calculado por, conforme Celik et al., 2008:

$$GCI_{21} = \frac{F_s e_a^{21}}{(r_{21}^p - 1)} \quad (4.1)$$

Sendo  $F_s$  o fator de segurança,  $r_{21}$  o fator de refinamento entre duas malhas, que indica o quanto uma malha está refinada com relação a outra, e  $e_a^{21}$  o erro relativo, calculado por:

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_1} \right|, \quad (4.2)$$

onde  $\phi_1$  e  $\phi_2$  são as soluções para a malha com maior refinamento e refinamento intermediário. A ordem aparente do método  $p$  é definida por:

$$\begin{aligned}
 p &= \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left| \frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1} \right| + q(p) \right| \\
 q(p) &= \ln \left( \frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \\
 s &= 1 \cdot \text{sign} \left( \frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1} \right)
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

O valor extrapolado  $\phi_{ext}^{21}$ , pode ser calculado por:

$$\phi_{ext}^{21} = \frac{(r_{21}^p \phi_1 - \phi_2)}{(r_{21}^p - 1)} \tag{4.4}$$

O valor do erro relativo extrapolado é definido por:

$$e_{ext}^{21} = \frac{(\phi_{ext}^{21} - \phi_1)}{(\phi_{ext}^{21})} \tag{4.5}$$

A metodologia de refinamento foi iniciada a partir de uma malha criada no *software* ANSYS / ICEM, com refinamento na região próxima ao eixo de simetria. A adaptação gradiente foi utilizada para o refinamento da malha. Essa abordagem cria uma função gradiente que multiplica a norma euclidiana do gradiente da variável selecionada por uma escala de comprimento característica. Na malha bidimensional, a escala de comprimento é a raiz quadrada do volume da célula. O valor obtido por essa função gradiente é utilizado como marcador dos volumes de controle a serem adaptados. Assim, a malha inicial tem seus volumes de controle divididos em outros quatro a cada adaptação, seguindo a regra de divisões  $4^n$ , conforme a Figura 4.5, nos volumes de controle em que são encontrados os maiores gradientes da propriedade escolhida.



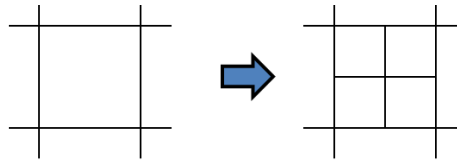


Figura 4.5 – Divisão dos volumes de controle no refinamento da malha.

O procedimento utilizado na simulação foi realizado até a convergência com uma malha inicial. Em seguida, a função gradiente dos parâmetros selecionados para avaliar a qualidade da malha, que são, fração de mistura, variância da fração da mistura, temperatura, velocidade e espécies ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{CO}_2$ ) foi normalizada pelo seu valor máximo no domínio dentro da faixa de  $[0, 1]$ . O valor utilizado para limitar o refinamento foi de 0,5, valor indicado em Ansys, 2011a. A adaptação do gradiente gerou uma nova malha e o procedimento de convergência foi repetido várias vezes para o limite de refino fixo. A adaptação dinâmica não foi utilizada.

Com as malhas refinadas pelo método da adaptação de gradientes foram selecionadas três malhas de cada caso para o estudo GCI. O resultado GCI é uma estimativa percentual que indica uma faixa de erro sobre o quão distante a solução com uma determinada malha está do valor assintótico.

Para os Caso 1, as malhas consideradas para GCI foram M1 com 153.720 células, M2 com 120.759 e M3 com 117.543. Os parâmetros para avaliar a qualidade da malha foram temperatura e fração mássica de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ . O resultado para o  $\text{GCI}_{21}$  foi considerado com precisão suficiente para utilização da malha com maior refinamento. As incertezas associadas à temperatura e às frações mássicas de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  foram  $1,92 \times 10^{-3}$ ,  $8,66 \times 10^{-4}$  e  $8,96 \times 10^{-3}$  respectivamente. Com base no estudo da qualidade da malha, a malha mais refinada, com 153.720 células, foi escolhida para relatar todos os resultados do Caso 1.

No Caso 2, as malhas consideradas para GCI foram M1 com 163.753 células, M2 com 117.705 e M3 com 62.106. As incertezas associadas à temperatura e às frações mássicas de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  foram  $6,52 \times 10^{-3}$ ,  $2,92 \times 10^{-4}$  e  $1,29 \times 10^{-2}$  respectivamente. O resultado do desvio das incertezas foi considerado satisfatório e a malha mais refinada, com 163.753 células, foi escolhida para relatar todos os resultados do Caso 2.

As malhas utilizadas para GCI no Caso 3 foram M1 com 125.168 células, M2 com 70.607 células e M3 com 49.313. As incertezas associadas à temperatura e às frações mássicas de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  foram  $1,27 \times 10^{-3}$ ,  $3,30 \times 10^{-3}$  e  $1,06 \times 10^{-3}$  respectivamente. Dessa

forma, o resultado foi considerado satisfatório e a malha mais refinada, com 125.168 células, foi escolhida para relatar todos os resultados do Caso 3. O resumo do estudo de malhas é apresentado na Tabela 4.2:

Tabela 4.2 – Resumo estudo da qualidade de malha

Incerteza associada	$GCI_{21}$ Caso 1	$GCI_{21}$ Caso 2	$GCI_{21}$ Caso 3
Temperatura	$1,92 \times 10^{-3}$	$6,52 \times 10^{-3}$	$1,27 \times 10^{-3}$
$Y_{CO_2}$	$8,66 \times 10^{-4}$	$2,92 \times 10^{-4}$	$3,30 \times 10^{-3}$
$Y_{H_2O}$	$8,96 \times 10^{-3}$	$1,29 \times 10^{-2}$	$1,06 \times 10^{-3}$

Além da análise da qualidade de malha, é necessário avaliar a discretização angular empregada no modelo das ordenas discretas. Para cada caso estudado, a discretização angular foi realizado com a malha final escolhida. O modelo de ordenadas discretas resolve a RTE para um número finito de ângulos sólidos discretos. Os testes foram realizados com 80, 120 e 160 divisões angulares, definidas diretamente no Fluent, correspondendo a 320, 480 e 640 direções efetivas para resolver os quatro octantes. Para cada caso, o fluxo de calor radiativo obtido ao longo da linha de medição foi comparado com o resultado obtido para 80 divisões angulares; o desvio percentual médio entre os resultados está presente na Tabela 4.3 e foi calculado conforme equação:

$$\delta(\%) = \frac{|q_{R2}'' - q_{R1}''|}{q_{R2}''} 100, \quad (4.6)$$

onde  $q_{R2}''$  é o fluxo radiativo em cada ponto sob a linha de medição com maior discretização angular e  $q_{R1}''$  é o fluxo radiativo em cada ponto sob a linha de medição com menor número de direções angulares.

O desvio percentual médio foi inferior a 1%, indicando que 80 divisões angulares são suficientes para a obtenção da solução em todos os casos.

Tabela 4.3 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo obtido com diferente discretização angular

Direções	Desvio médio $\delta$ (%) com	Desvio médio $\delta$ (%) com	Desvio médio $\delta$ (%)
	relação a solução com 80	relação a solução com 80	com relação a solução
	direções	direções	com 80 direções
	Caso 1	Caso 2	Caso 3
80	-	-	-
120	0,15	0,24	0,15
160	0,92	0,67	0,33

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Três chamas difusivas são apresentadas e analisadas nesta seção, identificadas como Caso 1, Caso 2 e Caso 3. Os Casos 1 e 2 são chamas de gás natural diluído em  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2$ : a primeira com velocidade de injeção da mistura de combustível de 5,0 m/s e a segunda com velocidade de 7,5 m/s. A terceira chama foi estudada por Quezada, 2018, sendo seu combustível gás natural com diluição de 40 % de  $\text{CO}_2$ . Para cada chama, os modelos de abordagem TRI apresentados foram aplicados; os resultados são discutidos a seguir.

Na configuração dos Casos 1 e 2, a mistura de combustível, o diâmetro do queimador e velocidade do jato foram selecionados para obter uma chama ancorada ao queimador, com uma quantidade negligenciável de fuligem (chama azul) e em regime turbulento, sendo uma chama adequada para ser modelada usando os modelos empregados neste trabalho, por exemplo, SLDF, o modelo WSGG sem a inclusão de fuligem e as abordagens TRI.

Em cada caso serão apresentados os resultados experimentais, para o fluxo de calor radiativo, e numéricos. Os resultados experimentais estão indicados como “*experimental*”; a solução obtida desprezando a radiação térmica é nomeada por “*non-rad*”; o resultado no qual a radiação é considerada negligenciando os efeitos TRI é definido por “*rad-nonTRI*”; os casos nos quais os efeitos TRI são considerados são chamados de “*rad-TRI(T)*” para o emprego do modelo proposto por Snegirev, 2004 e por fim, “*rad-TRI(X,T)*” para identificar o modelo proposto por Fraga et al., 2020b.

Os resultados numéricos apresentados a seguir foram obtidos das linhas indicadas em amarelo no domínio, conforme Figura 5.1. São quatro linhas radiais, uma linha central e uma linha na borda do domínio, utilizada para obtenção dos resultados de fluxo de calor radiativo. As linhas radiais estão posicionadas em no eixo  $x$  da seguinte forma:  $r_0$  em  $x = 0,5$  m,  $r_1$  em  $x = 0,65$  m,  $r_2$  em  $x = 0,85$  m e  $r_3$  em  $x = 1,05$  m a fim de obter um mapeamento das variáveis de estudo em diversos pontos da chama.

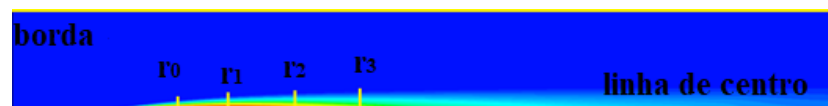


Figura 5.1 – Linhas utilizadas para avaliação dos resultados.

Ressalta-se que os resultados numéricos são obtidos a partir de um conjunto de modelos, portanto existe uma dificuldade intrínseca da comparação com dados experimentais

porque cada modelo empregado carrega seus erros. Dessa forma, ao comparar o fluxo de calor radiativo numérico é possível concluir que este conjunto de modelos produz certo desvio com resultado experimental. Essa é uma comparação importante porque informa sobre o quanto a modelagem numérica se aproxima ou se afasta dos resultados experimentais.

## 5.1 Caso 1

A chama estudada no Caso 1 possui velocidade de injeção de combustível de 5,0 m/s correspondente a um número de Reynolds de 4487. A potência da chama é de  $Q = 5,56$  kW. A composição do combustível, em volume, corresponde a 33,6 % ( $\text{CH}_4$ ), 55,8 % ( $\text{CO}_2$ ), 7,4 % ( $\text{H}_2$ ), 2,2 % ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ), 0,4 % ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ), e 0,6 % ( $\text{N}_2$ ).

Os primeiros resultados apresentados, Figura 5.2, são referentes aos campos de (a) temperatura, (b) fração de mistura, (c) velocidade e (d) flutuação de temperatura *rms* (*root mean square*), calculada por  $\sqrt{T'^2}$ . Os resultados são referentes à solução negligenciando a perda de calor por radiação. Pode-se perceber pelo contorno de temperatura que o domínio computacional utilizado foi adequado para o comprimento de chama. O contorno de fração de mistura apresenta a mistura de combustível e oxidante. Os vetores de velocidade indicam a entrada do ar no domínio, o que representa fisicamente a queima com o ar ambiente. Por fim, o valor *rms* da flutuação de temperatura aumenta na região da frente de chama, onde há maior variação da temperatura média, conforme visto em Yi et al., 2018 e Yang et al., 2018.

Os picos de temperatura para cada modelagem são apresentados na Tabela 5.1. Ao considerar a perda de calor por radiação a temperatura máxima da chama diminui (*rad-nonTRI*), cerca de 132 K; ao incluir os efeitos do TRI, para o caso *rad-TRI(T)* há uma redução de 29 K; e para o caso *rad-TRI(X,T)*, aproximadamente de 23 K.

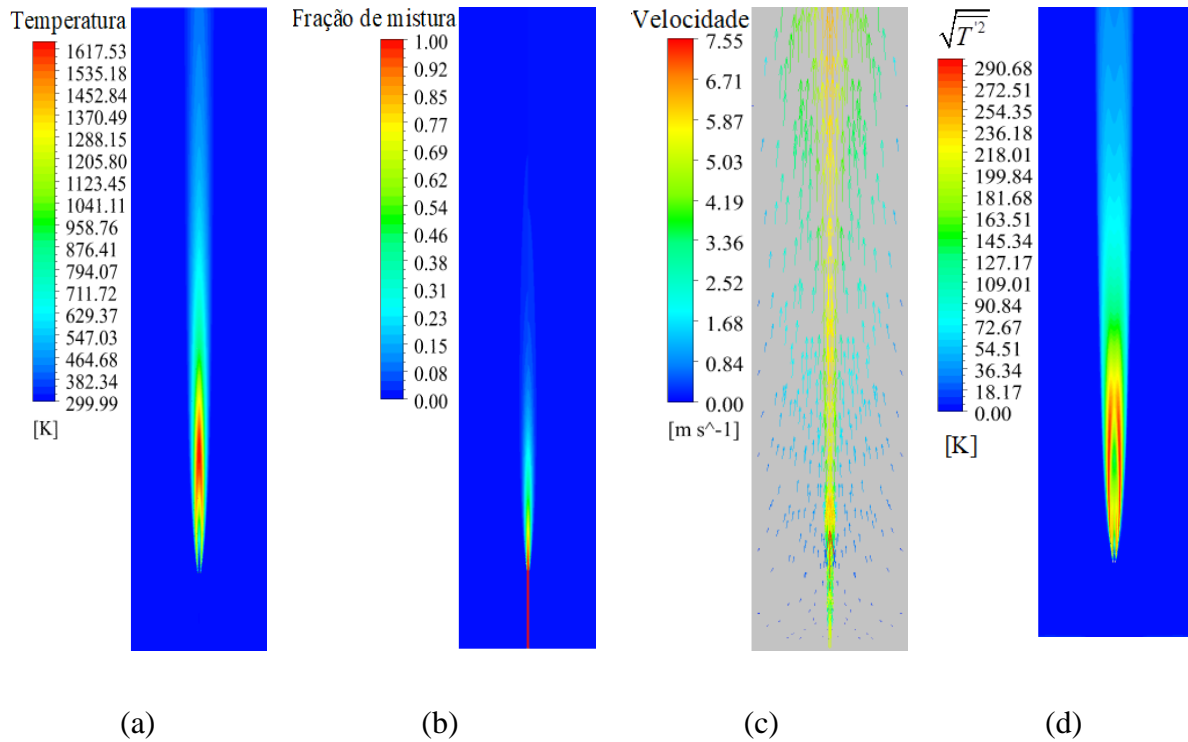


Figura 5.2 – (a) Contorno de temperatura; (b) Contorno de fração de mistura; (c) Vetores de velocidade; (d) Contorno *rms* da flutuação de temperatura.

Tabela 5.1 – Temperatura máxima em cada caso

Caso	$T_{max}$
<i>non-rad</i>	1617,53
<i>rad-nonTRI</i>	1485,13
<i>rad-TRI</i> ( $\bar{T}$ )	1455,33
<i>rad-TRI</i> ( $\bar{X}, \bar{T}$ )	1461,45

A temperatura é avaliada sobre o eixo de simetria e em quatro linhas, conforme as Figuras 5.3 e 5.4, em que é possível identificar maior diferença na solução *non-rad* seguida da solução *rad-nonTRI*. Nos resultados radiais da temperatura observa-se que os casos *rad-TRI*( $T$ ) e *rad-TRI*( $X, T$ ) estão praticamente sobrepostos, mas é possível observar diferenças com relação ao caso *rad-nonTRI*. A diminuição da temperatura apresentada para cada caso

está de acordo com estudos prévios, entre eles Li et al., 2002; Coelho et al., 2003; Yang et al., 2018. Há uma menor influência da modelagem TRI com relação às espécies e à velocidade da chama, conforme a Figura 5.5, este comportamento também foi descrito em Coelho, 2009, e Miranda et al., 2019. Não há diferença considerável nos resultados para fração de mistura, o que indica que os campos das espécies participantes não sofrem alterações. Com relação à velocidade, há influência nos resultados afastados da saída do queimador; a maior diferença aparece na linha de posição  $x = 1,05$  m, entre os casos *non-rad* e *rad-TRI(T)*. A máxima diferença é de aproximadamente 6%. Assim, o TRI pode ser considerado uma influência menor na determinação das principais espécies. Comparando este resultado com a diferença entre as temperaturas, nesta mesma posição e para os mesmos casos *non-rad* e *rad-TRI(T)*, a diferença máxima percentual é de aproximadamente 14%. Ainda que os resultados para fração de mistura e velocidades indiquem menor impacto com relação ao modelo TRI empregado, os resultados são apresentados para completar o conjunto de informações que caracterizam a chama.

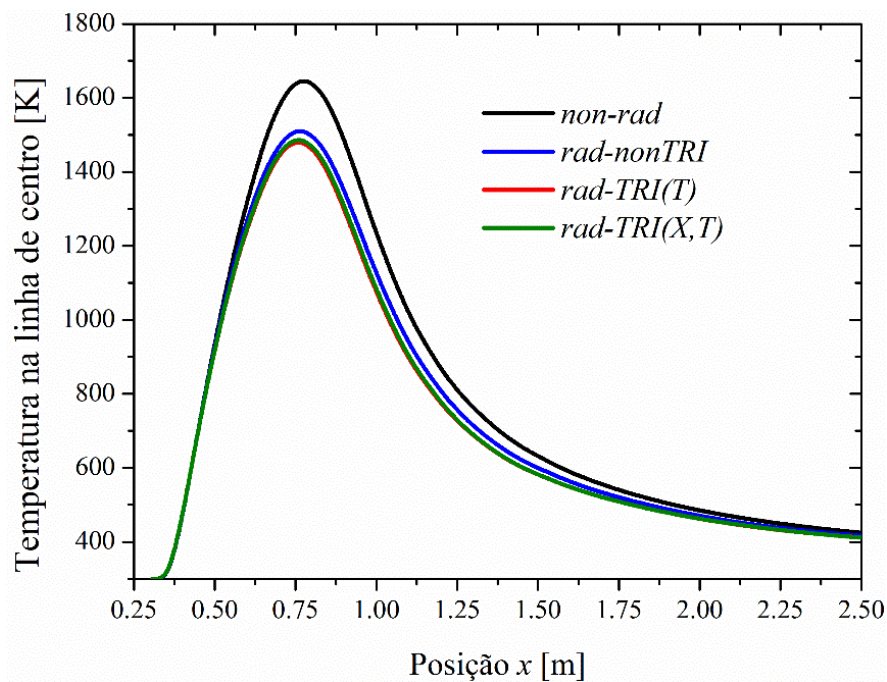
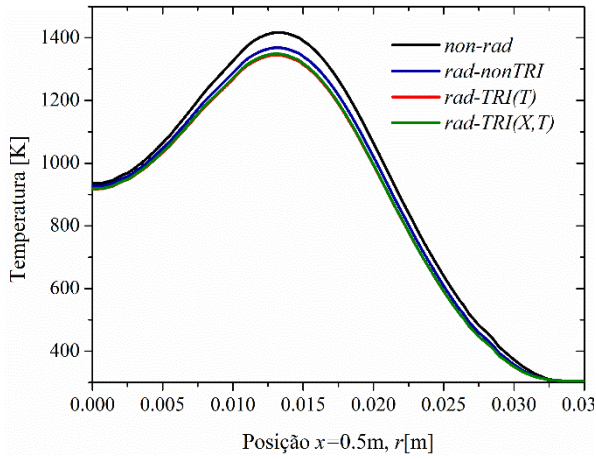
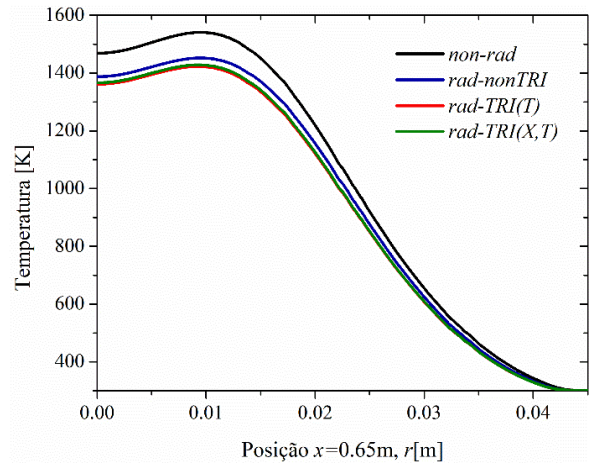


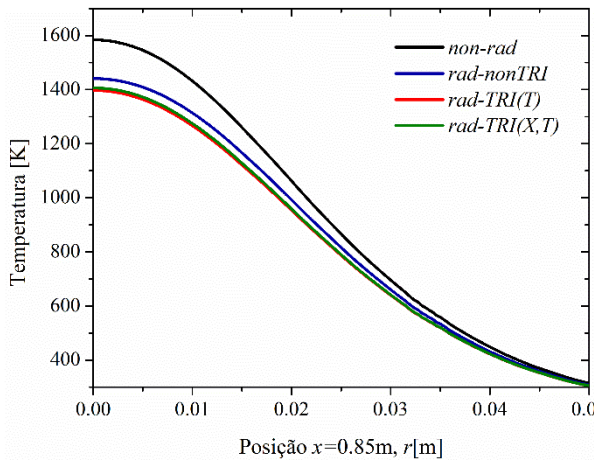
Figura 5.3 – Temperatura na linha de centro.



