

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

IMPLEMENTAÇÃO DOS MÉTODOS WSGG E LBL NO CÓDIGO DE ANÁLISE DE CHAMA
UNIDIMENSIONAL CHEM1D

por

Fredherico Nicolaus Rodrigues da Silva

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, novembro de 2016



Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Escola de Engenharia
Departamento de Engenharia Mecânica

IMPLEMENTAÇÃO DOS MÉTODOS WSGG E LBL NO CÓDIGO DE ANÁLISE DE CHAMA
UNIDIMENSIONAL CHEM1D

por

Fredherico Nicolaus Rodrigues da Silva

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
ENGENHEIRO MECÂNICO
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Alcy Rodolfo dos Santos Carrara
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Energia e Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Fernando Marcelo Pereira

Co-Orientador: Cristian Alex Hoerlle

Comissão de Avaliação:

Prof. Francis Henrique Ramos França

Prof. Sergio Frey

Prof. Thamy Cristina Hayashi

Porto Alegre, 18 de novembro de 2016.

AGRADECIMENTOS

À minha família, por todo o apoio que me deram durante toda minha vida e em especial aos anos desse curso.

Ao Professor, Fernando Pereira, pela oportunidade, confiança e por toda a orientação ao longo do projeto.

Aos colegas do laboratório Aline Ziemniczak, Leonardo Zimmer e Lisandro Madders, que me auxiliaram sempre que preciso durante esse processo.

Ao Cristian Hoerlle, pela disposição, paciência e dedicação durante a sua co-orientação, sem a qual esse trabalho não seria possível.

À Carolina, cujo apoio e confiança que me foram tão fundamentais durante todos esses anos.

Silva, F. N. R. **Implementação dos Métodos WSGG e LBL no Código De Análise de Chama Unidimensional Chem1D**. 2016. 25 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.

RESUMO

A simulação da radiação em chamas é um problema complexo devido às dependências espectrais e espaciais das intensidades radiantes. Além do mais, o forte acoplamento entre cinética química, temperatura e radiação torna a simulação detalhada de chamas computacionalmente demandante, desta forma, é interessante a utilização de métodos acurados para a solução do problema radiativo com reduzido tempo computacional. O modelo da Somas Ponderadas dos Gases Cinzas (WSGG) e o método de integração *benchmark* Linha-por-Linha (LBL) para a modelagem da radiação térmica foram implementados no código Chem1D (o qual já conta com o modelo de Aproximação para Meios Opticamente Finos - OTA). Após, chamas laminares não pré-misturadas contra-corrente de metano diluído com nitrogênio foram simuladas para diferentes taxas de deformação e concentrações de diluente. Estruturas de chama foram obtidas empregando as três abordagens para solução de radiação térmica utilizando o código de análise numérica unidimensional Chem1D. Os resultados foram comparados com dados experimentais e numéricos disponíveis na literatura. Uma boa concordância entre as soluções empregando os métodos de radiação térmica foi encontrada para os perfis de temperatura, velocidade e espécies químicas. Limites de extinção por diluição do combustível foram avaliadas para taxas de deformação de 10 s^{-1} a 60 s^{-1} empregando o WSGG e o OTA. Em relação à literatura, resultados satisfatórios foram encontrados. O tempo computacional para o OTA e o WSGG é consideravelmente menor que o LBL.

PALAVRAS-CHAVE: chamas contra-corrente, diluição com nitrogênio, modelagem da radiação térmica, WSGG. LBL.

Silva, F. N. R. **Implementation of the WSGG and LBL Methods on the One-Dimensional Flame Analysis Code Chem1D**. 2016. 25 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.

ABSTRACT

The simulation of flame radiation is a complex problem due to the spectral and spatial dependencies of the radiative intensities. Besides that, the strong linkage between the chemical kinetics, temperature and radiation makes the detailed simulation of flames computationally demanding, therefore, it's desirable the employment of accurate methods for solving the radiation problem with reduced computational time. The Weighted Sums of Gray Gases (WSGG) model and the Line-by-Line (LBL) benchmark method for the thermal radiation were implemented in the Chem1D code (which already counts with the Optically Thin Approximation – OTA). Afterwards, non-premixed laminar flames of methane diluted with nitrogen were simulated for different strain rates and diluent concentrations. Flame structures were obtained using the methods for the three approaches for thermal radiation employing the one-dimensional numerical analysis code Chem1D. Results were compared with experimental and numerical data available in the literature. A good agreement between the solutions employing the thermal radiation methods was found for the temperature, velocity and chemical species profiles. Extinction limits by fuel dilution were evaluated at strain rates of 10 s⁻¹ to 60 s⁻¹ using WSGG and OTA. Regarding to the literature, satisfactory results were found. The computational time for the OTA and the WSGG is considerably lower than the LBL.