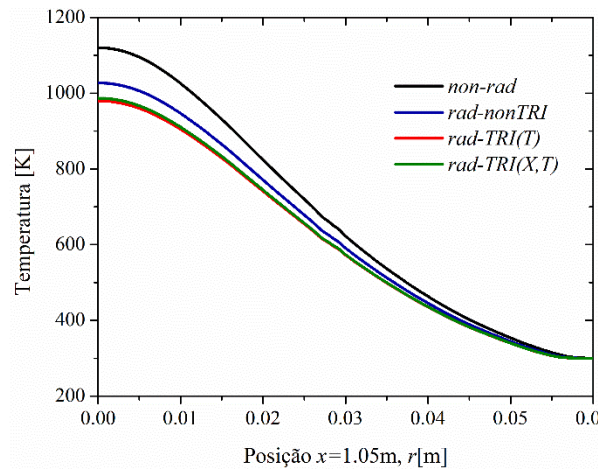
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.4 – Resultados numéricos para temperatura em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.



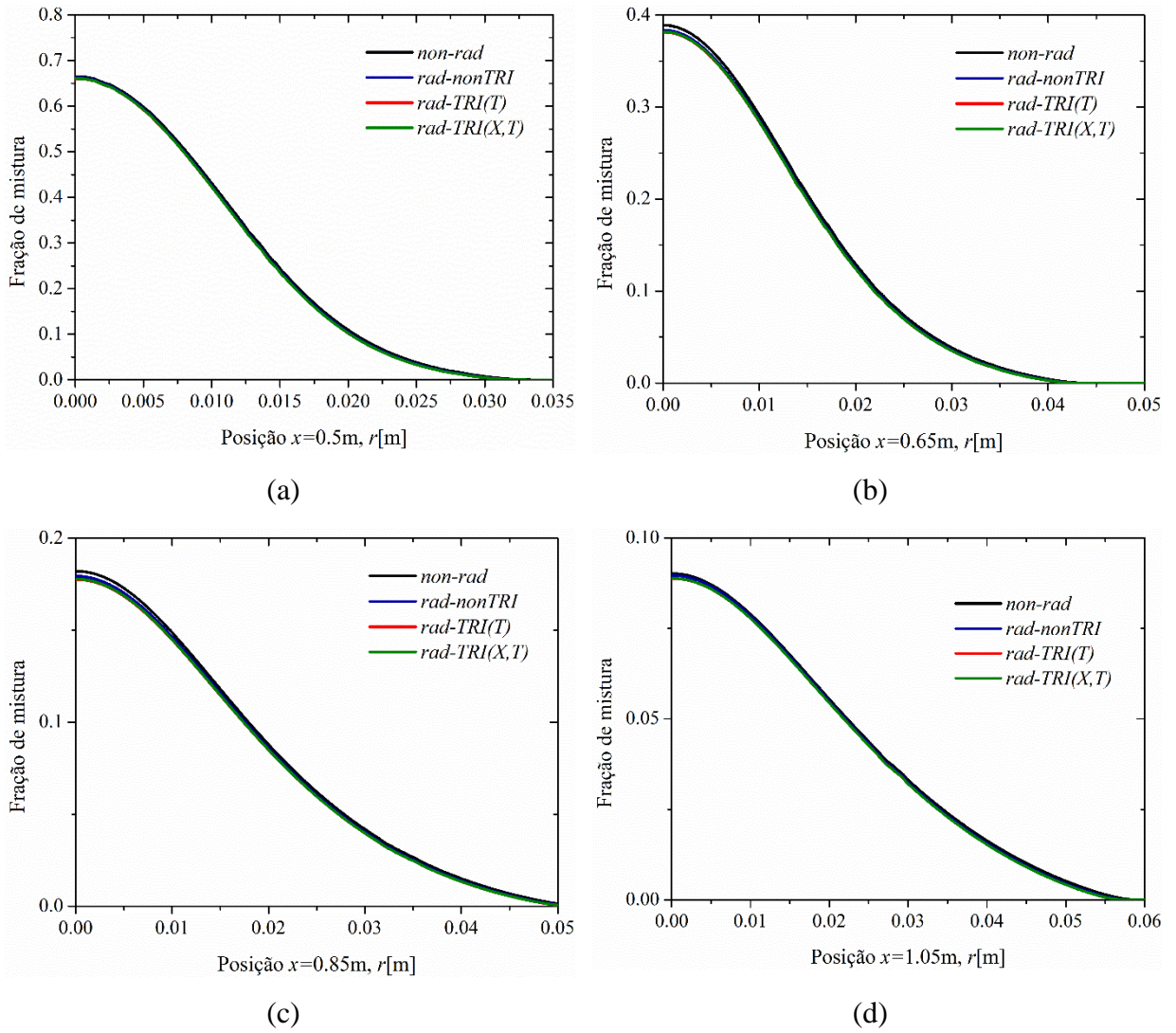


Figura 5.5 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.

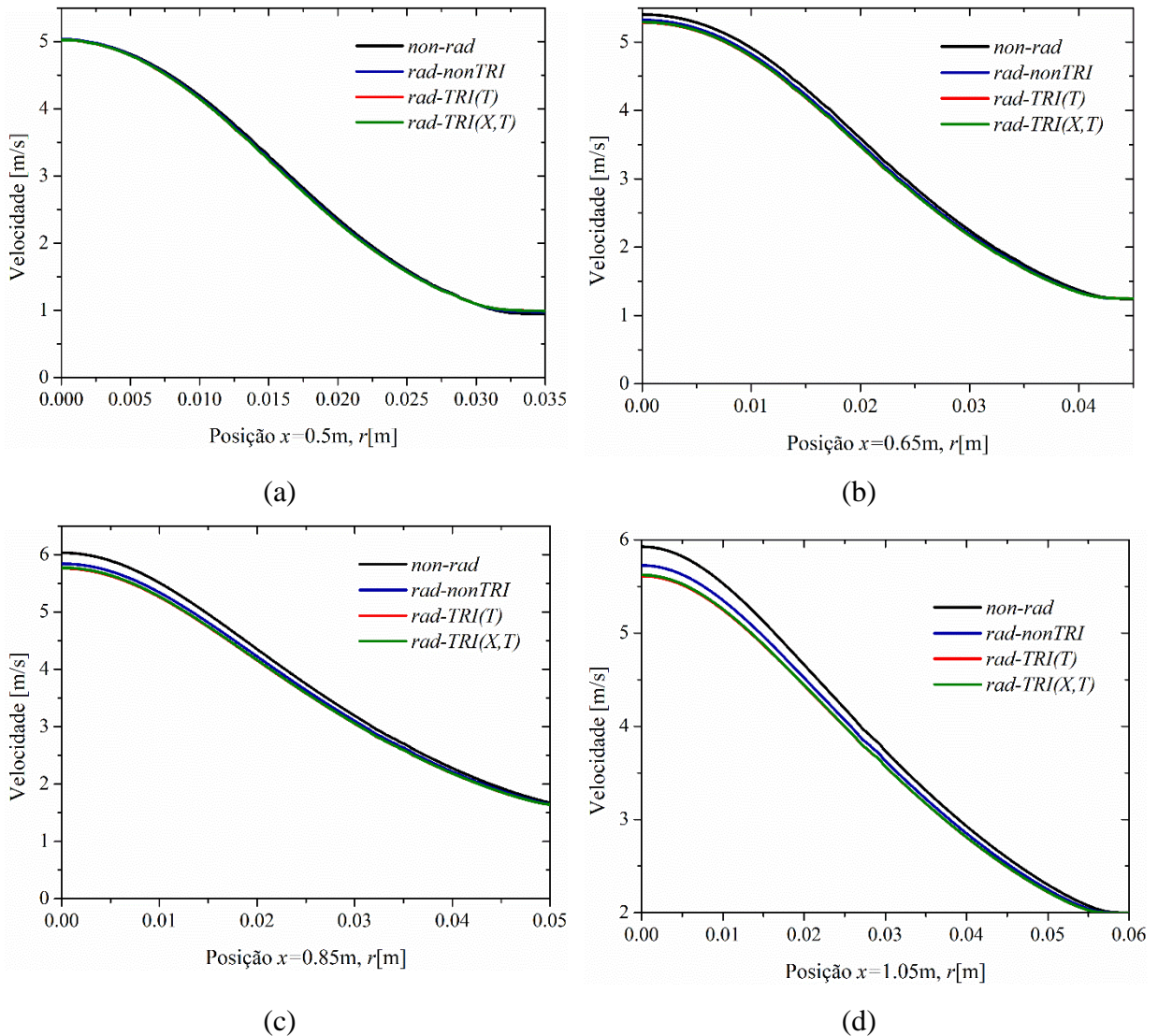


Figura 5.6 – Resultados numéricos para velocidade em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.

A seguir são apresentados os resultados para fluxo de calor radiativo, Figura 5.7. As barras de desvio relacionadas às medidas experimentais foram estimadas a partir do desvio padrão adotando um intervalo de confiança de 95 %. O pico para fluxo de calor radiativo ao caso experimental foi de aproximadamente  $490 \text{ W/m}^2$ , para o caso *rad-nonTRI* foi de  $277 \text{ W/m}^2$ , para *rad-TRI(T)* de  $446 \text{ W/m}^2$  e por fim o caso *rad-TRI(X,T)* foi de  $424 \text{ W/m}^2$ . Considerando o valor máximo do fluxo de calor radiativo, a solução *rad-TRI(T)* apresentou o menor desvio entre os dados experimentais e numéricos. Ao longo da chama, ambos os modelos tiveram um desempenho semelhante. O desvio entre as soluções é apresentado na Tabela 5.2. O desvio entre a solução numérica e os dados experimentais foi obtido por:

$$\delta(\%) = \frac{|q_{Rexp}'' - q_{Rnum}''|}{\max(q_{Rexp}'')} \times 100\% , \quad (5.1)$$

onde  $q_{Rexp}''$  é o fluxo de calor radiativo medido experimentalmente e  $q_{Rnum}''$  é o fluxo de calor obtido numericamente. O desvio foi normalizado para o valor máximo do fluxo de calor radiativo, a fim de identificar os pontos em que o resultado é significativo.

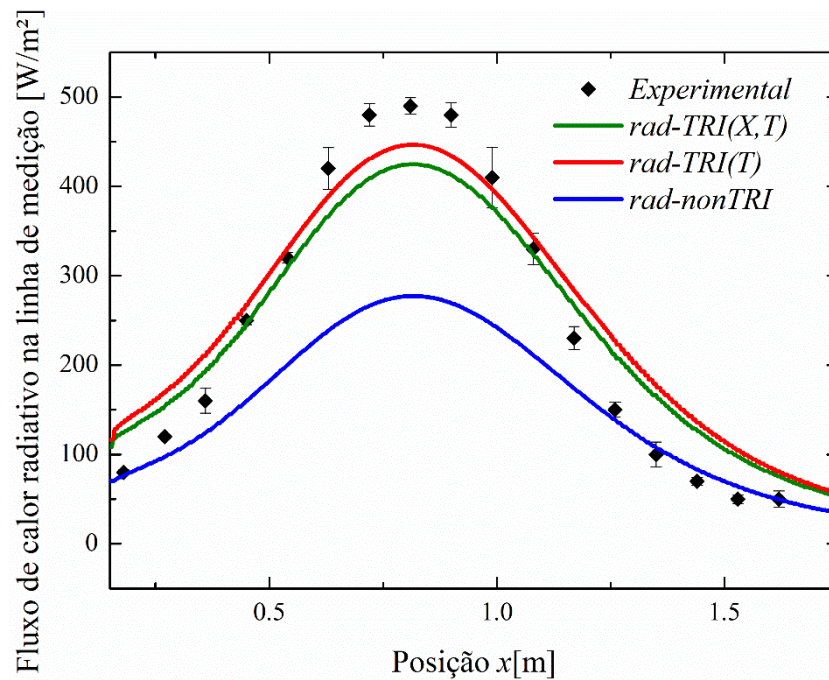


Figura 5.7 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Tabela 5.2 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo experimental e numérico

Caso	$\delta\%$ (médio)
<i>rad-nonTRI</i>	19,98
<i>rad - TRI</i> ( $\bar{T}$ )	8,32
<i>rad - TRI</i> ( $\bar{X}, \bar{T}$ )	9,08

O acréscimo do fluxo de calor radiativo devido a modelagem TRI no termo de emissão, que pode ser verificado entre a solução *rad-nonTRI* e *rad-TRI(T)* alcançou 35%; em

média, foi de 14%. Entre os casos *rad-nonTRI* e *rad-TRI(X,T)* o maior acréscimo foi de 31 %, com uma média de 12 %. Resultados semelhantes ao acréscimo no fluxo de calor radiativo com a inclusão de efeitos TRI foram obtidos em Modest, 2003, e Ren et al., 2018.

A fração radiante, que representa a perda de calor por radiação, também foi comparada. A fração radiante foi calculada conforme proposto em Houf e Schefer, 2013, os fluxos radiativos são integrados ao longo de uma superfície em torno da chama. A superfície cria um cilindro de raio  $R$  concêntrico ao eixo da chama, a fração radiante é dada por:

$$X_R = \frac{2\pi R \Delta y}{Q} \sum_{i=1}^n q_R'' \quad (5.2)$$

onde  $\Delta y$  é a diferença entre as posições onde o fluxo radiativo é medido,  $n$  é o número de medidas realizadas e  $Q$  é a potência da chama e  $q_R''$  é o fluxo de calor radiativo.

O desvio médio está relacionado aos dados experimentais é apresentado na Tabela 5.3. O desvio para a solução *rad-TRI (X,T)* foi inferior a 2%, sendo a solução com maior concordância com os resultados experimentais. Ainda que no pico do fluxo de calor radiativo a solução *rad-TRI (X,T)* apresente maior desvio da solução numérica, na fração radiante, por ser a integração do fluxo de calor radiativo, entende-se que o somatório compensou em pontos da base e pluma da chama em que a solução numérica é superior à solução experimental. O desvio relacionado ao caso *rad-nonTRI* é de aproximadamente 30 %. Dessa forma, admitindo aceitáveis desvios da ordem de 10 %, os modelos TRI permitem resultados satisfatórios para a determinação do fluxo de calor radiativo.

Tabela 5.3 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica

Caso	$X_R(\%)$	$\delta\%$ (médio)
Experimental	13,08	-
<i>rad-nonTRI</i>	9,20	29,65
<i>rad - TRI</i> ( $\bar{T}$ )	14,28	9,16
<i>rad - TRI</i> ( $\bar{X}, \bar{T}$ )	13,29	1,58

Para avaliar a diferença entre as propostas dos casos  $rad-TRI(T)$  e  $rad-TRI(X,T)$  os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$  são apresentados nas Figuras 5.8 e 5.9 respectivamente. Para análise do fator  $\alpha_{TRI}$  considera-se a equação:

$$\alpha_{TRI} = \left( 1 + \underbrace{C_{TRI1} \frac{\overline{T'^2}}{\overline{T}^2}}_{\alpha_{TRI1}} + \underbrace{C_{TRI2} \frac{\overline{T'^2}}{a_j(\overline{T})\overline{T}} \frac{\partial a_j}{\partial T}}_{\alpha_{TRI2}} \right)_{\overline{T}}, \quad (5.3)$$

onde  $\alpha_{TRI1}$  representa a autocorrelação de temperatura e  $\alpha_{TRI2}$  representa correlação cruzada entre coeficiente de absorção e temperatura. A variância de temperatura é a variável fundamental no cálculo do fator TRI e os campos  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$  apresentam o mesmo comportamento da variância de temperatura, conforme Figuras 5.8 e 5.9. Na Figura 5.8 é possível perceber que a autocorrelação de temperatura é o termo dominante na expressão, para o caso  $rad-TRI(T)$ , não apenas por ser consideravelmente maior que  $\alpha_{TRI2}$ , mas também pelo fato do termo  $\alpha_{TRI2}$  ser negativo. Com isso,  $\alpha_{TRI2}$  reduz a emissão da chama, porém não é suficientemente eficiente uma vez que a base e a pluma da chama apresentam resultados numéricos acima dos experimentais. Uma forma de aperfeiçoar o modelo seria incluir a correlação entre temperatura e taxa de reação, conforme proposto em Snegirev et al., (2019), que poderia corrigir o fator  $\alpha_{TRI}$ . No entanto, a correlação temperatura-taxa de reação é negligenciada neste trabalho.

Para o caso  $rad-TRI(X,T)$ , os termos  $\beta_{TRI}$ ,  $f_T$  e  $f_{kT}$  representam os termos fundamentais do modelo. Nesse caso  $f_T$  representa o termo relacionado à autocorrelação de temperatura, enquanto  $f_{kT}$  contabiliza os efeitos da correlação cruzada do coeficiente de absorção e da temperatura. Os resultados apresentados na Figura 5.9 indicam que neste modelo, diferente do proposto em  $rad-TRI(T)$ ,  $f_T$  e  $f_{kT}$  possuem a mesma importância, e precisam ser contabilizados para um resultado preciso. Com isso, negligenciar um dos termos conduz a resultados consideravelmente diferentes, o que diferencia as propostas de modelagem. Por fim, espera-se que  $\alpha_{TRI}$  seja maior que  $\beta_{TRI}$  uma vez que o fluxo de calor radiativo no caso  $rad-TRI(T)$  é maior.

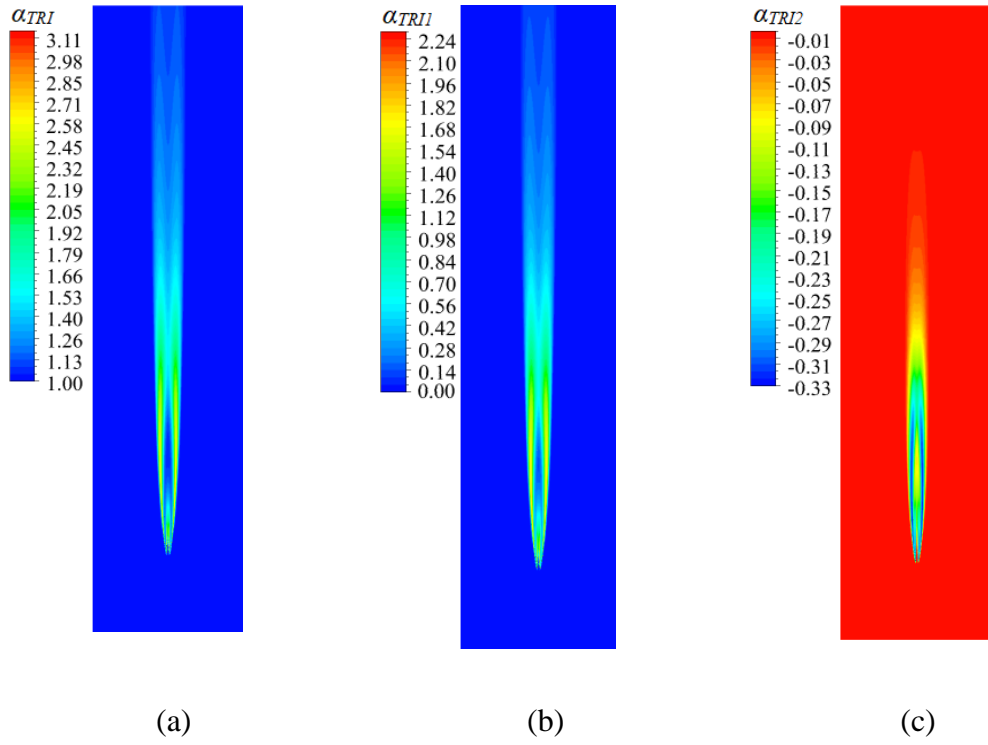


Figura 5.8 – Contorno de (a)  $\alpha_{TRI}$ ; (b)  $\alpha_{TRI1}$ ; (c)  $\alpha_{TRI2}$ .

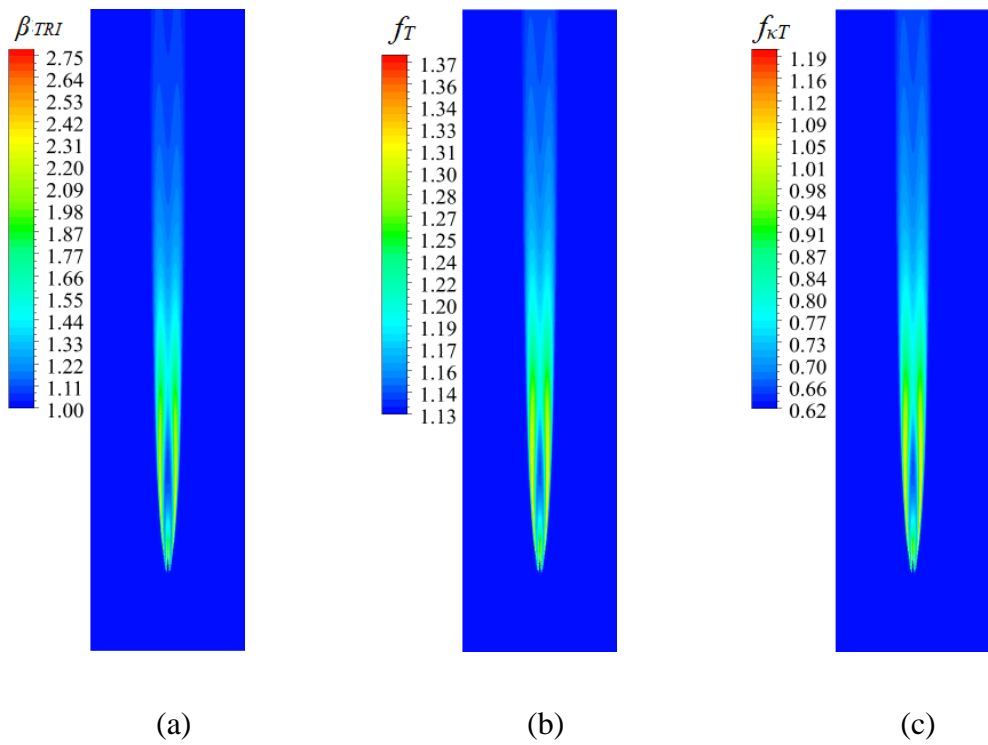


Figura 5.9 – Contorno de (a)  $\beta_{TRI}$ ; (b)  $\beta_{TRI1}$ ; (c)  $\beta_{TRI2}$ .