KEYWORDS: counterflow flames, dilution with nitrogen, thermal radiation modeling, WSGG, LBL.

ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Motivação e justificativa.....	1
1.2.	Revisão bibliográfica.....	1
2.	OBJETIVO.....	2
3.	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA.....	3
4.	METODOLOGIA NUMÉRICA.....	3
4.1.	Formulação matemática do escoamento reativo.....	4
4.1.1.	Equações da conservação e equações constitutivas.....	4
4.1.2.	Modelagem da cinética química.....	6
4.2.	Modelagem da radiação térmica.....	6
4.2.1.	Aproximação para meios opticamente finos.....	6
4.2.2.	Método de Integração Espectral: Linha-por-Linha.....	7
4.2.3.	Modelagem Espectral: Soma Ponderada de Gases Cinzas.....	7
4.2.4	Equação de Transferência Radiante (ETR).....	8
4.3.	Implementação dos métodos de solução de radiação térmica.....	9
5.	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	10
5.1	Avaliação da estrutura da chama.....	11
5.2	Avaliação dos limites de extinção por diluição.....	14
6.	CONCLUSÃO.....	15
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	16

1. INTRODUÇÃO

1.1 Motivação e justificativa

A combustão está presente nos mais variados setores da indústria e em diversas aplicações humanas. Uma compreensão de seus mecanismos físicos e químicos é de importância fundamental para o avanço científico e tecnológico. Essa compreensão deu-se ao longo da história primeiramente pela análise experimental dos processos envolvidos e mais recentemente por meio da análise computacional, a partir do desenvolvimento recente de novas tecnologias, softwares e linguagens de programação. Grande parte da pesquisa nesse campo atualmente se dá por meio da análise numérica. Ela permite o estudo de diferentes fenômenos físicos e químicos relacionados ao processo de combustão, como a cinética química, a mecânica de fluidos e a transferência de calor.

Dentre esses fenômenos, o estudo da radiação térmica em chamas mostra-se um desafio de alta complexidade devido sua dependência espectral e espacial. É importante o entendimento da influência da radiação térmica em chamas para a otimização de equipamentos e processos de combustão. Numericamente, o problema está na determinação do fluxo e das frações radiantes de uma chama, que exigem a modelagem da cinética química e do campo de temperatura para a obtenção das concentrações dos gases participantes. Nesse quesito, a fim de se determinar numericamente o fluxo e as frações radiantes de uma chama, é necessária uma satisfatória modelagem da cinética química e da temperatura para a obtenção das concentrações dos gases participantes. Há na literatura diversas opções de modelos com diferentes graus de complexidade para a solução espectral e espacial do problema radiativo. Para a solução espectral é possível citar alguns modelos como a Aproximação Ópticamente Fina (*Optically Thin Approximation - OTA*) [Peters e Rogg, 1993], a Soma Ponderada de Gases Cinzas WSGG (*Weighted Sum of Grey Gases - WSGG*) [Hottel e Sarofim, 1967], a Soma Ponderada de Gases Cinzas para Linhas Espectrais (*Spectral Line-Based Weighted Sum of Gray Gases - SLW*) [Denison e Webb, 1995], e a Função de Distribuição para Linhas de Absorção de Corpo Negro (*Absorption-Line Blackbody Distribution Function - ALBDF*) [Denison e Webb, 1993]. Um método de obtenção da solução exata para o problema radiativo é a análise LBL (*Line-By-Line*) [Taine, 1983].

Embora a simulação numérica de chamas tenha sido empregada por décadas e a capacidade dos computadores tenha aumentado, a obtenção de soluções satisfatórias com baixo tempo computacional ainda é difícil para muitos casos. O acoplamento de cinética química detalhada com modelos de fuligem e/ou radiação térmica em variadas escalas tornam a simulação numérica computacionalmente exigente. Uma alternativa é a simulação de chamas unidimensionais, pois reduz consideravelmente a carga computacional ao mesmo tempo que proporciona resultados de grande precisão para a estrutura e os fenômenos físicos e químicos de uma chama.

Um dos métodos para se influenciar os diferentes parâmetros de combustão é a diluição dos gases participantes por um gás inerte, como o N_2 . Uma maneira viável de se avaliar o efeito da radiação em chamas é estudar as condições de uma chama próxima ao limite de extinção. Nessa condição, a perda de calor por radiação representa um papel significativo na manutenção ou extinção da chama. Nesse trabalho, será realizada uma comparação entre modelos de radiação e a solução LBL para condições próximas à extinção, para avaliar em detalhe a precisão de cada modelo.

1.2. Revisão bibliográfica

A extinção de chamas e seus limites de flamabilidade foram estudados por meio do modelo OTA para chamas pré-misturadas de metano por Ju *et al.*, 1997, onde o modelo OTA mostrou desvios consideráveis em relação aos resultados de referência. Liu *et al.*, 2004 estudou o efeito do termo fonte de radiação para chamas laminares bidimensionais de metano através da combinação do método das ordenadas discretas com modelos espectrais

detalhados e simplificados. Encontrou-se que o modelo OTA superestima as perdas por radiação e subestima a fração volumétrica de fuligem quando comparado com soluções empregando modelos espectrais mais detalhados. Chamas livres pré-misturadas foram estudadas experimentalmente e numericamente considerando um modelo de radiação para meios opticamente espessos e comparados ao modelo OTA em chamas esféricas próximas à extinção por Qiao *et al.*, 2010, onde observou-se que o modelo OTA subestima a velocidade de chama. O efeito da radiação térmica foi estudado numericamente por Mossi, 2011, para chamas laminares de metano comparando diferentes modelos para a solução espectral da radiação. Mostrou-se que para o limite optimante fino as soluções empregando modelos de gases cinza em relação aos modelos espectrais detalhados diferem na ordem de 5%.

Por outro lado, a aplicabilidade do modelo WSGG tem sido estudada em distintas soluções benchmark e em simulações de chamas. A fim de avaliar a validade entre diferentes métodos para modelagem de radiação, Cassol, 2013, comparou diferentes modelos para a solução do problema espectral em chamas contendo CO₂, H₂O e fuligem, com a solução benchmark LBL. O modelo WSGG apresentou desempenho satisfatório frente às alternativas, mesmo para meios não homogêneos. Ziemniczak *et al.*, 2013, estudou o número de gases necessários para uma solução satisfatória do modelo WSGG frente ao LBL. Ziemniczak, 2014, também trabalhou na geração de novas correlações para as constantes de absorção do modelo WSGG. Centeno *et al.*, 2013, demonstrou que há importante influência da radiação para a solução do perfil de temperaturas em chamas bidimensionais de CH₄ não pré-misturadas. Centeno *et al.*, 2014, comparou diferentes correlações para o modelo WSGG e demonstrou que os resultados podem ser sensivelmente afetados de acordo com as correlações utilizadas. Maurense *et al.*, 2008, realizou comparações entre o modelo WSGG e o ALBDF em simulação de combustão de CH₄ e óleo combustível, onde mostrou-se que o WSGG superestimou o efeito da radiação, resultado esse atribuído ao banco de dados utilizados para os gases e a limitação do uso de meio participante homogêneo.

Além do mais, sabe-se que a diluição afeta as características da chama. Bundy *et al.*, 2003, realizou experimentos sobre o efeito da diluição de chamas não pré-misturadas contra-corrente de metano diluído com N₂ e CO₂, encontrando níveis de concentração críticos para a extinção para diferentes taxas de deformação. Hammins *et al.*, 2007, estudou experimentalmente chamas contra-corrente de metano diluídas com N₂ em microgravidade e obteve resultados para a extinção sob diferentes taxas de deformação. Oh *et al.*, 2008 estudou a extinção de chamas contra-corrente de metano diluídas com N₂ experimentalmente e numericamente para gravidade normal e microgravidade, e apresentou a influência do empuxo sobre a chama. Wang *et al.*, 2013, estudou os efeitos químicos e físicos da diluição por CO₂ e H₂O de chamas contra-corrente de CH₄ utilizando o modelo OTA para a radiação térmica. O efeito de diluição de CO₂ sobre a formação de No_x em chamas contra-corrente de CH₄ também foi estudado numericamente por Lee *et al.*, 2001, onde resultados foram comparados para a situação adiabática e para perdas de calor modeladas pelo OTA. Chan *et al.*, 2015, estudou experimental e numericamente o efeito da diluição de CO₂ na velocidade de chamas laminares pré-misturadas de metano, encontrando uma diminuição na velocidade e temperatura para maiores diluições. Embora vários efeitos da diluição dos reagentes sobre as chamas são reportados nas literaturas (efeitos químicos, termodinâmicos e de transporte), a análise da diluição de chamas permanece uma área a ser explorada sob o ponto de vista da radiação térmica.