Embora o caso  $rad-TRI(X,T)$  apresente desvio 0,7 % maior em relação ao resultado experimental, conforme a Tabela 5.2, devido ao seu fluxo de calor radiativo menor que o caso  $rad-TRI(T)$ , sua modelagem apresenta um avanço com relação a  $rad-TRI(T)$  pois considera o coeficiente de absorção de forma precisa.

Finalmente, ressalta-se que a fração radiativa calculada neste estudo, especialmente para o caso  $rad-TRI(X,T)$ , apresentou boa concordância dos dados experimentais para uma chama difusiva gás natural /CO<sub>2</sub> / H<sub>2</sub> ainda que as constantes do modelo tenham sido desenvolvidas para chamas do tipo poça de etanol e metanol.

## 5.2 Caso 2

Na chama estudada no Caso 2 há um incremento na velocidade de combustível, que passa a 7,75 m/s, correspondendo a um número de Reynolds de 7030. A composição de combustível é idêntica ao Caso 1, 33,6 % (CH<sub>4</sub>), 55,8 % (CO<sub>2</sub>), 7,4 % (H<sub>2</sub>), 2,2 % (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), 0,4 % (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>), e 0,6 % (N<sub>2</sub>). O aumento da velocidade de entrada do combustível gera aumento na turbulência da chama, promovendo maior taxa de mistura, assim como aumento da taxa de consumo dos reagentes e, com isso, aumento da potência da chama. Dessa forma a potência da chama é de  $Q = 8,34$  kW. Espera-se então que o fluxo de calor radiativo seja maior do que o Caso 1 e que os efeitos causados pelo TRI impactem fortemente a emissão radiativa da chama.

Os primeiros resultados apresentados, Figura 5.10, são referentes aos campos de (a) temperatura, (b) fração de mistura, (c) velocidade e (d) variância de temperatura *rms*. Os quatro campos apresentam maior difusão quando comparado ao Caso 1 devido ao aumento da velocidade de entrada do combustível. Os resultados são referentes à solução negligenciando a perda de calor por radiação. Pode-se perceber pelo contorno de temperatura um aumento com relação ao Caso 1, em cerca de 37 K. O contorno de fração de mistura apresenta maior difusão da mistura de combustível do que o Caso 1. O campo vetorial de velocidades apresenta o acréscimo da velocidade da chama. Por fim, o valor *rms* da variância de temperatura aumenta com o aumento da turbulência da chama.



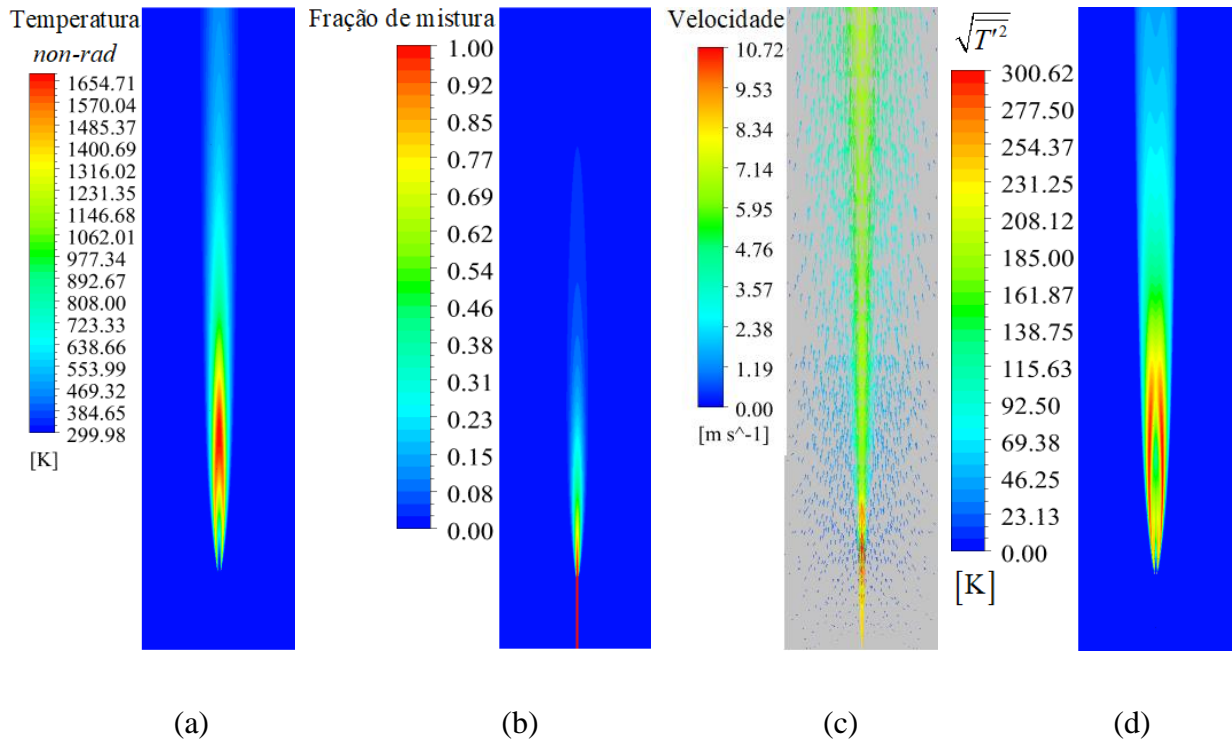


Figura 5.10 – (a) Contorno de temperatura; (b) Contorno de fração de mistura; (c) Vetores de velocidade; (d) Contorno *rms* da flutuação de temperatura.

Os picos de temperatura para cada modelagem são apresentados na Tabela 5.4. Ao considerar a perda de calor por radiação a temperatura máxima da chama diminui (*rad-nonTRI*), cerca de 95 K, ao incluir os efeitos do TRI; para o caso *rad-TRI(T)* há uma redução de 23 K; e para o caso *rad-TRI(X,T)* de aproximadamente 16 K. A temperatura é avaliada também na linha central e em quatro linhas, conforme as Figuras 5.11 e 5.12, onde é possível identificar uma maior diferença na solução *non-rad* seguida da solução *rad-nonTRI*; os resultados para os casos *rad-TRI(T)* e *rad-TRI(X,T)* estão aproximadamente sobrepostos. O resultado é semelhante ao apresentado no Caso 1, assim como o menor impacto na fração de mistura, Figura 5.13. A Figura 5.14 apresenta resultados para velocidade, a maior diferença entre as soluções aparece na posição  $x = 1,05$  m, de cerca de 5 %, entre os resultados *non-rad* e *rad-TRI(X,T)*.



Tabela 5.4 – Temperatura máxima em cada caso

Caso	$T_{max}$
<i>non-rad</i>	1654,71
<i>rad-nonTRI</i>	1522,71
<i>rad - TRI(<math>\bar{T}</math>)</i>	1499,96
<i>rad - TRI(<math>\bar{X}, \bar{T}</math>)</i>	1506,62

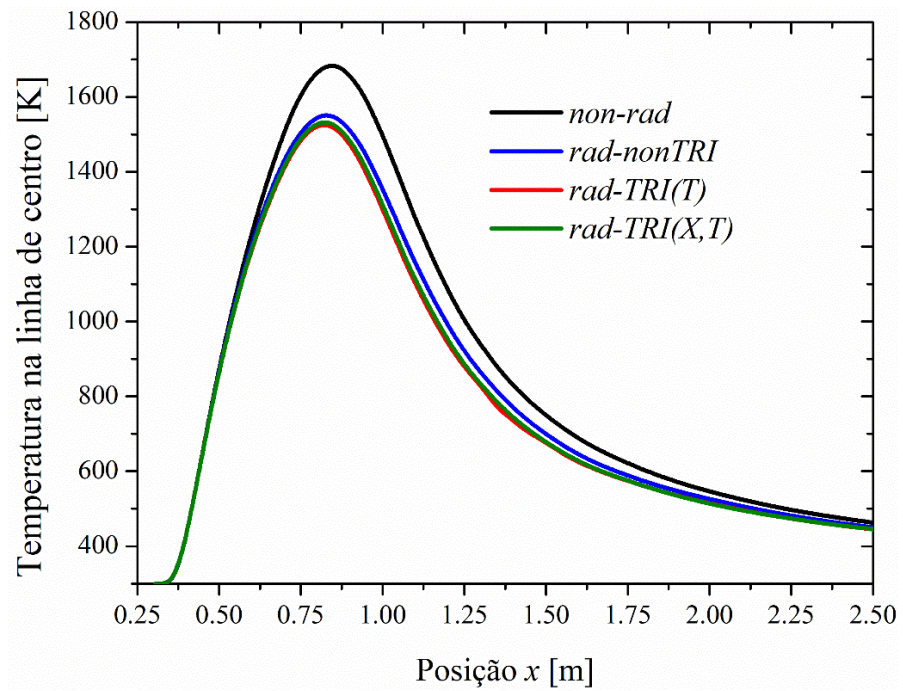


Figura 5.11 – Temperatura na linha de centro.

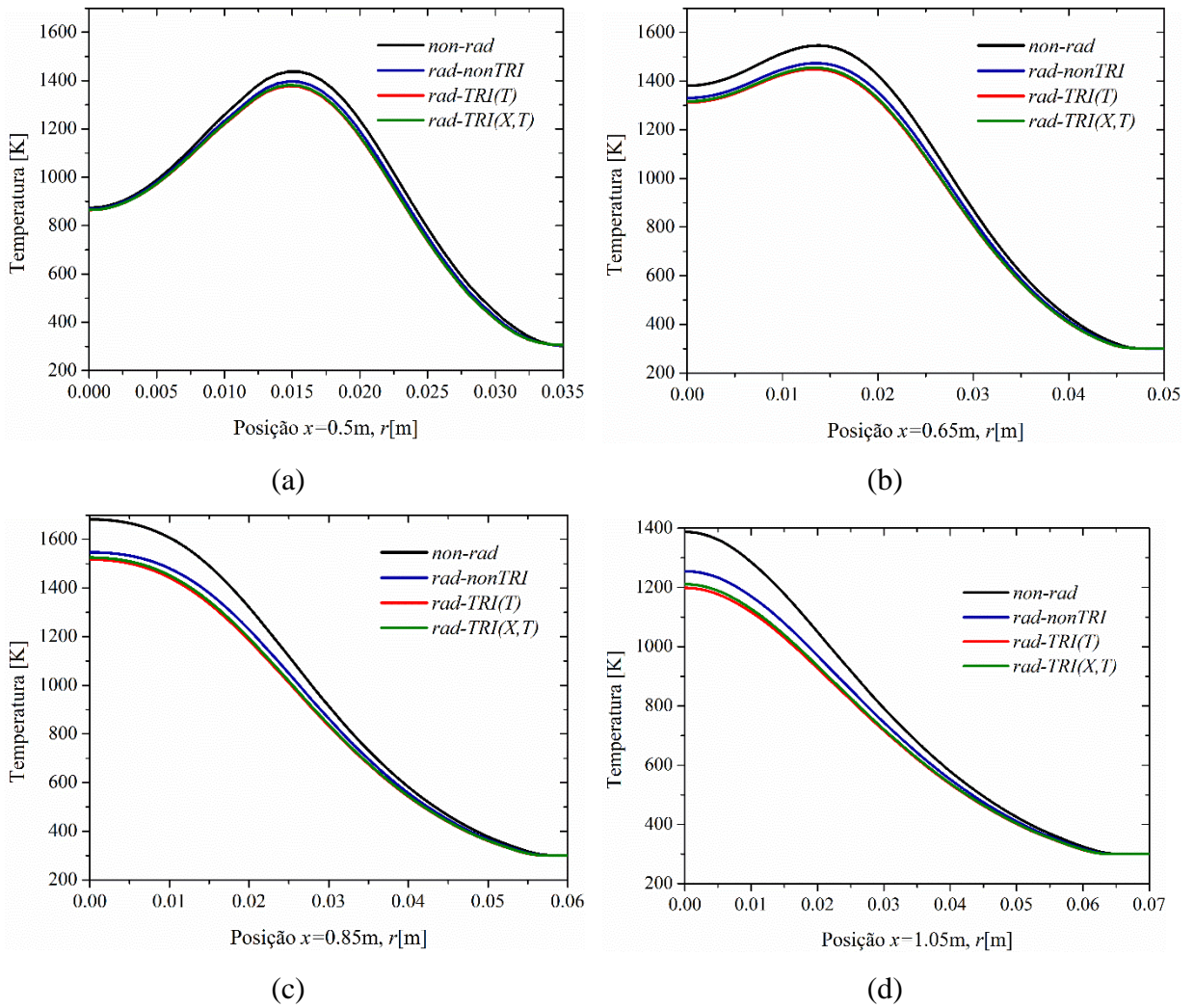


Figura 5.12 – Resultados numéricos para temperatura em (a)  $x = 0,5 \text{ m}$ ; (b)  $x = 0,65 \text{ m}$ ; (c)  $x = 0,85 \text{ m}$ ; (d)  $x = 1,05 \text{ m}$ .

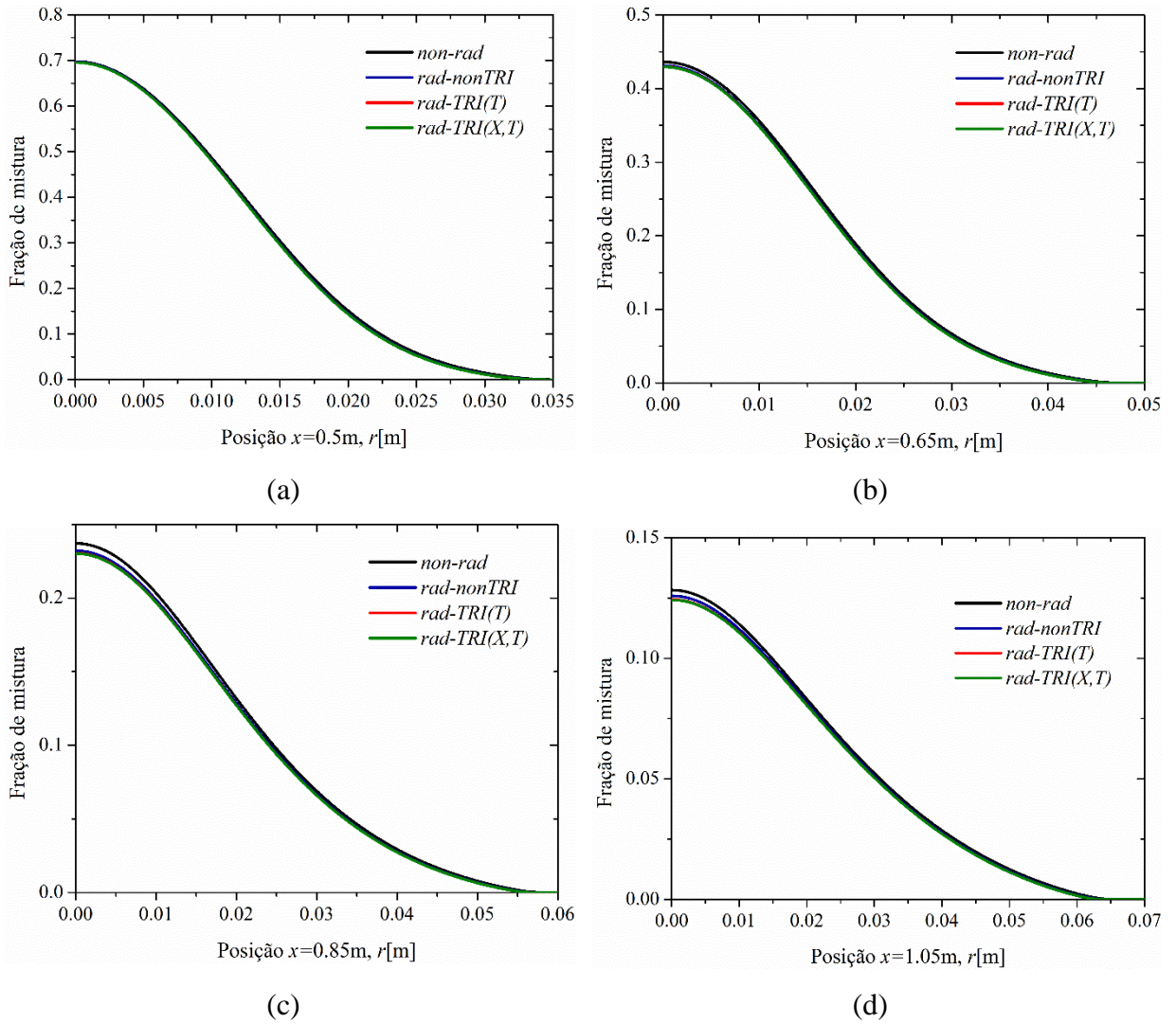


Figura 5.13 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a)  $x = 0,5 \text{ m}$ ; (b)  $x = 0,65 \text{ m}$ ; (c)  $x = 0,85 \text{ m}$ ; (d)  $x = 1,05 \text{ m}$ .

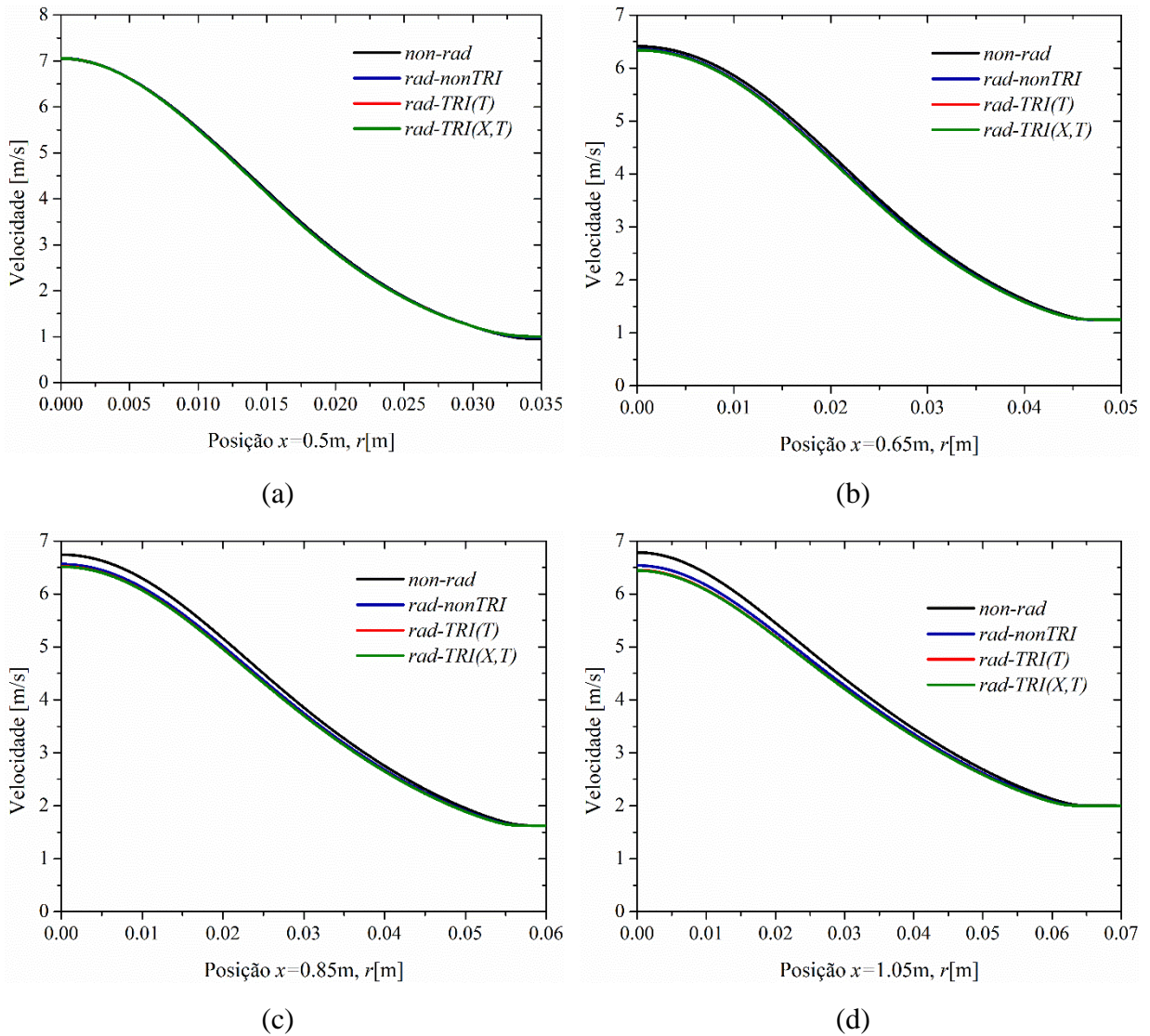


Figura 5.14 – Resultados numéricos para velocidade em (a)  $x = 0,5\text{ m}$ ; (b)  $x = 0,65\text{ m}$ ; (c)  $x = 0,85\text{ m}$ ; (d)  $x = 1,05\text{ m}$ .

Os resultados na Figura 5.15 são referentes ao fluxo de calor radiativo. As barras de desvio relacionadas às medidas experimentais foram estimadas a partir do desvio padrão adotando um intervalo de confiança de 95 %. O pico para fluxo de calor radiativo ao caso experimental foi de  $740\text{ W/m}^2$ , para o caso *rad-nonTRI* foi de aproximadamente  $419\text{ W/m}^2$ , para o caso *rad-TRI(T)* foi de  $641\text{ W/m}^2$  e por fim o caso *rad-TRI(X,T)* foi de  $606\text{ W/m}^2$ . Considerando o valor máximo do fluxo de calor radiativo, a solução *rad-TRI(T)* novamente apresentou o menor desvio entre os dados experimentais e numéricos. O desvio entre as soluções é apresentado na Tabela 5.5.