2. OBJETIVO

Este trabalho tem como objetivo avaliar os modelos simplificados de radiação térmica, OTA e WSGG, em comparação com o método detalhado, LBL, na simulação de chamas unidimensionais não pré-misturadas contra-corrente de metano e ar. Para alcançar o objetivo as seguintes etapas serão seguidas:

- 1 - Implementar o modelo WSGG e o método de integração LBL no código de simulações unidimensionais de chamas Chem1D [Somers, 1994].

2 - Comparar a estrutura da chama para soluções empregando os diferentes modelos de radiação térmica.

3 - Avaliar os limites de extinção por diluição do metano com nitrogênio.

3. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Para esse trabalho, modelou-se numericamente chamas laminares não pré-misturadas do tipo contra-corrente. Chamas de metano são estudadas para diferentes diluições com gás inerte N_2 e diferentes taxas de deformação. Os reagentes encontram-se inicialmente a pressão atmosférica e temperatura de 298 K. O oxidante utilizado foi ar atmosférico com 79% de N_2 e 21% de O_2 em base molar. Limites de extinção são avaliados para taxas de deformação entre 10 s^{-1} e 60 s^{-1} , resultando em chamas com diferentes tempos de residência. A taxa de deformação pode ser compreendida como o inverso do tempo de residência. A Figura 3.1 apresenta a configuração da chama contra-corrente. A injeção de combustível se dá na posição -L enquanto a injeção do oxidante ocorre na posição +L. O plano de estagnação é localizado na posição $x=0$.

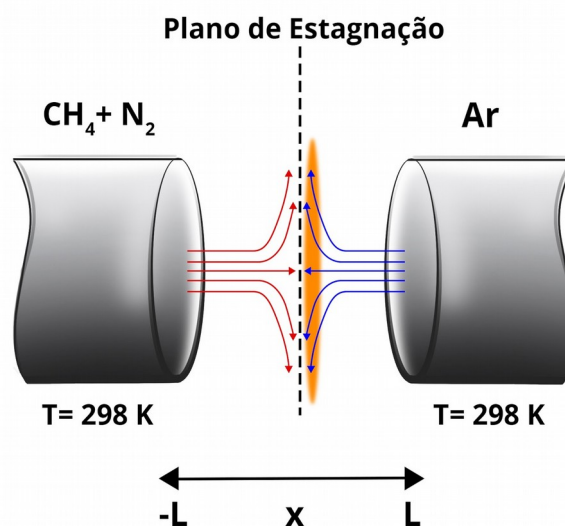


Figura 3.1. Configuração da chama contra-corrente.

4. METODOLOGIA NUMÉRICA

Utilizou-se nesse trabalho o código Chem1D [Somers, 1994] para a solução do sistema de equações que descrevem o escoamento reativo unidimensional em regime permanente. O código emprega um método de Newton modificado puramente implícito para resolver a conservação de massa total, de massa das espécies químicas, entalpia específica da mistura e a taxa de estiramento de chama. O escoamento é unidimensional e a aproximação para baixo Mach é assumida. A formação de fuligem pode ser negligenciada.

O Chem1D utiliza o método dos volumes finitos. As equações de conservação são discretizadas e resolvidas para cada volume do domínio computacional, garantindo assim, a conservação dos escalares. Os termos advectivos das equações são discretizados empregando o esquema exponencial, enquanto o esquema de diferenças centrais é empregado para a discretização dos termos difusivos. Considerou-se o domínio computacional de 1,5 cm de comprimento formado por 600 volumes, visto que o teste de malha não acusou a necessidade de maior refino. O código ainda emprega um algoritmo de malha adaptativa baseado em gradientes de temperatura e espécies químicas.

4.1. Formulação matemática do escoamento reativo

São apresentadas aqui as equações de conservação resolvidas pelo Chem1D, a modelagem da cinética química e da radiação térmica.

4.1.1. Equações da conservação e equações constitutivas

A conservação de massa total é definida como

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = -\rho K, \quad (4.1)$$

onde ρ é a massa específica do fluido e u a velocidade do escoamento. O escalar K representa a taxa de estiramento, a qual contabiliza os desvios de uma chama real comparados à situação unidimensional. A equação da conservação de quantidade de movimento linear não precisa ser solucionada, visto que a velocidade axial do escoamento pode ser obtida diretamente da equação da continuidade.

A equação de conservação de massa das espécies químicas é definida como

$$\frac{\partial(\rho u Y_i)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(\rho D_i^M \frac{\partial Y_i}{\partial x}) + \dot{\omega}_i - \rho K Y_i, \quad i=1,2,\dots,N_s-1, \quad (4.2)$$

onde o termo à esquerda da igualdade representa o transporte advectivo da espécie i , e os termos à direita representam, respectivamente, o fluxo difusivo, a taxa de produção e consumo da espécie química i ($\dot{\omega}_i$) e a contabilização dos efeitos multidimensionais. Considerando que a combustão ocorre a pressão atmosférica sem a presença de forças de campo, as difusões causadas pelos gradientes de pressão e de forças de campo são negligenciadas. Além do mais, a difusão de massa por gradiente de temperatura (efeito Soret) também é negligenciada, por ser importante somente para espécies de baixo peso molecular. Desta forma, o fluxo difusivo mássico se resume ao gradiente de concentração, e é descrito pela Lei de Fick para a difusão binária em misturas multicomponentes [Law, 2010]. A equação (4.2) é resolvida para N_s-1 espécies químicas, onde N_s representa o número total de espécies químicas. Considerando-se o N_2 como espécie inerte e mais abundante, sua fração mássica pode ser obtida a partir de

$$Y_{N_2} = 1 - \sum_{i=1}^{N_s-1} Y_i. \quad (4.3)$$

A conservação de massa é garantida aplicando uma velocidade de difusão de correção para a espécie abundante (N_2) [Law, 2010].

A equação da conservação da energia é escrita em termos da entalpia específica da mistura, h ,

$$\frac{\partial(\rho u h)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x} + \sum_{i=1}^N \rho D_i^M h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) - \rho K h + \dot{q}_R, \quad (4.4)$$

onde, $c_p = \sum_{i=1}^{N_s} c_{p,i} Y_i$ é o calor específico a pressão constante da mistura, $c_{p,i}$ é a capacidade térmica da espécie i , h_i representa a entalpia da espécie i , λ é a condutividade térmica da mistura, T é a temperatura e \dot{q}_R representa o termo fonte de radiação. Na Equação 4.6, o termo à esquerda representa o transporte advectivo, e os termos à direita representam, respectivamente, o transporte difusivo da entalpia (por gradiente de temperatura

e por difusão de massa, sendo o efeito Dufour desconsiderado em processos de combustão), o efeito do estiramento da chama sobre a entalpia e o termo fonte radiante \dot{q}_R . A condutividade térmica para a mistura de gases pode ser obtida a partir das condutividades térmicas e frações molares individuais de cada espécie pela correlação semi-empírica proposta por Mathur *et al.*, 1967. A entalpia específica da mistura é obtida a partir das equações

$$h = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i h_i, \quad (4.5)$$

$$h_i = h_{i,f}^0 + \int_{T_{ref}}^T c_{p,i}(T) dx, \quad (4.6)$$

sendo $h_{i,f}^0$ a entalpia específica de formação da espécie i a uma temperatura T_{ref} .

A equação da conservação para a taxa de estiramento é dada por

$$\frac{\partial \rho u K}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial K}{\partial x} \right) - \rho K^2 + \rho_{ox} a^2, \quad (4.7)$$

sendo μ a viscosidade dinâmica da mistura (obtida a partir da aproximação de Wilke, 1950, e ρ_{ox} a densidade do oxidante. O termo a representa a taxa de deformação, dada por

$$a = -\frac{\partial u}{\partial x}. \quad (4.8)$$

A equação de transporte de K é derivada a partir da equação da conservação da quantidade de movimento radial [Oijen e de Goye, 2000], e visa contabilizar os efeitos multidimensionais no sistema de equações unidimensionais de chama.

O sistema de equações é fechado considerando a equação de estado dos gases ideais. Devido a aproximação para baixo número de Mach, a densidade da mistura é assumida como sendo função somente da temperatura, e pode ser descrita pela equação

$$\rho \simeq \frac{p_0 MW}{R_u T}, \quad (4.9)$$

onde p_0 , MW e R_u representam, respectivamente, a pressão atmosférica, a massa molar da mistura e a constante dos gases universal.