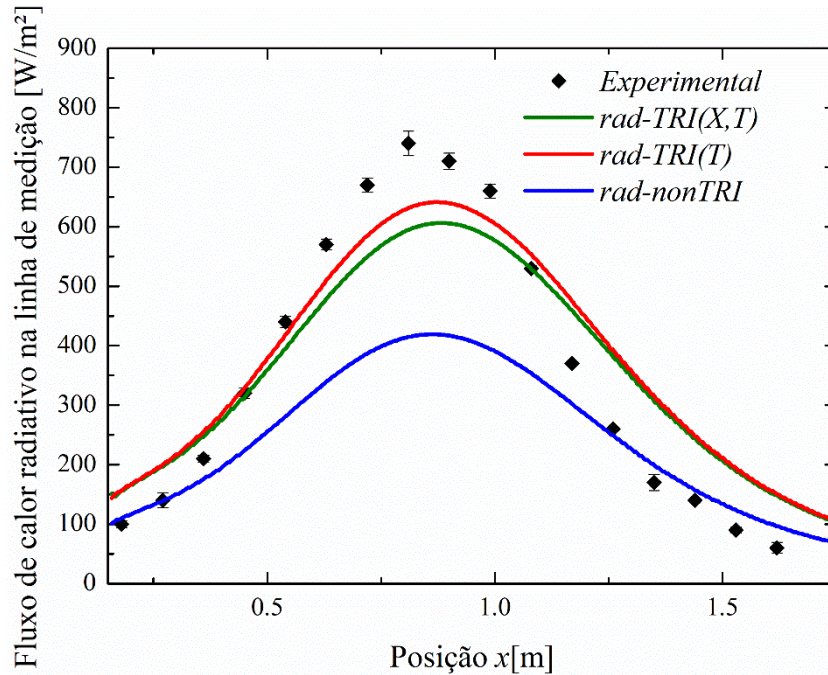


Figura 5.15 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Tabela 5.5 – Desvio médio entre o fluxo de calor radiativo experimental e numérico

Caso	$\delta\%$ (médio)
<i>rad-nonTRI</i>	16,41
<i>rad-TRI</i> ( $\bar{T}$ )	10,06
<i>rad-TRI</i> ( $\bar{X}, \bar{T}$ )	10,72

O desvio médio entre a solução *rad-nonTRI* diminuiu com relação ao Caso 1, porém ainda é consideravelmente maior do que os desvios verificados para as soluções que consideram os efeitos do TRI. Neste caso, os desvios para as soluções *rad-TRI*( $T$ ) e *rad-TRI*( $X, T$ ) aumentaram para cerca de 10% com relação ao resultado experimental. O acréscimo do fluxo de calor radiativo entre a solução *rad-nonTRI* e *rad-TRI*( $T$ ) alcançaram 34 % e, em média, foi de 14 %. Entre os casos *rad-nonTRI* e *rad-TRI*( $X, T$ ) o máximo acréscimo foi de 30 % e a média foi de 13 %. Os resultados são semelhantes ao Caso 1, porém o acréscimo com a inclusão do TRI no fluxo de calor radiativo foi ligeiramente menor. Com isso, o desvio com a solução experimental aumentou. De forma geral, o comportamento na base e na pluma da chama superestimaram o valor do fluxo de calor radiativo, enquanto na zona de máxima

temperatura o valor foi subestimado. O desvio numérico na pluma da chama pode ser relacionado a uma dificuldade de medição de fluxo de calor radiativo nestes pontos, pois há maior variação da posição da chama na região da pluma. Isso se reflete na fração radiante, que fica acima do valor experimental para os casos  $rad-TRI(T)$  e  $rad-TRI(X,T)$ , conforme se verifica na Tabela 5.6. Ainda assim, o desvio entre resultado experimental e a solução numérica  $rad-TRI(X,T)$  é inferior a 10 %.

Tabela 5.6 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica

Caso	$X_R(\%)$	$\delta\%$ (médio)
Experimental	12,77	-
$rad-nonTRI$	9,62	24,69
$rad-TRI(\bar{T})$	14,65	14,69
$rad-TRI(\bar{X},\bar{T})$	14,01	9,73

Para avaliar a diferença entre as propostas dos casos  $rad-TRI(T)$  e  $rad-TRI(X,T)$ , os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$  são discutidos a seguir. O fator  $\alpha_{TRI}$  é menor do que o obtido no Caso 1, isso se reflete no fluxo de calor radiativo da modelagem  $rad-TRI(T)$  que está sendo subestimado no ponto de máxima temperatura. A Figura 5.16 apresenta o contorno para  $\alpha_{TRI}$ ,  $\alpha_{TRI1}$  e  $\alpha_{TRI2}$ . Novamente a autocorrelação de temperatura é o termo dominante na expressão, para o caso  $rad-TRI(T)$ . Para o caso  $rad-TRI(X,T)$  os termos  $\beta_{TRI}$ ,  $f_T$  e  $f_{\kappa T}$  são apresentados na Figura 5.17. O valor máximo de  $\beta_{TRI}$  mostrou-se próximo do valor máximo de  $\alpha_{TRI}$  para este caso. As parcelas  $f_T$  e  $f_{\kappa T}$  apresentadas são maiores do que o Caso 1 e novamente apresentaram igual importância na obtenção do resultado.

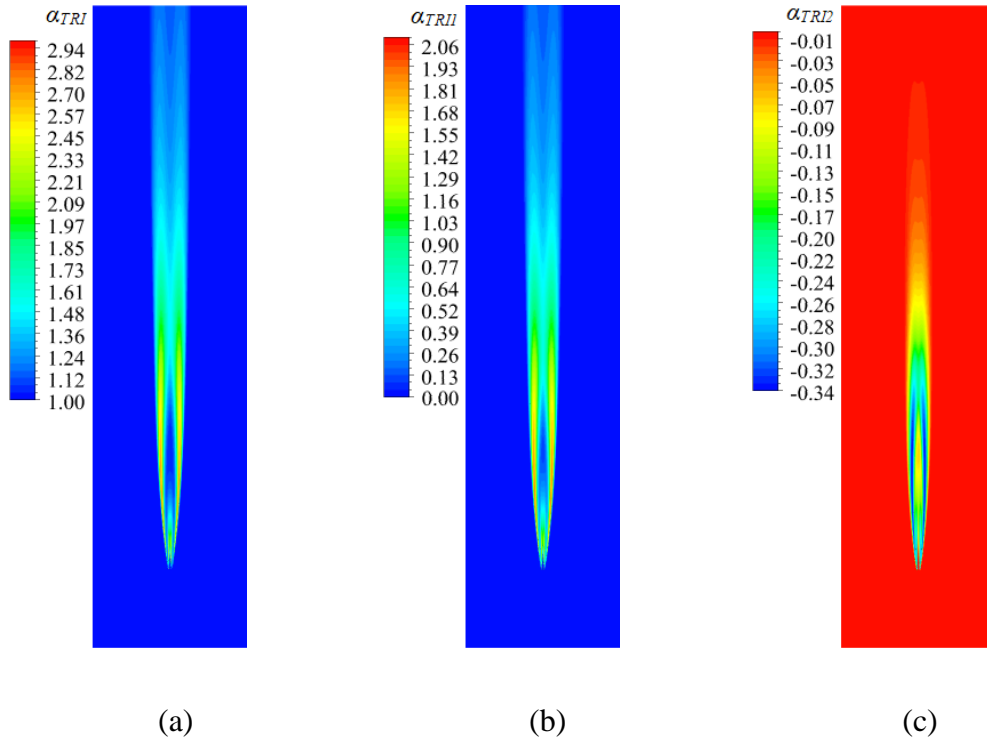


Figura 5.16 – Contorno de (a)  $\alpha_{TRI}$ ; (b)  $\alpha_{TRII}$ ; (c)  $\alpha_{TR12}$ .

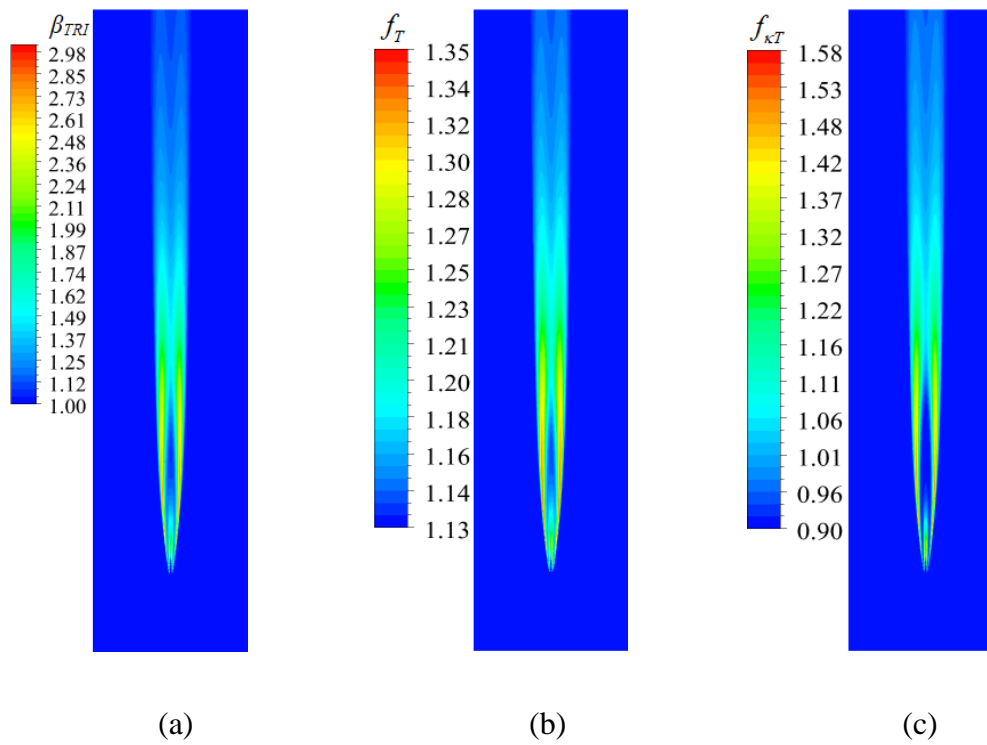


Figura 5.17 – Contorno de (a)  $\beta_{TRI}$ ; (b)  $\beta_{TRII}$ ; (c)  $\beta_{TR12}$ .

Finalmente, para a chama estudada, desvios entre dados experimentais e a solução numérica da ordem de 10 % tanto para fluxo de calor radiativo quanto fração radiante foram obtidos com o modelo identificado  $rad-TRI(X,T)$  para uma chama difusiva gás natural /CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>.

### 5.3 Caso 3

A chama estudada no Caso 3 foi estudada por Quezada, 2018, que produziu as medidas para fluxo de calor radiativo. O combustível utilizado é gás natural com diluição de 40% de CO<sub>2</sub>, o que corresponde a composição em volume de 54,48 % (CH<sub>4</sub>), 40,3 % (CO<sub>2</sub>), 3,6 % (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), 0,72 % (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>), 0,9 % (N<sub>2</sub>). A velocidade do combustível é 3,1 m/s e corresponde a um número de Reynolds de 4487. A potência da chama é de  $Q = 12,62$  kW.

Os primeiros resultados apresentados, Figura 5.18, são referentes aos campos de (a) temperatura, (b) fração de mistura, (c) velocidade e (d) variância de temperatura *rms*. Os resultados são referentes à solução negligenciando a perda de calor por radiação. A temperatura apresentada em (a) é maior do que os Casos 1 e 2, o que é esperado uma vez que há menor diluição de CO<sub>2</sub> e não há diluição de H<sub>2</sub>. A fração de mistura (b) apresenta menor difusão da mistura de combustível no domínio, que é maior do que os casos anteriores. O perfil de vetores de velocidade (c) apresenta um aumento de velocidade na região central da chama, que também é observado nos resultados radiais. O resultado para o perfil de velocidades difere dos casos anteriores, nos Casos 1 e 2 as maiores velocidades foram encontradas próximas a saída do queimador. O que ocorre no Caso 3, com menor velocidade de entrada e maior diâmetro do queimador o perfil de velocidades do escoamento muda. A flutuação de temperatura *rms* apresenta comportamento semelhante aos casos anteriores.



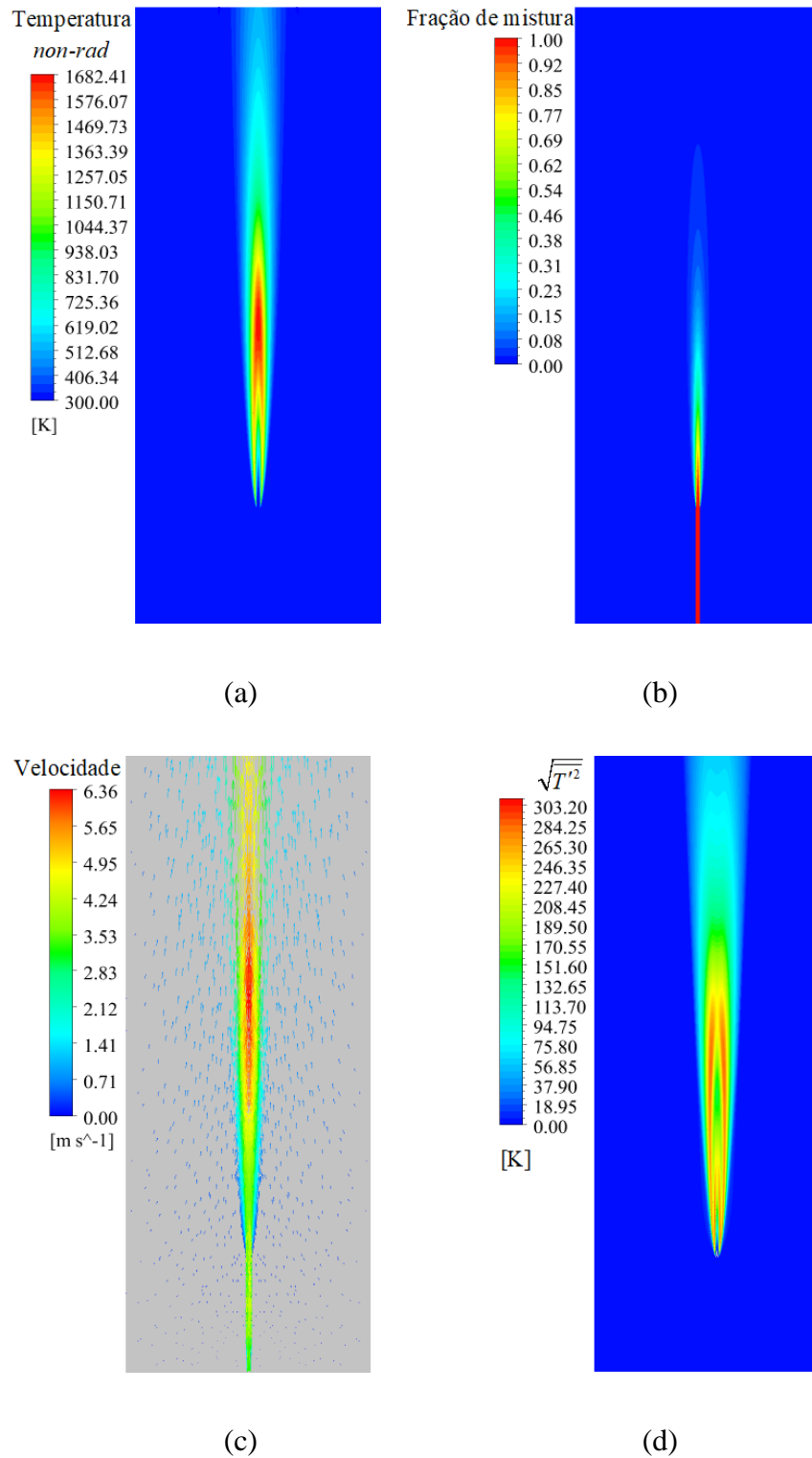


Figura 5.18 – (a) Contorno de temperatura; (b) Contorno de fração de mistura; (c) Vetores de velocidade; (d) Contorno *rms* da variância de temperatura.

A temperatura máxima obtida em cada solução numérica é apresentada na Tabela 5.7. Ao considerar a perda de calor por radiação a temperatura máxima da chama diminui (*rad-*

*nonTRI*), cerca de 55 K, ao incluir os efeitos do TRI, para o caso *rad-TRI(T)* há uma redução de 30 K, e para o caso *rad-TRI(X,T)* de aproximadamente 30 K. A redução da temperatura ao incluir a perda de calor por radiação (55 K) é a menor dos três casos, resultado semelhante foi reportado na literatura [Habibi et al., 2007a] em chamas difusivas turbulentas.

Tabela 5.7 – Temperatura máxima em cada caso

Caso	$T_{max}$
<i>non-rad</i>	1682,41
<i>rad-nonTRI</i>	1627,20
<i>rad-TRI(<math>\bar{T}</math>)</i>	1596,58
<i>rad-TRI(<math>\bar{X},\bar{T}</math>)</i>	1597,04

A temperatura é avaliada também na linha central e em quatro linhas, conforme as Figuras 5.19 e 5.20:

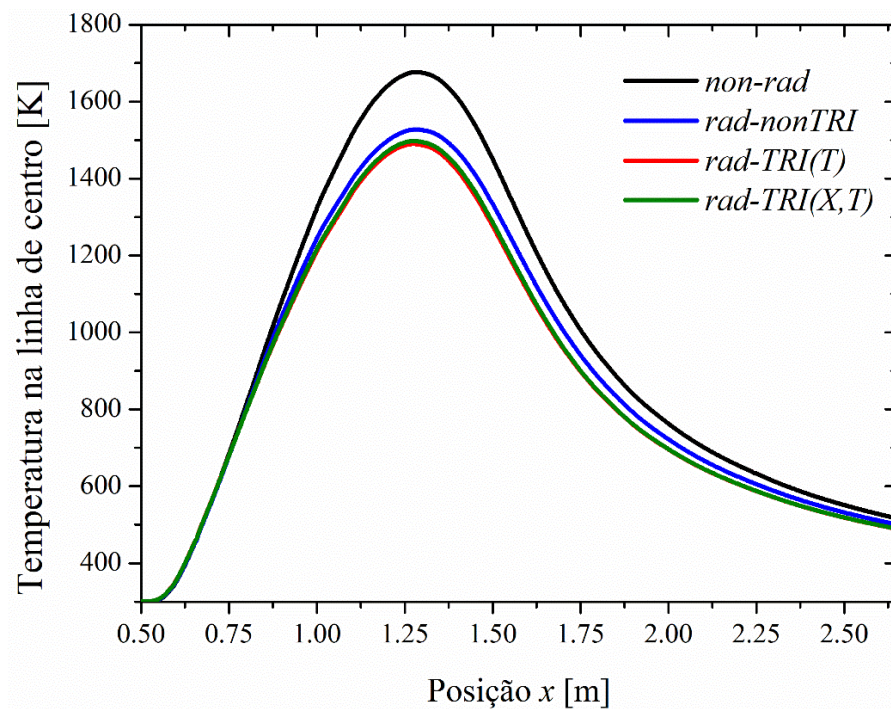


Figura 5.19 – Temperatura na linha de centro.

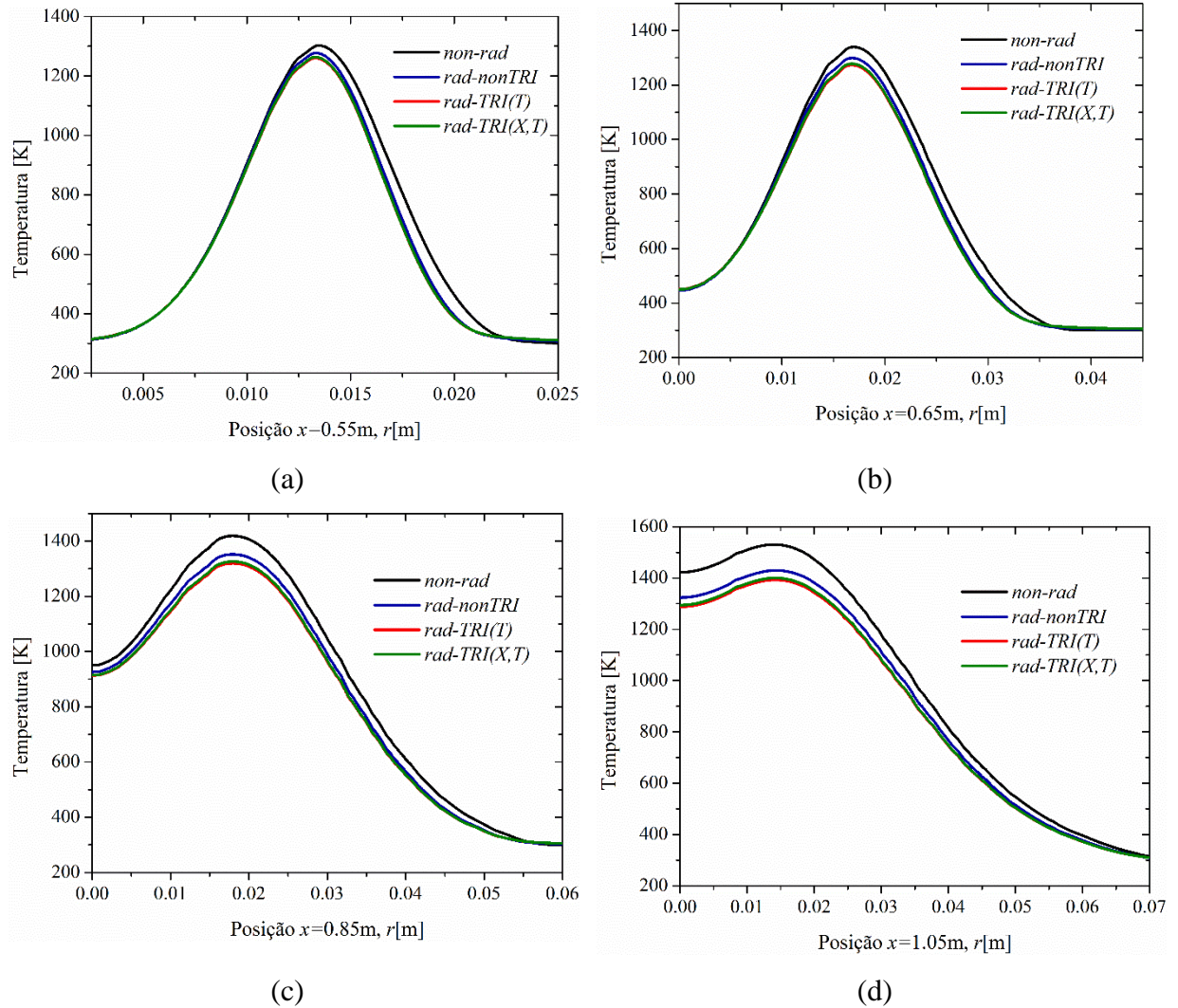
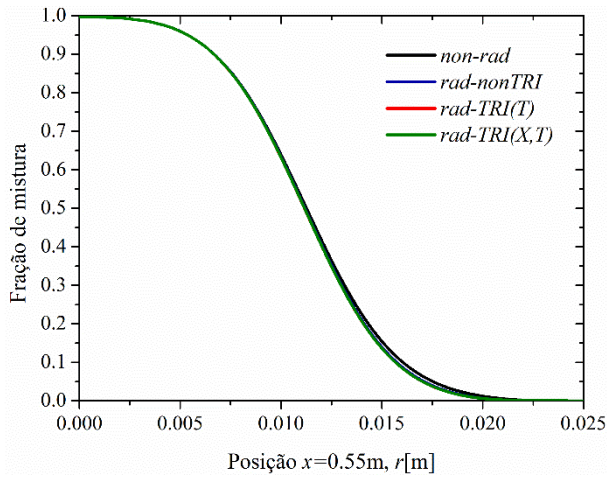
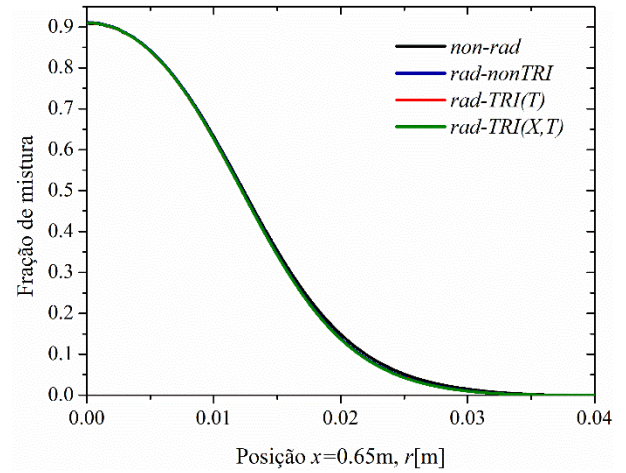


Figura 5.20 – Resultados numéricos para temperatura em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.

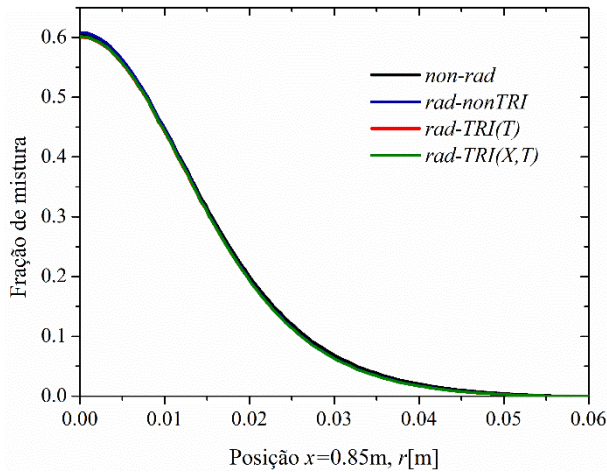
Nas Figuras 5.19 e 5.20 é possível identificar maior diferença na solução *non-rad* seguida da solução *rad-nonTRI*, os resultados dos casos *rad-TRI(T)* e *rad-TRI(X,T)* estão aproximadamente sobrepostos. Na linha central há diferença de aproximadamente 100 K entre a solução *non-rad* e *rad-nonTRI* o que é compatível com os resultados anteriores. Ao analisar os resultados radiais é possível perceber uma diferença com relação aos dois casos anteriores, nesta chama há pequenas instabilidades, mais aparentes para temperaturas radiais, mas que também aparecem nos resultados de fração de mistura e velocidade. De forma geral, não há impacto ao considerar os efeitos TRI na fração de mistura, Figura 5.21 e na velocidade da chama, Figura 5.22.



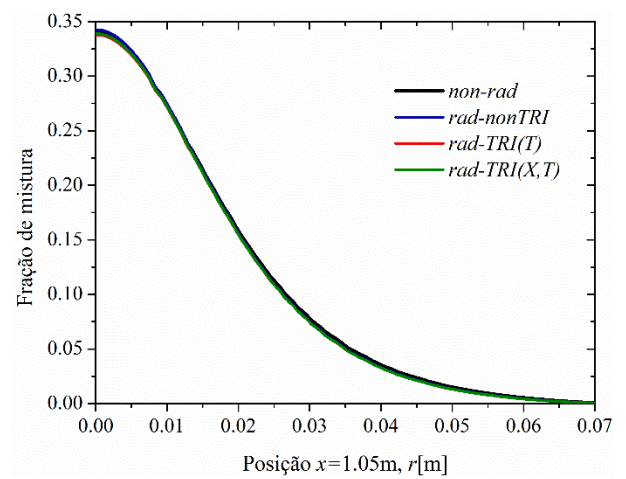
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.21 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a)  $x = 0,55$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.



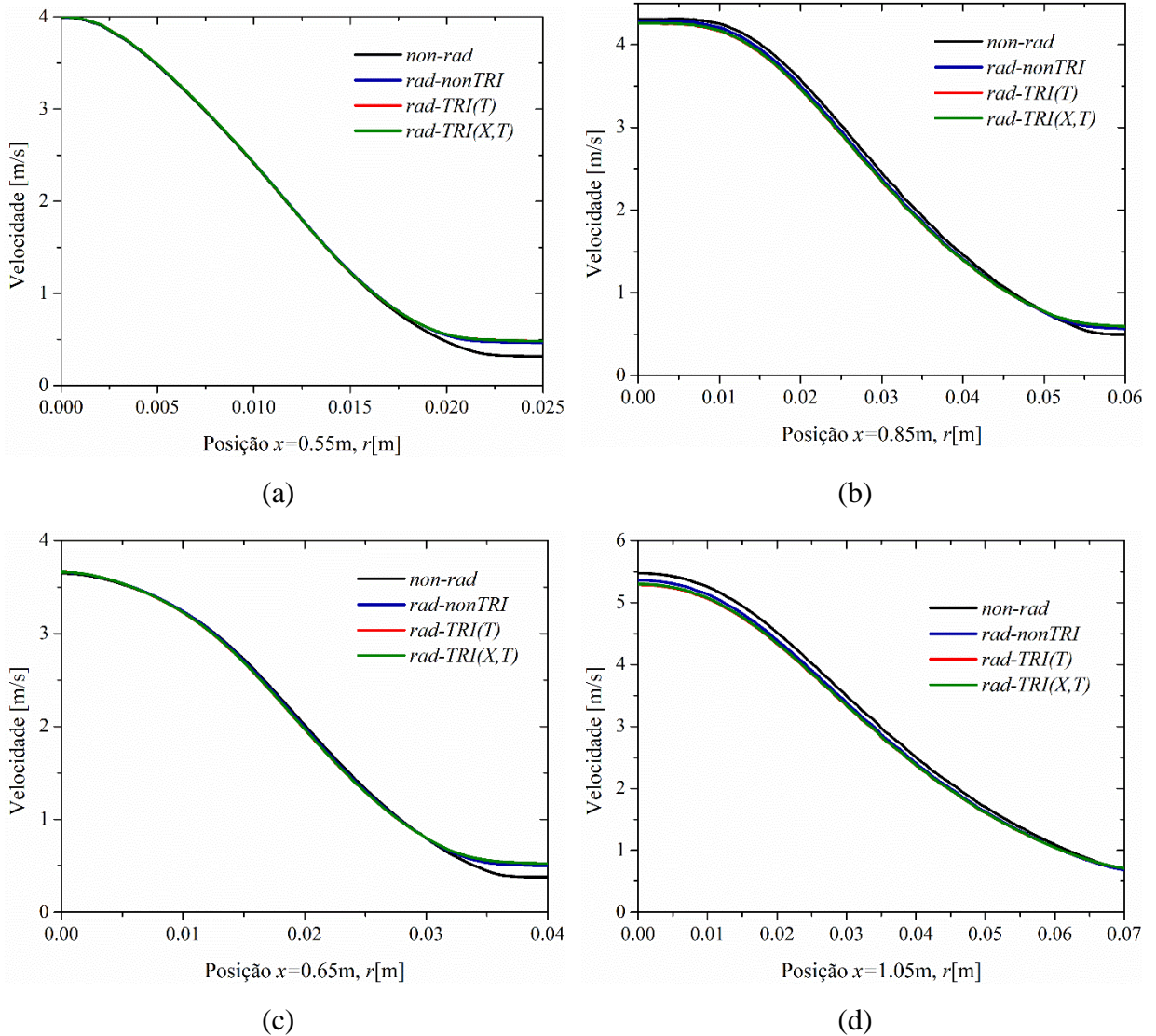


Figura 5.22 – Resultados numéricos para velocidade em (a)  $x = 0,55\text{ m}$ ; (b)  $x = 0,65\text{ m}$ ; (c)  $x = 0,85\text{ m}$ ; (d)  $x = 1,05\text{ m}$ .

Os resultados na Figura 5.23 são referentes ao fluxo de calor radiativo. As barras de desvio relacionadas às medidas experimentais foram estimadas a partir do desvio padrão adotando um intervalo de confiança de 95%. O pico para fluxo de calor radiativo no caso experimental é de  $462\text{ W/m}^2$ , para o caso *rad-nonTRI* é de aproximadamente  $237\text{ W/m}^2$ , para o caso *rad-TRI(T)* foi de  $371\text{ W/m}^2$  e por fim o caso *rad-TRI(X,T)* foi de  $343\text{ W/m}^2$ . Considerando o valor máximo do fluxo de calor radiativo, a solução *rad-TRI(T)* novamente apresentou o menor desvio entre os dados experimentais e numéricos. Sendo este o caso com maior desvio entre os resultados numéricos e experimentais, conforme Tabela 5.8.

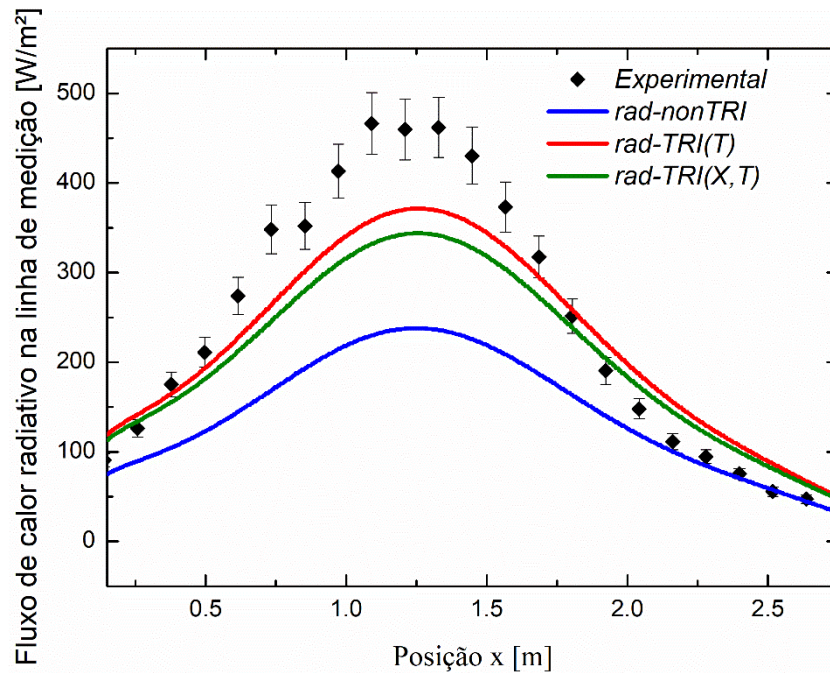


Figura 5.23 –Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Tabela 5.8 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo experimental e numérico

Caso	$\delta\%$ (médio)
<i>rad-nonTRI</i>	21,98
<i>rad - TRI</i> ( $\bar{T}$ )	9,67
<i>rad - TRI</i> ( $\bar{X}, \bar{T}$ )	11,44

O desvio entre a solução *rad-nonTRI* é o maior dos três casos estudados. A maior diferença ocorre no pico do fluxo de calor radiativo. Comparando os resultados, no ponto de máximo valor do fluxo de calor radiativo, no Caso 1 o desvio entre solução numérica e experimental é de aproximadamente 9 %, no Caso 2 é de aproximadamente 13 %, enquanto o Caso 3 alcançou 19 % no desvio local. A maior diferença entre os estudados é que há presença de fuligem no Caso 3, conforme a Figura 5.24, enquanto as chamas dos Casos 1 e 2 são completamente azuis. A fuligem é negligenciada na modelagem numérica, porém sabe-se que ela promove o aumento da emissão radiativa, em Gupta et al., 2013, o aumento da fração radiante ao inserir fuligem foi de 24 % a 51 % dependendo da modelagem TRI empregada.

Dessa forma é possível assumir que a negligência da modelagem da fuligem pode ter efeito sobre os resultados numéricos, aumentando o desvio com relação as medidas experimentais.

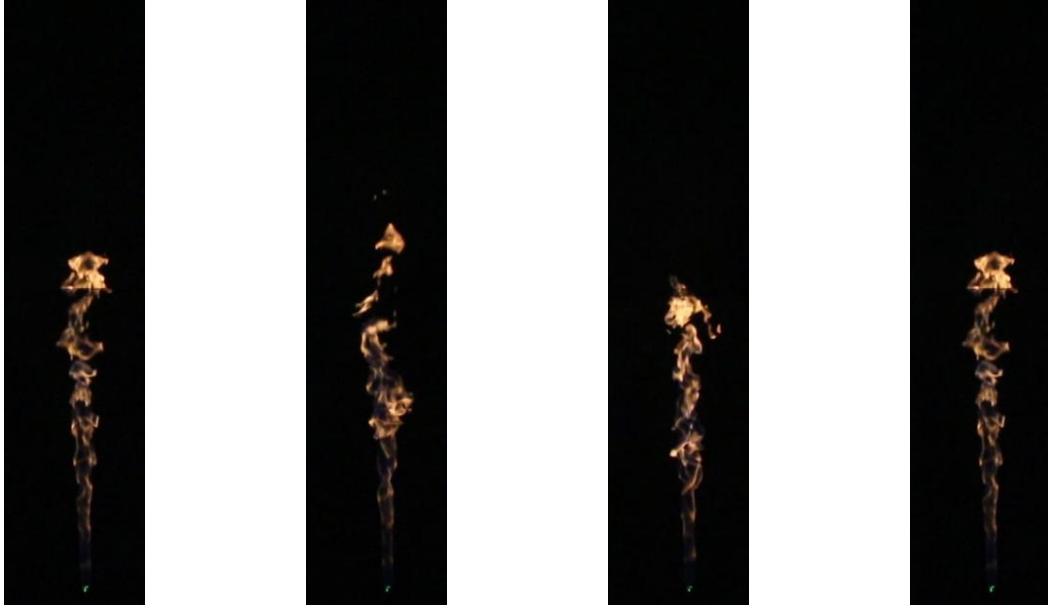


Figura 5.24 – Fotografias da chama estudada no Caso 3, Quezada, 2018.

A fração radiante calculada numericamente ficou acima do valor experimental para os casos  $rad-TRI(T)$  e  $rad-TRI(X,T)$ , conforme Tabela 5.9. Ainda assim o desvio entre resultado experimental e a solução numérica  $rad-TRI(X,T)$  é inferior a 6 %.

Tabela 5.9 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica

Caso	$X_R(\%)$	$\delta\%$ (médio)
Experimental	13,0	-
$rad-nonTRI$	9,48	27,11
$rad-TRI(\bar{T})$	14,82	14,00
$rad-TRI(\bar{X},\bar{T})$	13,77	5,90

Para avaliar a diferença entre as propostas dos casos  $rad-TRI(T)$  e  $rad-TRI(X,T)$  os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$  são discutidos a seguir, Figuras 5.25 e 5.26. Os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$

apresentam valores máximos superiores aos Casos 1 e 2. O acréscimo do fluxo de calor radiativo entre a solução *rad-nonTRI* e *rad-TRI(T)* foi de 36 % e em média foi de 21 %. Entre os casos *rad-nonTRI* e *rad-TRI(X,T)* o máximo acréscimo foi de 30 % e a média foi de 19 %.

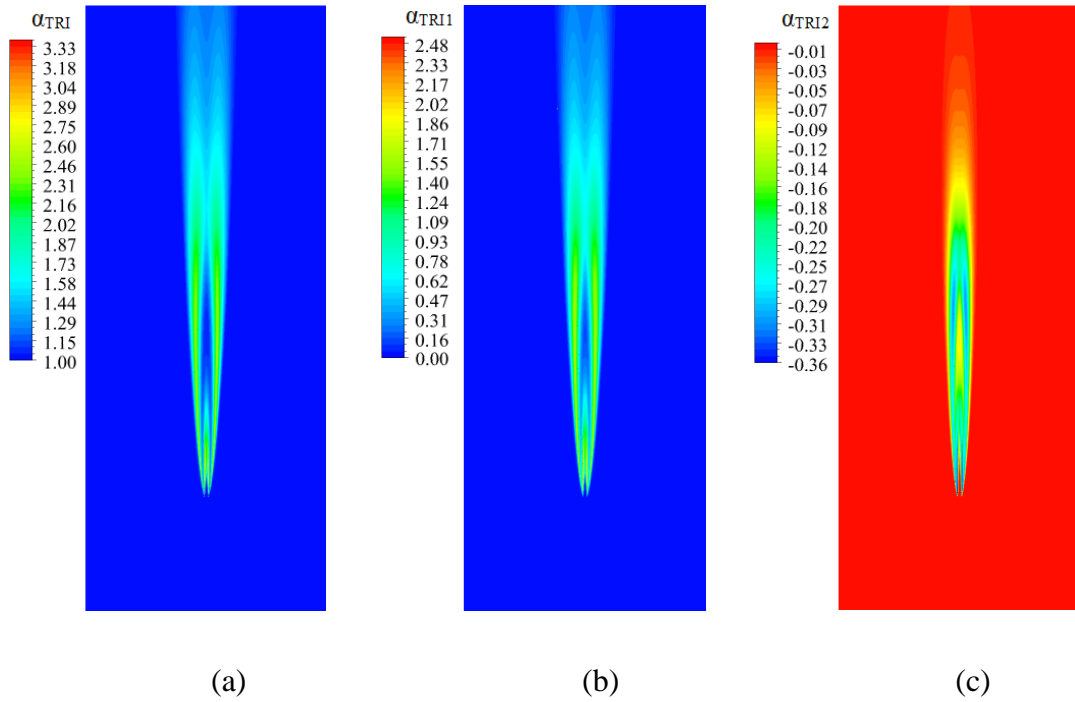


Figura 5.25 – Contorno de (a)  $\alpha_{TRI}$ ; (b)  $\alpha_{TRI1}$ ; (c)  $\alpha_{TRI2}$ .

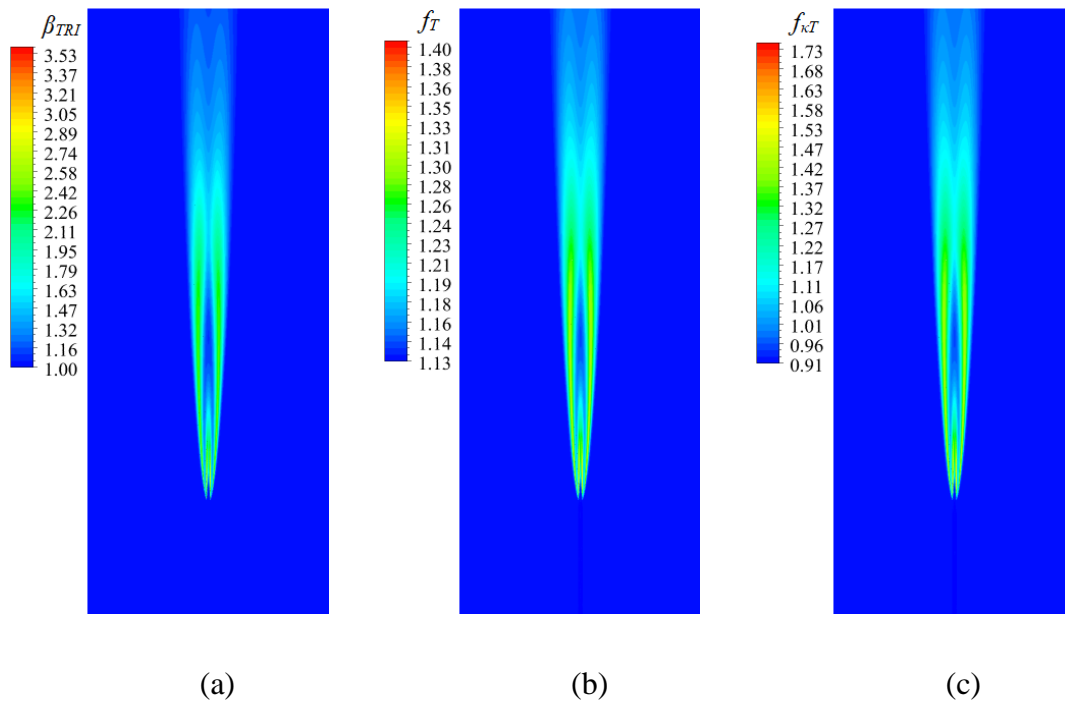


Figura 5.26 – Contorno de (a)  $\beta_{TRI}$ ; (b)  $\beta_{TRI1}$ ; (c)  $\beta_{TRI2}$ .