Assim, as condições de contorno para uma chama laminar contra-corrente não pré-misturada são:

$$u_{x=0} = 0,$$

$$Y_{i,x \rightarrow -L} = Y_{i,fu},$$

$$Y_{i,x \rightarrow +L} = Y_{i,ox},$$

$$h_{x \rightarrow -L} = h_{fu},$$

$$h_{x \rightarrow +L} = h_{ox},$$

$$K_{x \rightarrow -L} = a \sqrt{\rho_{ox} / \rho_{fu}},$$

$$K_{x \rightarrow +L} = a,$$

onde o subíndice fu refere-se ao lado do combustível e ox ao oxidante. O combustível localiza-se à esquerda, na posição $-L$ e o oxidante à direita, em $+L$.

4.1.2. Modelagem da cinética química

Partindo-se de um sistema com N_s espécies que reagem em N_r reações, uma reação química elementar é de uma espécie química é descrita como



sendo $v'_{i,r}$ o coeficiente estequiométrico do lado dos reagentes e $v''_{i,r}$ o coeficiente estequiométrico do lado dos produtos para a espécie i e na reação r . Desta forma, a taxa líquida de produção ou consumo $\dot{\omega}$ é descrita como

$$\dot{\omega}_i = \sum_{r=1}^{N_r} (v''_{i,r} - v'_{i,r}) (k_{f,r} \prod_{i=1}^{N_s} [X_i]^{v'_{i,r}} - k_{b,r} \prod_{i=1}^{N_s} [X_i]^{v''_{i,r}}), \quad (4.11)$$

onde $k_{f,r}$ representa o coeficiente da taxa de reação direta e $k_{b,r}$ o coeficiente da taxa de reação inversa, fornecidos pela equação de Arrhenius

$$k = A T^b e^{\frac{-E_a}{R_u T}}, \quad (4.12)$$

onde A representa o fator pré-exponencial, b é o expoente da temperatura, E_a representa a energia de ativação e R_u é a constante universal dos gases. O coeficiente da taxa de reação inversa é obtido através de cálculos de equilíbrio químico.

A cinética química é representada pelo mecanismo detalhado GRI-Mech 3.0 [Smith *et al.*, disponível em me.berkeley.edu/gri_mech, acessado em 10/11/2016]. Este mecanismo é formado por 53 espécies químicas e 325 reações elementares, e foi originalmente desenvolvido para a combustão de gás-natural.

4.2. Modelagem da radiação térmica

A modelagem da radiação térmica visa obter o termo fonte da equação de conservação da energia (Eq. 4.4). A geração volumétrica de radiação térmica é definida como o negativo do divergente do fluxo de calor, e pode ser obtida a partir de modelos com diferentes graus de detalhamento e complexidade. A aproximação para meios opticamente finos e a solução da ETR são brevemente descritas nesta seção.

4.2.1. Aproximação para meios opticamente finos

O mais simples dos modelos utilizados para a modelagem da radiação térmica é a aproximação para meios opticamente finos (*Optically Thin Approximation – OTA*). O modelo OTA considera gases cinzas e coeficientes de absorção de Planck. Esse modelo assume que absorção e espalhamento são fenômenos desprezíveis, assim, o termo fonte radiante pode ser obtido pela equação

$$\dot{q}_R = -4\sigma k_p (T^4 - T_\infty^4), \quad (4.13)$$

onde T representa a temperatura local e T_∞ a temperatura ambiente. O coeficiente de absorção médio de Planck para o meio cinza, k_p , pode ser obtido por

$$k_p = p_{CO_2} k_{p,CO_2} + p_{H_2O} k_{p,H_2O} + p_{CH_4} k_{p,CH_4} + p_{CO} k_{p,CO}, \quad (4.14)$$

sendo p_i a pressão parcial da espécie i e $k_{p,i}$ o coeficiente de absorção da espécie i . Os coeficientes de absorção para cada espécie podem ser encontrados em [Peter and Roggs, 1993]. Devido a sua simplicidade, este modelo apresenta baixa exigência computacional.