Finalmente, para a chama estudada, desvios entre dados experimentais e a solução numérica da ordem de 10 % para fluxo de calor radiativo foram obtidos para o caso  $rad-TRI(T)$  e de 14 % para fração radiante, para uma chama difusiva gás natural e  $CO_2$ . O resultado para fração radiante para a solução  $rad-TRI(X,T)$  foi na ordem de 6 %.

#### 5.4 Estudo do Caso 1 empregando o campo de variância de temperatura obtido da abordagem PDF

Os resultados apresentados nas seções anteriores foram obtidos utilizando a equação de transporte para variância de temperatura proposta por Snegirev, 2004, apresentada na Eq. (3.50). Como mencionado anteriormente, esta abordagem foi empregada em estudos TRI em que se utiliza a modelagem RANS para turbulência, entre eles, Centeno et al., 2016, Yi et al., 2018, Yang et al., 2019. Por outro lado, o modelo PDF empregado já incorpora os efeitos da turbulência na temperatura da chama. Assim, a variância da temperatura pode ser obtida diretamente da abordagem PDF, conforme apresentado na Eq. (3.51). Com isso, é possível realizar uma nova comparação para os modelos TRI empregados, uma vez que a variância da temperatura pode ser obtida através de outra modelagem. Isso permitirá avaliar a sensibilidade da solução com respeito à modelagem do campo de variância da temperatura.

Assim, esta seção apresenta os resultados para a chama do Caso 1, com a variância de temperatura obtida diretamente da abordagem PDF, através de uma função estabelecida do código Ansys Fluent, calculada conforme apresentado na Eq. (3.51).

A chama estudada no Caso 1 possui velocidade de injeção de combustível de 5,0 m/s correspondente ao número de Reynolds de 4487. A potência da chama é de  $Q = 5,56$  kW. A composição do combustível, em volume, corresponde a 33,6 % ( $CH_4$ ), 55,8 % ( $CO_2$ ), 7,4 % ( $H_2$ ), 2,2 % ( $C_2H_6$ ), 0,4 % ( $C_3H_8$ ), e 0,6 % ( $N_2$ ).

Os primeiros resultados apresentados, Figura 5.27, são referentes aos campos de (a) variância de temperatura  $rms$ ,  $\sqrt{T'^2}$ , obtidos da equação de transporte Eq. (3.50) e (b) variância de temperatura  $rms$ , identificada por  $\sqrt{T'^2}_{pdf}$  obtida através do modelo PDF, Eq. (3.51). Para fins de comparação, foi utilizada a mesma escala, ou seja, o mesmo valor máximo para construir as figuras. É possível perceber diferenças entre os contornos; essas diferenças são representadas também nos termos  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$ , conforme as Figuras 5.33 e 5.34. O resultado apresentado na Figura 5.27 (a), obtido com a equação de transporte, carrega as

grandezas da turbulência e os gradientes de temperatura, estendendo o contorno da variância de temperatura.

Na Figura 5.27 (b) a variância de temperatura calculada pela integração da temperatura e da função beta PDF na fração de mistura produz um campo com os valores máximos semelhantes, na região dos maiores gradientes de temperatura, mas com domínio restrito como a variável de integração, no caso a fração de mistura.

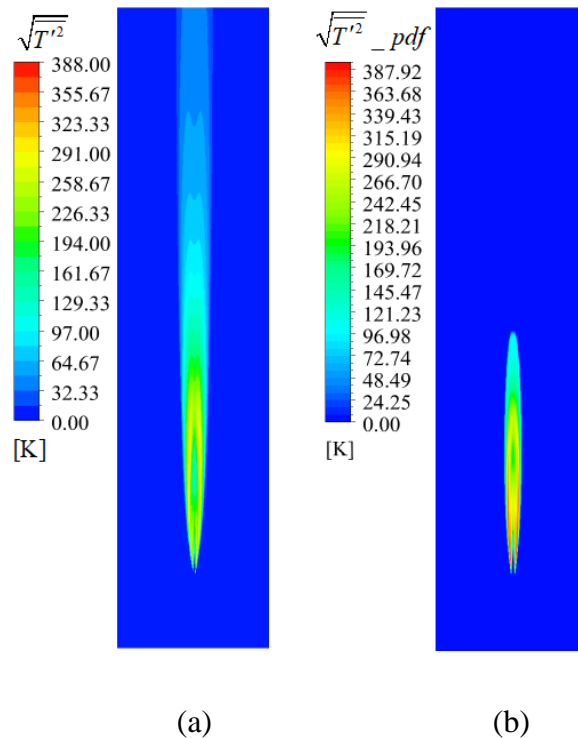


Figura 5.27 – (a) Contorno *rms* da variância de temperatura; (b) Contorno *rms* da variância de temperatura obtido com abordagem PDF.

Os resultados para máxima temperatura em cada modelagem são apresentados na Tabela 5.10. Ao incluir os efeitos do TRI, para o caso *rad-TRI(T)-Tpdf*, houve uma redução de 65 K; para o caso *rad-TRI(X,T)-Tpdf*, a redução foi de aproximadamente 54 K. O resultado indica maior sensibilidade no campo de temperatura em comparação aos casos anteriores.

Tabela 5.10 – Temperatura máxima em cada caso

Caso	$T_{max}$
<i>non-rad</i>	1617,53
<i>rad-nonTRI</i>	1485,13
<i>rad-TRI(<math>\bar{T}</math>)</i>	1420,81
<i>rad-TRI(<math>\bar{X},\bar{T}</math>)</i>	1431,70

A diferença entre as soluções com a inclusão da modelagem TRI é percebida também quando a temperatura é avaliada na linha central e em quatro linhas, conforme as Figuras 5.28 e 5.29.

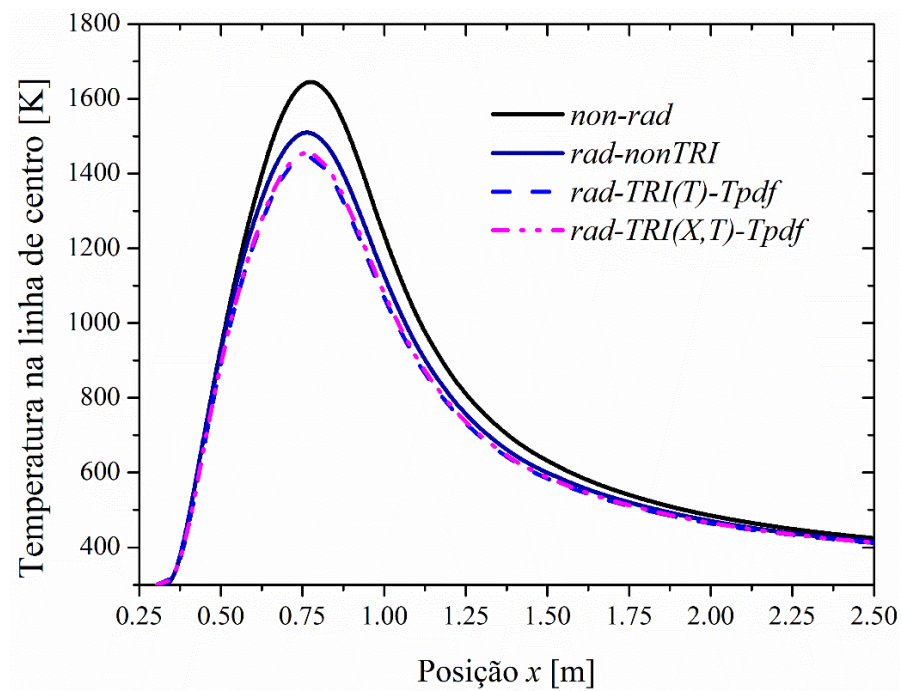


Figura 5.28 – Temperatura na linha de centro.

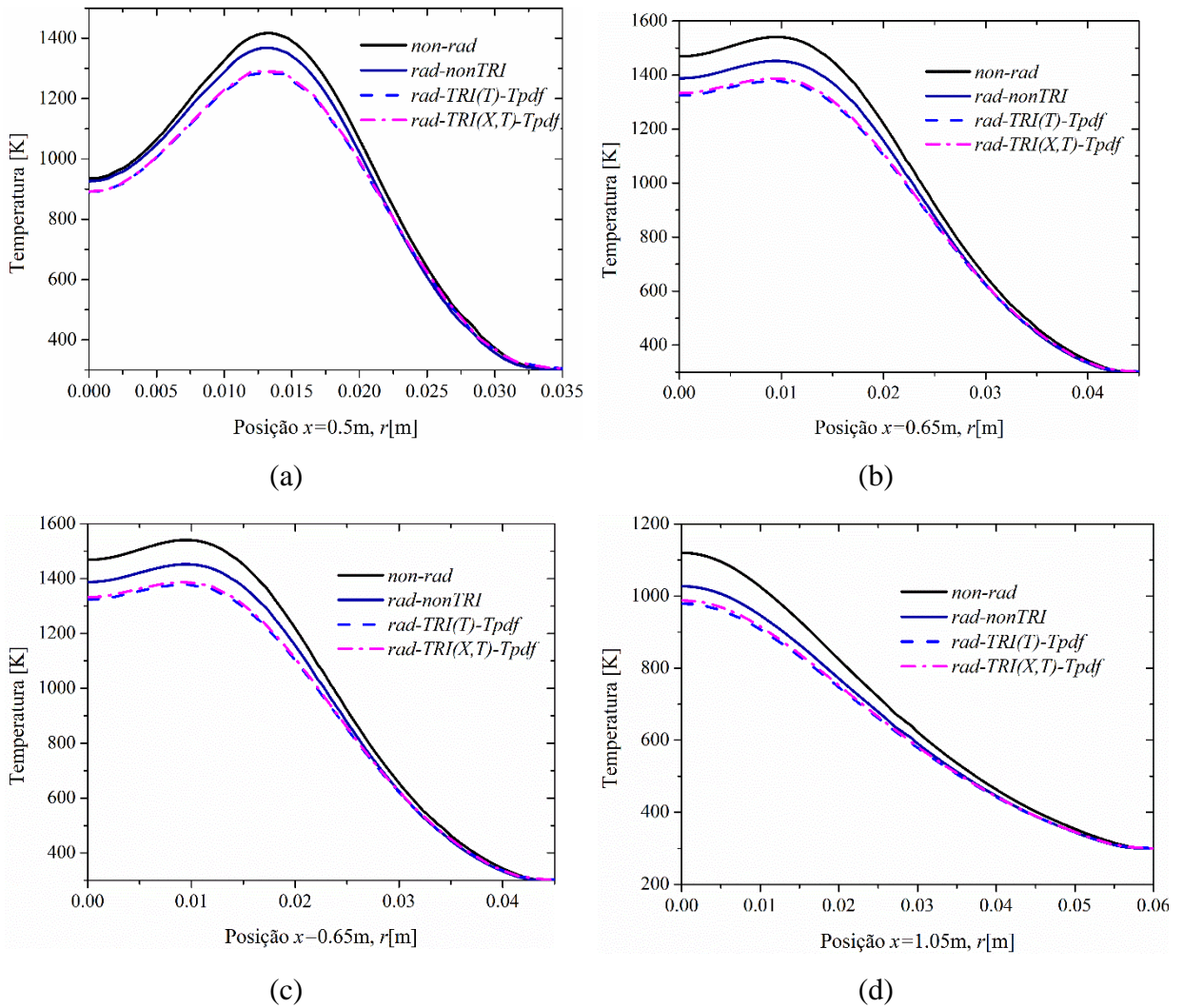


Figura 5.29 – Resultados numéricos para temperatura em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.

De forma geral, o comportamento é semelhante ao apresentado na Seção 5.1 com resultados muito próximos para *rad-TRI(T)-Tpdf* e *rad-TRI(X,T)-Tpdf*. O mesmo pode ser observado nos resultados para fração de mistura, Figura 5.30, e para velocidade, Figura 5.31.

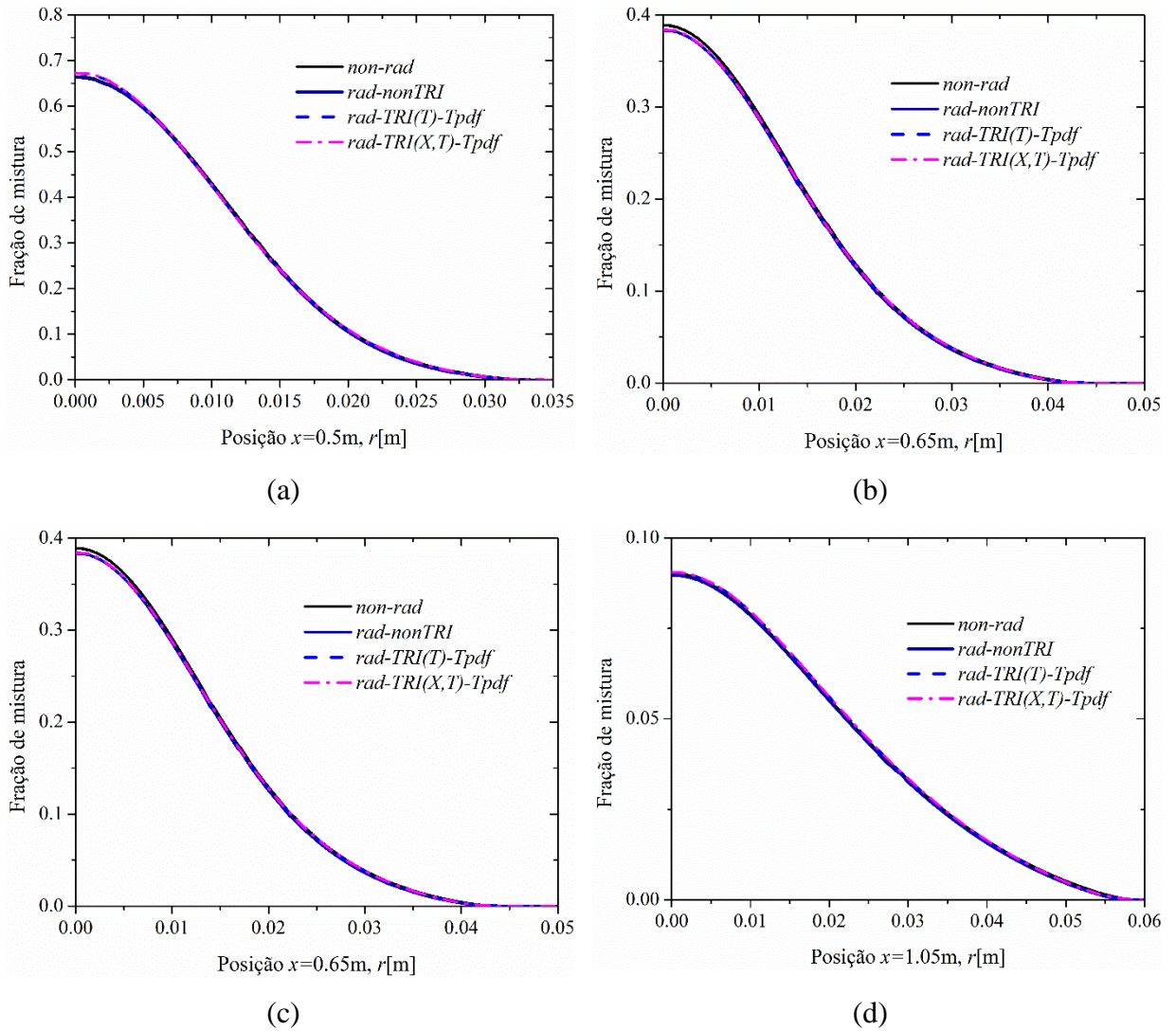


Figura 5.30 – Resultados numéricos para fração de mistura em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.



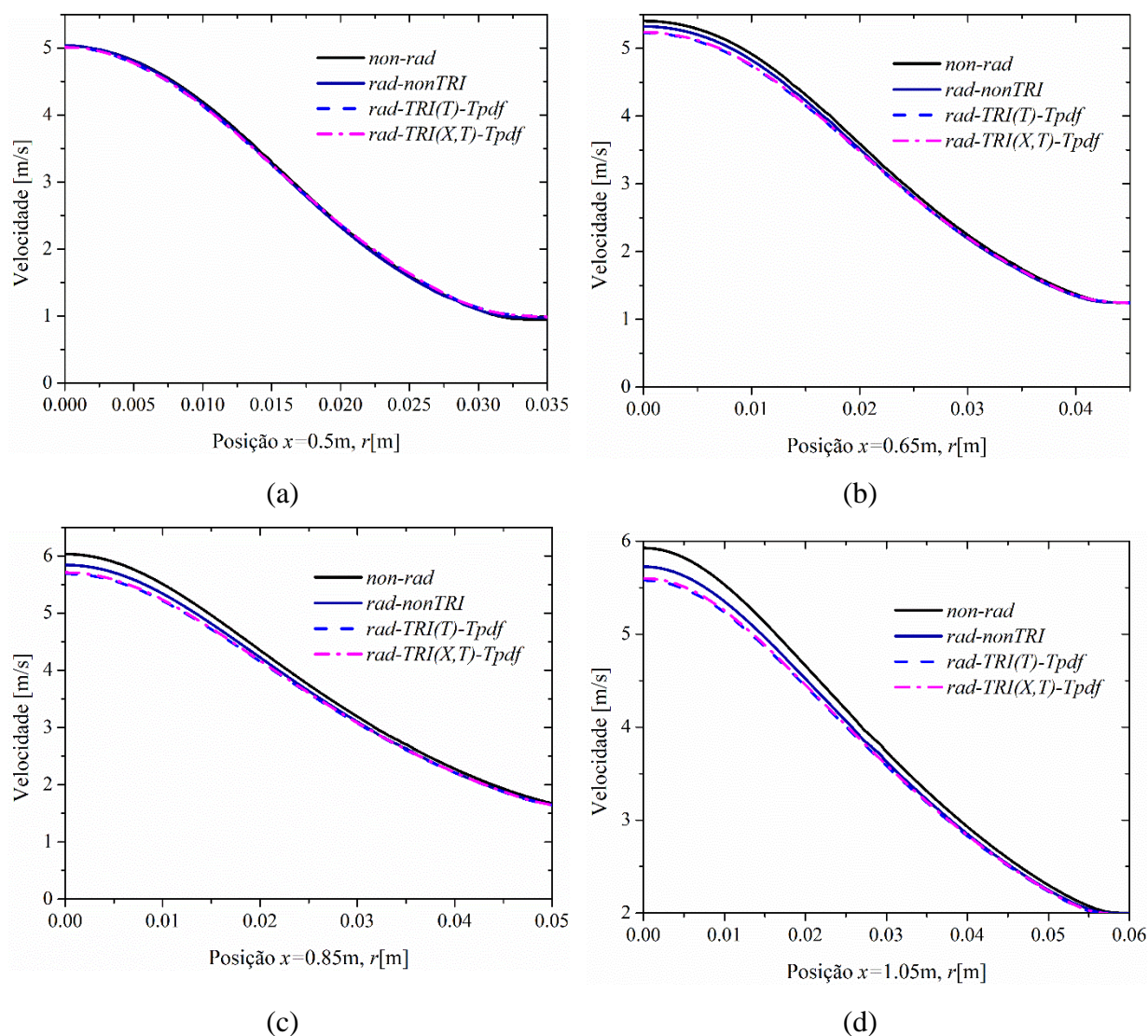


Figura 5.31 – Resultados numéricos para velocidade em (a)  $x = 0,5$  m; (b)  $x = 0,65$  m; (c)  $x = 0,85$  m; (d)  $x = 1,05$  m.

Os resultados a seguir, Figura 5.32, são referentes ao fluxo de calor radiativo. Sabendo que há uma diminuição do campo de temperatura, na comparação com a Seção 5.1, espera-se aumento do fluxo de calor radiativo, o que pode ser observado na Figura 5.32. O resultado indica maior concordância no pico do fluxo de calor radiativo com os resultados experimentais. O comportamento da curva numérica considerando TRI, após o pico, também se aproxima dos resultados experimentais. O maior desvio encontra-se na base da chama, onde o fluxo de calor radiativo numérico é superestimado.

O pico para fluxo de calor radiativo do caso experimental foi de aproximadamente  $490 \text{ W/m}^2$ ; para o caso *rad-nonTRI*, foi de  $277 \text{ W/m}^2$ ; para *rad-TRI(T)-Tpdf*, foi de  $491 \text{ W/m}^2$ ; e para o caso *rad-TRI(X,T)-Tpdf*, foi de  $461 \text{ W/m}^2$ . Considerando o valor máximo do fluxo de

calor radiativo, a solução  $rad-TRI(T)-Tpdf$  apresentou o menor desvio entre os dados experimentais e numéricos. O desvio entre as soluções é apresentado na Tabela 5.11, onde são reportados também os desvios obtidos na Seção 5.1.

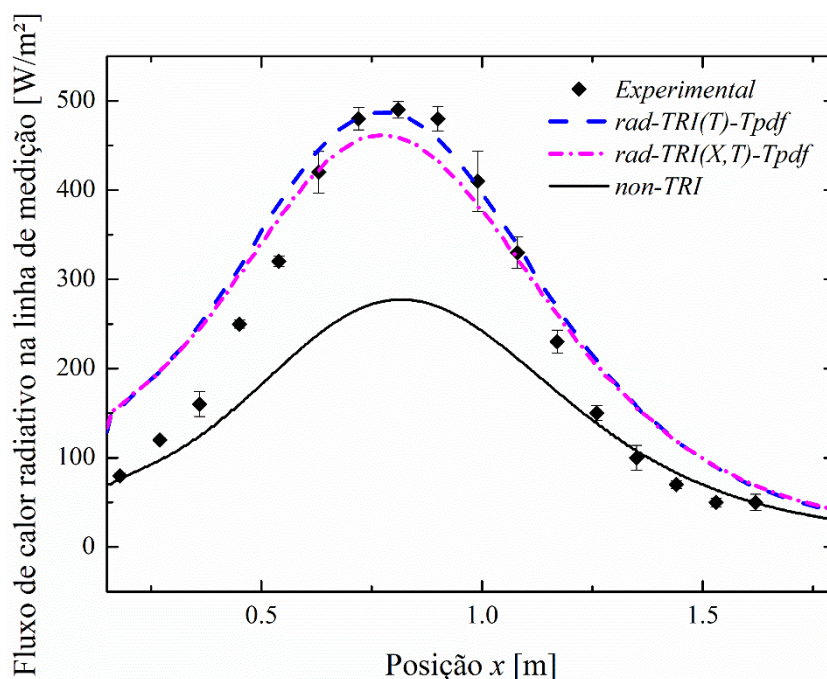


Figura 5.32 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Tabela 5.11 – Desvio médio entre fluxo de calor radiativo experimental e numérico

Caso	$\delta\%$ (médio)- $Tpdf$	$\delta\%$ (médio) (Seção 5.1)
$rad-nonTRI$	19,98	19,98
$rad-TRI(T)-Tpdf$	8,29	8,32
$rad-TRI(X,T)-Tpdf$	7,78	9,08

Neste caso, os desvios para as soluções  $rad-TRI(T)-Tpdf$  e  $rad-TRI(X,T)-Tpdf$  apresentam uma pequena redução. O custo computacional se manteve em torno de 7 dias para a solução completa do caso, utilizando um processador 8-Core 3.5 GHz e memória 16GHz. O acréscimo do fluxo de calor radiativo entre a solução  $rad-nonTRI$  e  $rad-TRI(T)-Tpdf$  alcançou

43 %, com um valor médio de 16 %. Entre os casos *rad-nonTRI* e *rad-TRI(X,T)-Tpdf*, o máximo acréscimo foi de 40 %, com uma média de 15 %. O comportamento do resultado numérico superestima o fluxo de calor radiativo, isso se reflete na fração radiante, que fica acima do valor experimental para os casos *rad-TRI(T)-Tpdf* e *rad-TRI(X,T)-Tpdf*, conforme se observa na Tabela 5.12. Dessa forma, o desvio entre o resultado experimental e a solução numérica se elevou para o caso *rad-TRI(T)-Tpdf*, alcançando 20 %. Em comparação com os resultados obtidos na Seção 5.1 o desvio médio relacionado a fração radiante aumentou.

Tabela 5.12 – Comparação entre fração radiante experimental e numérica

Caso	$X_R(\%)$	$\delta\%(\text{méd})$ – <i>Tpdf</i>	$\delta\%(\text{méd})$ – (Seção 5.1)
Experimental	13,08	-	
<i>rad-nonTRI</i>	9,20	29,65	
<i>rad-TRI(T)-Tpdf</i>	15,65	19,64	9,16
<i>rad-TRI(X,T)-Tpdf</i>	14,78	12,91	1,58

Para avaliar a diferença entre as propostas dos casos *rad-TRI(T)-Tpdf* e *rad-TRI(X,T)-Tpdf*, os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$  são discutidos a seguir. Os fatores  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$ , como nos casos anteriores, apresentam contorno semelhante a variância de temperatura. A Figura 5.33 apresenta o contorno para  $\alpha_{TRI}$ ,  $\alpha_{TRI1}$  e  $\alpha_{TRI2}$ . Novamente, a autocorrelação de temperatura é o termo dominante na expressão, para o caso *rad-TRI(T)-Tpdf*. Para o caso *rad-TRI(X,T)-Tpdf*, os termos  $\beta_{TRI}$ ,  $f_T$  e  $f_{kT}$  são apresentados na Figura 5.34. Os valores máximos de  $\alpha_{TRI}$  e  $\beta_{TRI}$  são inferiores aos encontrados na Seção 5.1, porém não é possível comparar diretamente porque a distribuição ao longo do domínio é diferente dos casos anteriores.



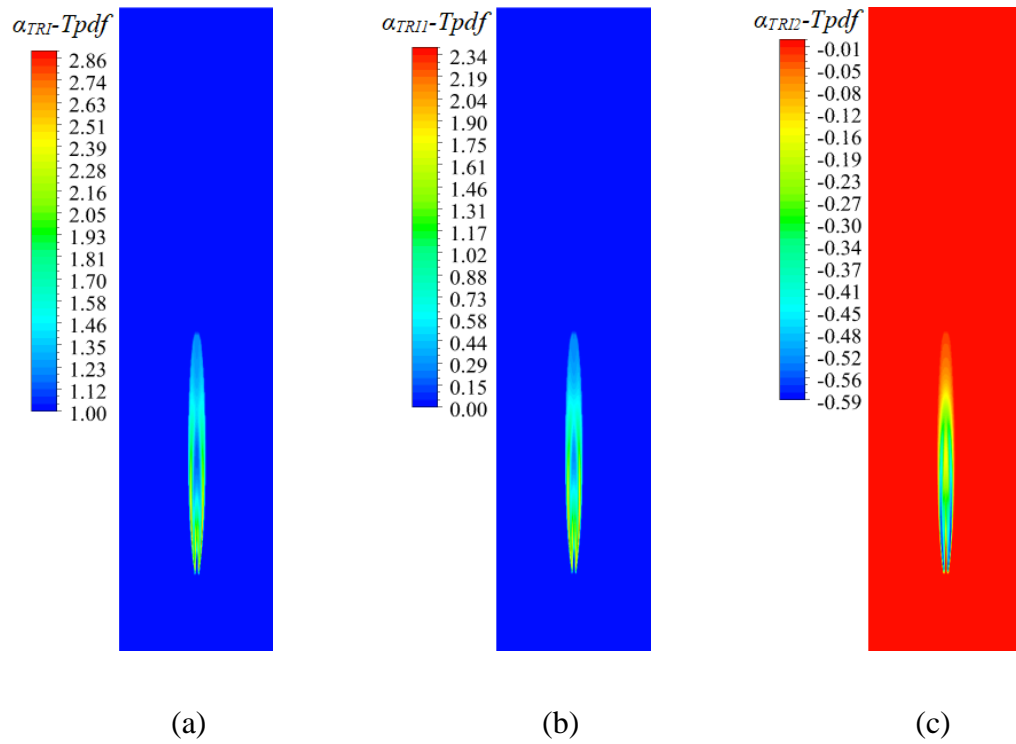


Figura 5.33 – Contorno de (a)  $\alpha_{TRI}$ ; (b)  $\alpha_{TRII}$ ; (c)  $\alpha_{TR12}$ .

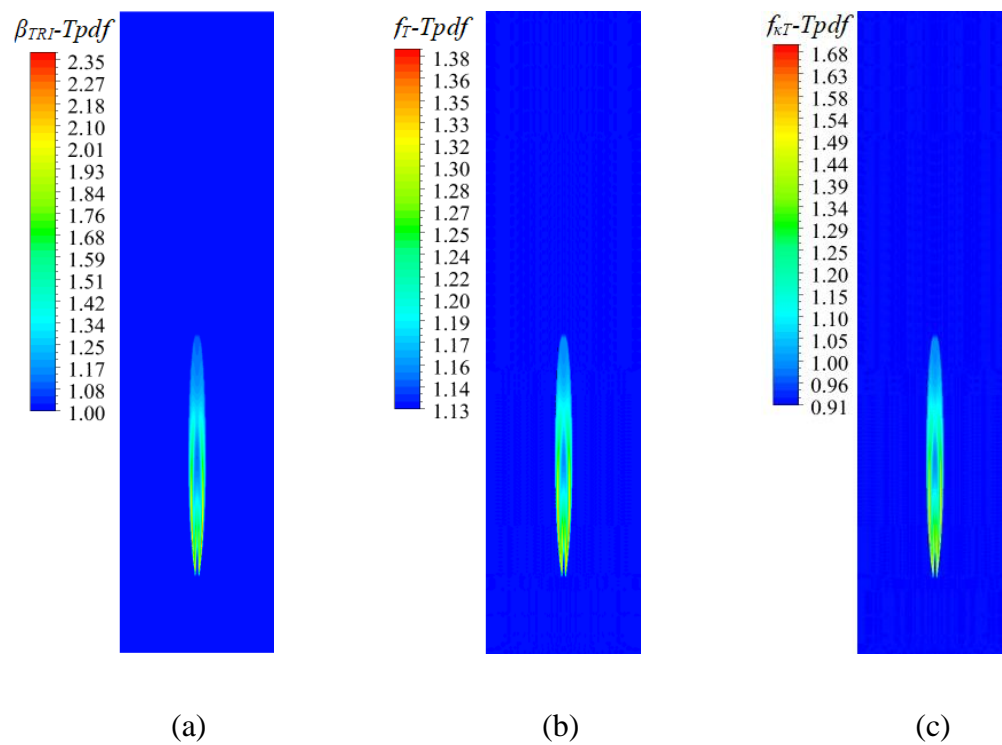


Figura 5.34 – Contorno de (a)  $\beta_{TRI}$ ; (b)  $\beta_{TRII}$ ; (c)  $\beta_{TR12}$ .

Uma comparação direta com os resultados sobrepostos para o Caso 1, para a temperatura na linha central, é apresentada na Figura 5.35. Os resultados indicam diferenças entre as abordagens, com os menores picos de temperatura nos resultados *rad-TRI(T)-Tpdf* e *rad-TRI(X,T)-Tpdf*. A Figura 5.36 apresenta o fluxo de calor radiativo obtido em cada caso. É possível perceber que os casos considerando a variância de temperatura obtida com a abordagem PDF apresentam maiores valores de fluxo de calor radiativo na base da chama. Contudo, após o pico do fluxo de calor radiativo, esses resultados se aproximam mais dos resultados experimentais, o que indicaria melhor sensibilidade para contabilizar o efeito da diminuição da temperatura da chama.

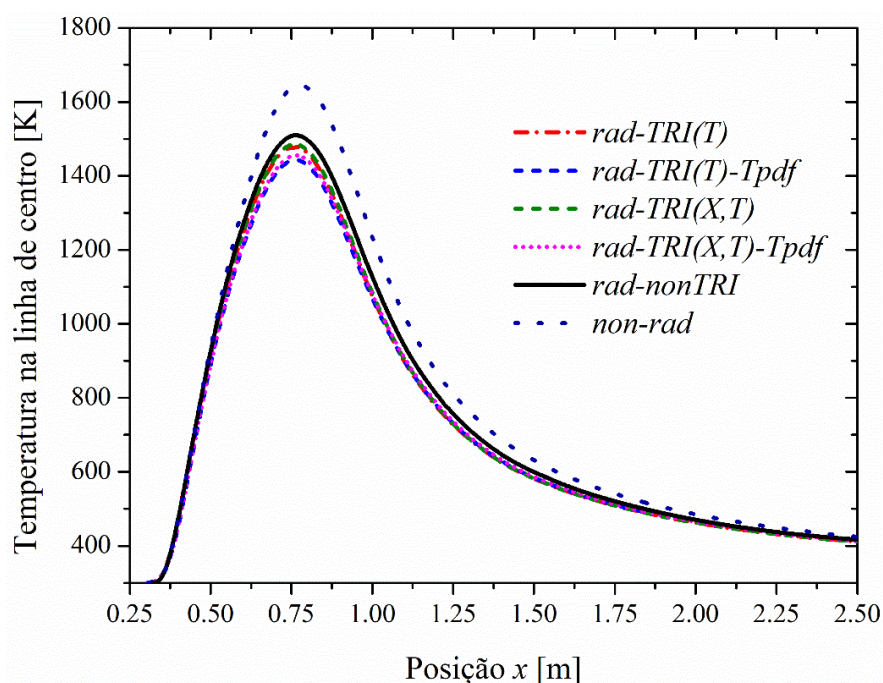


Figura 5.35 – Temperatura na linha de centro.

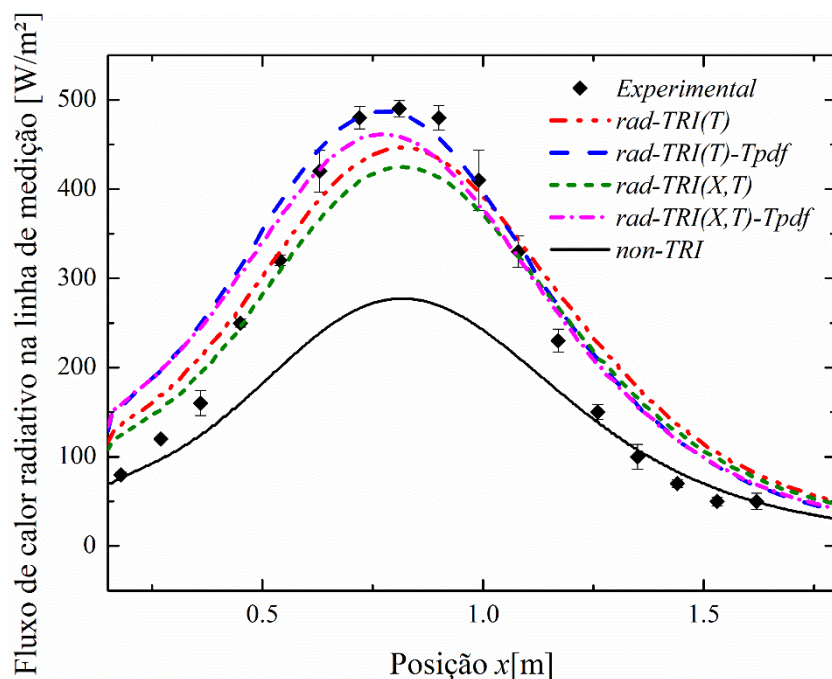


Figura 5.36 –Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Por fim, uma comparação do termo de emissão da RTE para cada abordagem TRI é apresentada na Figura 5.37. Os casos são identificados por  $emi-TRI(T)$  e  $emi-TRI(X,T)$  para os resultados obtidos com a equação de transporte para variância de temperatura. Os casos identificados por  $emi-TRI(T)-Tpdf$  e  $emi-TRI(X,T)-Tpdf$  foram encontrados com a variância de temperatura obtida com o modelo PDF. A escala foi modificada para o valor máximo do caso  $emi-TRI(T)-Tpdf$  para a comparação entre os resultados, mas os resultados originais são apresentados na Figura 5.38.

As Figuras 5.36, 5.37 e 5.38 apresentam as diferenças entre os resultados devido às diferentes abordagens de determinação da variância de temperatura. A utilização da abordagem PDF indica maior redução da temperatura da chama e conduz a resultados mais próximos dos dados experimentais, especialmente no pico do fluxo de calor radiativo, região de maior importância. De forma geral, o comportamento do fluxo de calor radiativo e, conseqüentemente, do termo de emissão da RTE calculado em cada caso indicam que ambas as metodologias podem ser empregadas, reconhecendo as limitações que o emprego de um conjunto de modelos acoplados estabelece quanto a se obter conclusões definitivas.

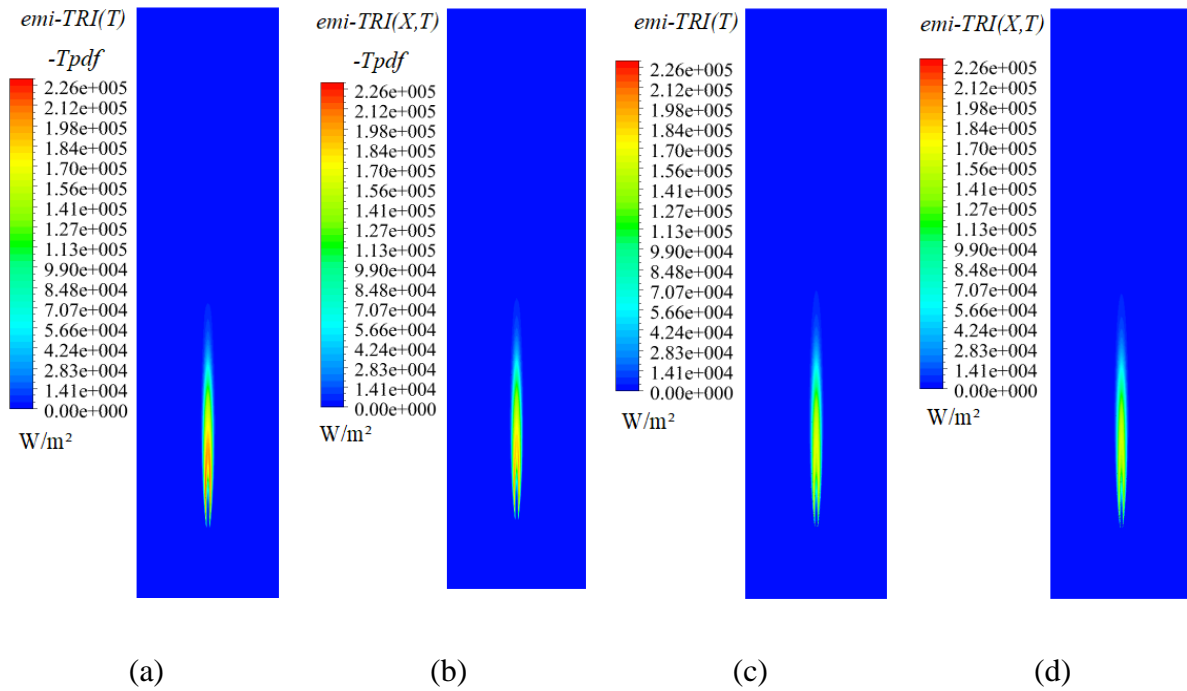


Figura 5.37 – Termo de emissão calculado em cada abordagem com mesma escala para cada caso (a)  $emi-TRI(T)-Tpdf$ , (b)  $emi-TRI(X,T)-Tpdf$ , (c)  $emi-TRI(T)$ , (d)  $emi-TRI(X,T)$ .

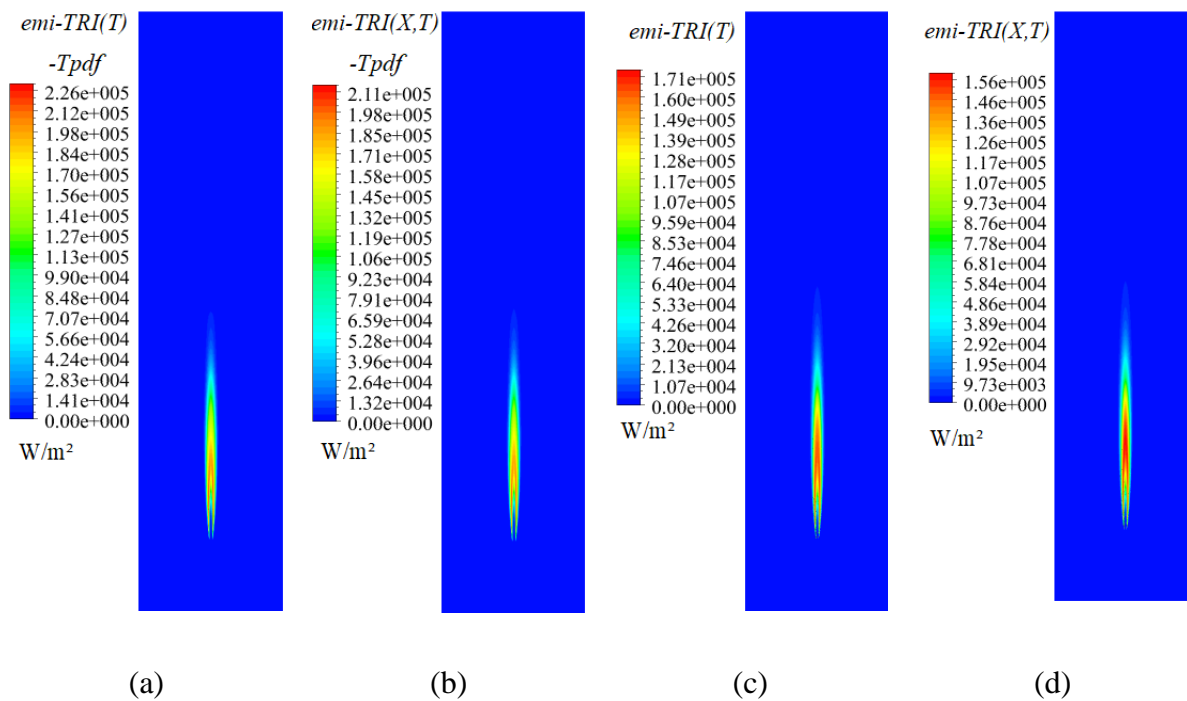


Figura 5.38 – Termo de emissão calculado em cada abordagem com escala original (a)  $emi-TRI(T)-Tpdf$ , (b)  $emi-TRI(X,T)-Tpdf$ , (c)  $emi-TRI(T)$ , (d)  $emi-TRI(X,T)$ .

## CONCLUSÕES

As soluções obtidas neste trabalho consideram a influência da interação turbulência radiação (TRI) em um conjunto de três chamas difusivas tipo jato. O combustível utilizado foi gás natural com diluições diferentes de (CO<sub>2</sub>) e, em dois casos, hidrogênio (H<sub>2</sub>). O impacto de diferentes metodologias foi analisado sobre o fluxo de calor radiativo, a temperatura, a velocidade e as espécies químicas participantes do processo de transferência de calor por radiação térmica. O número de Reynolds de cada chama foi de 4487, 4687 e 7148. O conjunto de resultados permite observar que o fluxo de calor radiativo foi afetado de forma significativa com a modelagem TRI no termo de emissão da RTE, com aumento local entre 30-45%. A temperatura máxima da chama foi reduzida entre 20 e 60 K. As espécies químicas e o campo de velocidades sofreram pouca influência com os efeitos TRI.

A cinética química foi resolvida com o modelo *steady laminar diffusion flamelet* (SLDF). Sua maior vantagem consistiu no pré-processamento, onde a estrutura laminar dos flamelets foi previamente calculada, e então tabulada em um banco de dados. O método da função densidade de probabilidade (PDF – *probability density function*) forneceu uma descrição estatística das flutuações dos escalares do escoamento. Os efeitos de turbulência foram incorporados nos *flamelets* laminares através de PDFs. O modelo de turbulência empregado foi  $k-\epsilon$  padrão com a constante  $C_{\epsilon-1}$  modificada para chamas do tipo jato. O modelo espectral utilizado neste trabalho foi o da soma-ponderada-de-gases cinza (WSGG) e o modelo direcional utilizado foi o das ordenadas discretas.

A variância de temperatura foi obtida de duas formas, na primeira abordagem, o campo de variância foi calculado por uma equação de transporte, conforme originalmente proposto na modelagem para o termo de emissão de Snegirev (2004); na segunda, o campo foi obtido diretamente da abordagem PDF, em que a variância constitui o segundo momento estatístico central da função beta PDF.

As rotinas definidas pelo usuário (UDFs) utilizadas foram programadas em código C, obedecendo a estrutura definida pelo software ANSYS Fluent para a modificação de modelos já incorporados ao código. O modelo WSGG, um código empregado neste trabalho, foi construído em outro estudo do grupo de pesquisa, necessitando apenas pequenas modificações nas chamadas das concentrações das espécies participantes devido ao modelo PDF. Foram construídas neste trabalho as rotinas para implementação da equação de transporte para variância de temperatura, para o cálculo dos fatores TRI e para modificação do termo de

emissão da RTE. A variância de temperatura, constituída pelo segundo momento estatístico central da função beta PDF já estava disponível no Ansys Fluent; a função apenas precisava ser chamada para sua utilização na rotina.

A medição experimental realizada para fluxo de calor radiativo de duas chamas turbulentas não pré-misturadas de gás natural diluído em CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> foi fundamental para as comparações entre os resultados, e poderão ser utilizadas em trabalhos futuros para novas comparações entre as diferentes modelagens dos fenômenos envolvidos.

O tempo computacional se manteve em torno de sete dias, independente da forma de obtenção da variância de temperatura. O processador utilizado possui 8-Core 3.5 GHz e memória 16GHz. Entretanto, a modelagem da radiação térmica só se iniciava com um campo inicial de escoamento, o que tornava o processo de convergência final consideravelmente mais rápido.

O desvio entre os resultados numéricos e experimentais para fluxo de calor radiativo, foi em média de 10% nos casos em que a variância de temperatura foi obtida pela equação de transporte, para ambas as metodologias TRI. Ao negligenciar a influência TRI, os desvios com relação aos dados experimentais nos Casos 1 e 3 (número de Reynolds 4687 e 4487) foram da ordem de 20 %; no Caso 2 (número de Reynolds de 7148), em torno de 16 %. A fração radiante com a inclusão do TRI, apresentou resultados compatíveis com os experimentais, com desvios nos Casos 1 e 2, da ordem de 10 %, enquanto o Caso 3 apresentou o menor de desvio, em torno de 6 %.

No caso estudado em que a variância de temperatura foi obtida da abordagem PDF, houve uma melhoria na previsão do fluxo de calor radiativo, relativo às medições experimentais, especialmente na região do pico de temperaturas. O desvio entre resultados numéricos, considerando os modelos TRI, e os dados experimentais, foram da ordem de 8 %. A redução de temperatura ao empregar a modelagem TRI foi maior que os demais casos, da ordem de 60 K, devido ao aumento do fluxo de calor radiativo. A fração radiante apresentou maiores desvios com relação a solução experimental, entre 13 – 20 %, isso se deve ao resultado superestimar o fluxo de calor radiativo principalmente na base da chama, mas também na pluma.

O conjunto de dados indica que os modelos TRI para o termo de emissão empregados neste trabalho, acoplados aos demais modelos que constituem a simulação de uma chama difusiva, apresentam resultados satisfatórios, com desvios da ordem de 10 % com relação aos resultados experimentais, para obtenção do fluxo de calor radiativo. Ao negligenciar os

efeitos TRI, os resultados indicaram diferença considerável com os dados experimentais, evidenciando a necessidade da inclusão dos modelos TRI para uma previsão confiável do fluxo de calor radiativo.

## 5.5 Propostas para trabalhos futuros

A principal proposta de continuidade desta pesquisa baseia-se em utilizar a integração da função densidade de probabilidade para o cálculo do termo de emissão da RTE, o que permitiria eliminar a modelagem dos fatores de correção e obter diretamente a emissão considerando os efeitos TRI, conforme apresentado na Seção 3.6.3. Além disso, uma possibilidade seria a tabulação do resultado da integração do termo de emissão juntamente com os demais parâmetros armazenados na tabela PDF, o que permitiria uma redução significativa do tempo computacional da simulação.

As duas formas diferentes de contabilizar a variância de temperatura também podem ser exploradas em trabalhos futuros, através da comparação para as outras duas chamas estudadas, permitindo verificar se os resultados se assemelham ao apresentado neste trabalho. A equação de transporte para variância temperatura poderia ser alvo de um estudo que permitiria avaliar de forma aprofundada as diferenças entre os modelos e a empregabilidade da equação de transporte.

A técnica *flamelet* FGM (*flamelet – generated manifold*) para cinética química poderia ser empregada, comparando os resultados com os encontrados com SLDF, avaliando o impacto na temperatura da chama, assim como nas espécies químicas. Uma vez que foi encontrada uma limitação com relação ao modelo SLDF na geração de *flamelets* adiabáticos.

Com relação a medidas experimentais, um estudo e a realização de uma técnica de medição da temperatura da chama forneceria uma nova base de dados para comparação com resultados numéricos, que permitiriam outras análises a respeito dos modelos utilizados. Novas chamas turbulentas também poderiam ser estudadas ampliando o conhecimento a respeito dos desvios entre resultados numéricos e experimentais de diferentes casos.

A modelagem da turbulência poderia ser realizada através da simulação de grandes escalas (LES), o que seria um avanço com relação ao estudo da turbulência, sem a necessidade da modelagem de flutuações, mas há algumas dificuldades devido a demanda computacional. Um dado que poderia ser recuperado da simulação LES é a variância de temperatura, o que contribuiria o com estudo acima mencionado da equação de transporte.

Por fim, cabe ressaltar a dificuldade intrínseca da comparação de dados experimentais de chamas com resultados numéricos. Isso se deve ao fato de que os desvios observados correspondem à combinação das incertezas experimentais e das incertezas introduzidas pelos diversos modelos envolvidos. Neste caso, os resultados estão condicionados às incertezas introduzidas pelas modelagens da cinética química, do escoamento turbulento, do modelo de integração espectral da radiação e dos diversos níveis de modelagem do TRI. Assim, do ponto de vista de avaliação de um dos modelos (por exemplo, de TRI) com base na observação dos desvios em relação aos dados experimentais, não se pode afirmar em caráter definitivo quanto desvio foi introduzido. Como uma proposta de continuidade, recomenda-se o estabelecimento de uma metodologia que consiga estimar as incertezas introduzidas pelos diferentes modelos nos cálculos globais de chama.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Amin M, Foster P.J., **Fluctuations in the transmittance of a turbulent propane jet flame**, European Symposium on Combustion, pp. 530- 535, 1973.

Ansys Fluent 14.0, **Theory Guide**, Ansys Inc, 2011a.

Ansys Fluent 14.0, **UDF Manual**, Ansys Inc, 2011b.

Bergmann, V.; Meier, W.; Wolff, D.; Stricker, W., **Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Jet Diffusion Flame**, Applied Physics B, vol. 66, pp. 489-502, 1998.

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

Bilger, R.W. **The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames**, **Twenty-Second Symposium (International) on Combustion**, The Combustion Institute, pp. 475-488, 1988.

Boussinesq, J., **Essai sur la théorie des eaux courantes**, Imprimerie Nationale, Paris, 1877.

Cao, H.J.; Zhang, H.Q.; Lin, W.Y., **Evaluation of Presumed Probability-Density-Function Models in Non-Premixed Flames using Large Eddy Simulation**, Chinese Physics Letters, vol. 29, pp. 054705, 2012.

Celik, I.B.; Ghia, U.; Roache, P.J; Freitas, C.M.; Coleman, H; Raad, P. **Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications**. Journal of Fluids Engineering. Vol 130, 078001–1 – 078001–4, 2008;

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

Centeno, F.R.; Brittes R.; França F.H.R **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.

Chandrasekhar, S., **Radiative transfer**, Dover Publications, 1960.

Claramunt, K.; Cònsul, R.; Carbonell, D. Pérez-Segarra, C.D. **Analysis of the laminar flamelet concept for non-premixed laminar flames**, Combust and Flame, Vol 145, pp. 845–862, 2006.

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

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

Coelho, F.R., França, F.H.R., **WSGG correlations based on HITEMP2010 for gas mixtures of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> in high total pressure conditions**, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol 127, Part B, pp. 105-114, 2018.

Coelho, P.J. **Approximate solutions of the filtered radiative transfer equation in large eddy simulations of turbulent reactive flows**. Combustion and Flame, Vol 156, pp. 1099-1110, 2009.

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

Coelho, P.J., Costa, M., **Combustão**, Edições Orion, Amadora, Portugal, 2007.

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

Consalvi, J.L, Nmira, F., **Transported scalar PDF modeling of oxygen-enriched turbulent jet diffusion flames: Soot production and radiative heat transfer**, Fuel, vol. 178, pp.37-48, 2016.

Deon, D.L. **Estudo numérico de chamas turbulentas não pré-misturadas através de modelos baseados no conceito de *flamelets***, Dissertação, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.

Dorigon, L.J., Duciak, G., Brittes, R., Cassol, F., Galarça, M., França, F.H.R., **WSGG correlations based on HITEMP 2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> mixtures**, IJHMT, vol. 64, pp. 863-873, 2013.

Emami, M.D.; Fard, A.E. **Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Jet Diffusion Flame Using Artificial Neural Networks**, Applied Mathematical Modelling, vol. 36, pp. 2082–2093, 2012.

Fonseca, R.J.C.; Fraga, G.C.; Brittes, R.S., França, F.H.R., **Application of the WSGG Model to Solve the Radiative Transfer in Gaseous System with Nongray Boundaries**, J. Heat Transfer, vol. 140, pp.1705-1715, 2018.

Foster, P.J., **The relation of time–mean transmission of turbulent flames to optical depth**, Journal of the Institute of Fuel, vol. 42, pp. 179 – 82, 1969.

Fox, R.W., McDonald, A.T., Pritchard, P.J. **Introduction to fluid mechanics**. John Wiley & Sons, Inc, ed. 6, 2004.

Fraga, G.C., Centeno, F.R., Petry, A.P., França, F.H.R.; **Evaluation and optimization-based modification of a model for the mean radiative emission in a turbulent non-reactive flow**, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 114, p. 664-674, 2017.

Fraga, G.C., Miranda, F.C., França, F.H.R., Janicka, J., Coelho, P.J. **Assessment of a Model for Emission Subgrid-Scale Turbulence-Radiation Interaction Applied to a Scaled Sandia Flame D**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, Vol 248, 106986, 2020a.

Fraga, G.C.; Coelho, P.J., Petry, A.P.; França, F.H.R., **Development and testing of a model for turbulence-radiation interaction effects on the radiative emission**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Vol. 245, 106852, 2020b.

Galpin, J., Naudin A., Vervisch L., Angelberger C., Colin O., Domingo P., **Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner**, Combustion and Flame, vol 155, pp. 247-266, 2008.

Germano, M., **Turbulent fluctuations coupled with the radiation field**, AIAA paper, vol. 78, pp. 780 – 840, 1978.

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

Habibi, A., Merci, B., Roekaerts, D., **The importance of Turbulence-Radiation Interaction in RANS simulations of a turbulent non-premixed laboratory-scale bluff-body flame**, 3<sup>rd</sup> 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, pp. 303-320, 2007b.

Hoerlle, C.A., **Estudo numérico de Chamas Laminares Difusivas de CH<sub>4</sub> Diluído com CO<sub>2</sub> Empregando Mecanismos Cinéticos Globais e a Técnica Flamelet-Generated Manifold**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.

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

Houf, W.; Schefer, R., **Predicting radiative heat fluxes an flammability envelopes from unintended releases of hydrogen**, International Journal of Hydrogen Energy, vol.32, pp. 473-480, 2013.

Incropera, F. P.; Dewitt D.P., **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**, LTC, 2008.

Janicka, J.; Kollman, W. **A Two-Variables Formalism for the Treatment of Chemical Reactions in Turbulent H<sub>2</sub>-Air Diffusion Flames**, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 17, n. 1, pp. 421–430, 1979.

Janicka, J.; Peters, N. **Prediction of Turbulent Jet Diffusion Flame Lift-Off Using a PDF Transport Equation**, Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, Vol. 19(1), pp. 367-374, 1982.

Jones, W.P.; Whitelaw, J.H. **Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review**, Combustion and Flame, vol. 48, pp. 1-26, 1982.

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

Kamal, M.M.; Zhou, R.; Balusamy, S.; Hochgreb, S. **Favre- and Reynolds-Averaged Velocity Measurements: Interpreting PIV and LDA Measurements in Combustion**, Proceedings of the Combustion Institute, vol. 35(3), pp. 3803-3811, 2015.

Kim, J.S.; Williams, F.A. **Extinction of Diffusion Flames with Nonunity Lewis Number**, Journal of Engineering Mathematics, vol. 31(2), pp. 101-118, 1997.

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

Krishnamoorthy, G.; Rahman, M.A.; **Assessing the role of turbulence-radiation interactions in hydrogen-enriched oxy-methane flames**, International Journal of Hydrogen Energy, vol.43, p. 5722-5736, 2018.

Launder, B. E.; Spalding, D.B., **The numerical computation of turbulent flows**, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.3, pp. 269-289, 1974.

Launder, B.E.; Spalding, D.B., **Lectures in Mathematical Models of Turbulence**, Academic Press, Londres, 1972.

Law, C.K., **Combustion physics**, Cambridge University Press, 2006.

Li, G., Modest, M.F., **Application of composition PDF methods in the investigation of turbulence-radiation interactions**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, vol. 73, pp. 461 – 472, 2002a.

Li, G., Modest, M.F., **Importance of Turbulence-Radiation Interactions in turbulent reacting flows**, ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibition, Louisina, USA, 2002b.

Liu, F.; Guo, H.; Smallwood, G.J.; Gülder, Ö.L.; Matovic, M.D. **A robust and accurate algorithm of the b-pdf integration and its application to turbulent methane-air diffusion combustion in a gas turbine combustor simulator**, Int. J. Therm. Sci. Vol 41, pp. 763–772, 2002.

Maurente, A., Vielmo, H.A., França, F.H.R., **Comparison of the standard weighted-sum-of-gray-gases with the absorption-line blackbody distribution function for the**

**computation of radiative heat transfer in H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> mixtures**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, vol. 109, pp. 1758 – 1770, 2008.

McBride, B.J.; Gordon, S.; Reno, M.A. **Coefficients for calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species**, NASA Technical Memorandum 4513, 1993.

Meier, W.; Barlow, R.S.; Chen, Y.L.; Chen, J.Y. **Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence-Chemistry Interaction**, Combustion and Flame, vol.123, pp. 326-343, 2000.

Miranda, F.C.; Coelho, P. J.; Mare, F.; Janicka, J. **Study of turbulence-radiation interactions in large-eddy simulation of scaled Sandia flame D**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, Vol 228, pp.47-56, 2019.

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

Modest, M.F. **Radiative Heat Transfer**, MC Graw-Hill, Nova York, 1993.

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

Morse, A.P. **Axisymmetric Turbulent Shear Flows with and without Swirl**, Tese de Doutorado, London University, Londres 1980.

Mossi, A.C.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R.; Howell, J.R. **Inverse design involving combined radiative and turbulent convective heat transfer**, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 51, p. 3217-3226, 2008.

Orbegoso, E.M., Figueira da Silva, L.F., **Comparative study of thermal radiation properties models in turbulent non-premixed sooting combustion**, Numerical Heat Transfer, vol 69, p.166-179, 2016.

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

Peters, N., **Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion**, Progress in Energy and Combustion Science, vol 10, p. 319-339, 1984.

Peters, N., **Laminar flamelet concepts in turbulent combustion** 21st Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1231–1250, 1986.

Poisont, T., Veynante, D., **Theoretical and Numerical Combustion**, RT Edwards Incorporated, 2005.

Pope, S.B. **An Explanation of the Turbulent Round-Jet/ Plane-Jet Anomaly**, AIAA Journal, vol.16, n 3, pp-279-281, 1978.

Pope, S.B., **Small scales, Many Species and the Challenges of Turbulent Combustion**, Proceedings of the Combustion Institute, vol. 34, pp. 1-31, 2013.

Prandtl L. **Über die ausgebildete Turbulenz**, ZAMM, vol. 5, pp. 136-139, 1925.

Quezada, L.A.L.; **Estudo experimental de estabilidade e emissão de radiação térmica em chamas não pré-misturadas de gás natural diluídas com dióxido de carbono**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2018.

Quezada, L.A.L.; Pagot, P.R.; França, F.H.R.; Pereira, F.M., 2020. “Experimental study of jet fire radiation and a new approach for optimizing the weighted multi-point source model by inverse methods” Fire Safety Journal, Vol 113. <https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2020.102972>

Raithby, G. D., Chui. E. H., **A Finite-Volume Method for Predicting a Radiant Heat Transfer in Enclosures with Participating Media**, J. Heat Transfer, vol. 112, pp. 415-423, 1990.



Ren, T.; Modest, M.F.; Haworth.; **Simulating turbulence-radiation interactions using a presumed probability density function method**, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 121, p. 911-923, 2018.

Rodrigues, L.G.P., **Aplicação do modelo da soma ponderada de gases cinza na simulação da transferência radiativa em chamas difusivas laminares de metano diluído com CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.

Roger, M. Silva, C. B., Coelho, P. J. **Relevance of the subgrid-scales for large eddy simulations of turbulence–radiation interactions in a turbulent plane jet**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, vol 112, pp. 1250–1256, 2011.

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

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

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

Smagorinsky, J., **General Circulation Experiments with Primitive Equations**, Mon. Weather Rev, vol. 91, pp. 99-164, 1963.

Smith, G.P.; Golden, D.M.; Frenklach, M.; Moriarty, N.W.; Eiteneer, B.; Goldenberg, M.; Bowman, C.T.; Hanson, R.K.; Song, S.; Gardiner Jr., W.C. Lissianski, V.V.; Qin, Z.; **GRI-Mechanism 3.0**, 1999. Disponível em: <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>

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

Snegirev, A.; Markus, E.; Kuznetsov, E.; Harris, J.; Wu, T., **On soot and radiation modeling in buoyant turbulent diffusion flames**, Heat Mass Transfer, vol. 54, pp 2275–2293, 2017.

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

Sukirt, T.; Gaikwad, P.; Sreedhara, S., **Reynolds-Averaged Navier–Stokes Simulations of Turbulence-Radiation Interaction in a Turbulent Diffusion Jet Flame**, Journal of Thermophysics And Heat Transfer, vol 33, pp.875-880, 2019.

Tennekes, H.; Lumley, J.L., **A First Course in Turbulence**, MIT Press, 1972.

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

Wang, A.; Modest, M.F. **Importance of Combined Lorentz Doppler Broadening in High-Temperature Radiative Heat Transfer Applications**, Journal of heat transfer, Vol 126, pp. 858-861, 2004.

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

Wu Y, Haworth DC, Modest MF, Cuenot B. **Direct numerical simulation of turbulence/radiation interaction in premixed combustion systems**. Proc Combust Inst 30:639–46, 2005.

Yang, X.; He, Z.; Dong, S.; Tan H. **Prediction of turbulence radiation interactions of CH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>/air turbulent flames at atmospheric and elevated pressures**. International Journal of Hydrogen Energy, Vol 43, pp. 15537-15550, 2018.

Yang, X.; He, Z.; Niu, Q.; Dong, S.; Tan H. **Numerical analysis of turbulence radiation interaction effect on radiative heat transfer in a swirling oxyfuel furnace.** International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol 141, pp. 1227-1237, 2019.

Yi, Z.; Su Z.; Yang Q.; Li G.; Zhang W.; **Study of the non-gray-TRI effect on the turbulent methane combustion under O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> atmosphere,** Applied Thermal Engineering, vol. 130, p. 449-457, 2018.

Ziani, L.; Chaker, A.; Chetehouna, K.; Malek A.; Mahmah, B., **Numerical Simulations of Non-Premixed Turbulent Combustion of CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> Mixtures Using the PDF Approach,** International Journal of Hydrogen Energy, vol.38, pp. 8597-8603, 2013.