4.2.2. Método de Integração Espectral: Linha-por-Linha

O método LBL determina o coeficiente de absorção das espécies participantes para todo o espectro. Ele representa a solução exata da dependência espectral do problema radiativo. Esse modelo utiliza um banco de dados de propriedades espectrais para calcular os coeficientes de absorção dos gases participantes. O método LBL se baseia no banco de dados HITEMP 2010 [Rothman, 2010] para determinar as propriedades dos gases participantes. Para o LBL, o coeficiente de absorção espectral da mistura k_η é dado pela equação

$$k_\eta = p_a k_{p\eta,a}, \quad (4.15)$$

onde p_a é a pressão parcial de todas as espécies participantes e $k_{p\eta,a}$ o coeficiente de absorção espectral por pressão da mistura o qual pode ser escrito como

$$k_{p\eta,a} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{gp}} p_i k_{p\eta,i}}{\sum_{i=1}^{N_{gp}} p_i}, \quad (4.16)$$

onde N_{gp} é o número de gases participantes p_i e $k_{p\eta,i}$ representam respectivamente a pressão parcial e o coeficiente de absorção espectral dependente da pressão do gás participante. $k_{p\eta,i}$ é determinado a partir do banco de dados espectral conforme descrito por Dorigon *et al.*, 2013.

Considerando um meio participante formado por uma mistura de H₂O e CO₂, onde $p_a = p_{CO_2} + p_{H_2O}$, o coeficiente de absorção da mistura para quatro gases participantes é dado por

$$k_\eta = p_{H_2O} k_{p\eta,H_2O} + p_{CO_2} k_{p\eta,CO_2}. \quad (4.17)$$

Neste trabalho foi realizada uma modificação do modelo OTA para considerar apenas dois gases participantes, o H₂O e o CO₂.

4.2.3. Modelagem Espectral: Soma Ponderada de Gases Cinzas

O WSGG proposto por Hottel e Sarofin, 1967, é um modelo mais simplificado para a solução da dependência espectral do problema radiante. Este modelo substitui a integração da intensidade radiante em todas as linhas espectrais dos gases participantes pelo somatório de um número finito de gases cinzas com coeficientes de absorção constantes. Desta forma, o modelo WSGG assume que a intensidade radiativa de todo o espectro é representada por um somatório das intensidades parciais de cada um dos gases cinzas

$$I_\eta = \sum_{i=1}^{N_{gc}} I_i, \quad (4.18)$$

onde I_i é a intensidade de radiação de cada gás cinza i e N_{gc} o número de gases cinzas.

De forma similar, a intensidade radiante de um corpo negro passa a ser dada por

$$I_{b,\eta} \approx \sum_{i=1}^{N_{gc}} a_i(s) I_b, \quad (4.19)$$

sendo I_b a intensidade radiante total de um corpo negro, e $a_i(s)$ coeficientes dependentes da temperatura que representam a fração da emissão do corpo para o faixa do espectro correspondente a cada gás cinza. O termo $a_i(s)$ é uma expressão polinomial definida por

$$a_i(s) = \sum_{j=0}^J b_{i,j} T(s)^j, \quad (4.20)$$

onde $b_{i,j}$ são os coeficientes polinomiais de ordem j para o gás cinza i . Os coeficientes de absorção espectrais de cada gas cinza, $k_{p,i}$, e os coeficientes de dependência de temperatura a_j , são constantes ajustadas que visam recuperar a emitância total do espectro. A conservação da energia radiante é garantida com a fração de emissão de um corpo negro associada a janela transparente, a qual é definida como $a_0(s) = 1 - \sum_{j=0}^J a_i(s)$. Neste trabalho, considerou-se o espectro como sendo representado por quatro gases cinzas mais a janela transparente, e os coeficientes do modelo definidos por Ziemniczak, 2014, para uma mistura de gases com razão entre as pressões parciais p_{H_2O} e p_{CO_2} igual a 2, condizente com a estequiometria da combustão de metano em ar.

4.2.4 Equação de Transferência Radiante (ETR)

A equação de transferência radiante descreve as intensidades radiantes em termos da emissão, absorção e espalhamento em um meio participante. Para um meio unidimensional em que o espalhamento é desprezível, a ETR para um determinado número de onda η ao longo do caminho s em todas as direções do ângulo sólido de 4π pode ser determinada por

$$\frac{dI_\eta}{ds} = k_\eta(s) I_{b,\eta}(s) - k_\eta(s) I_\eta(s, \omega), \quad (4.21)$$

onde I_η é a intensidade radiativa, k_η é o coeficiente de absorção e ω o ângulo sólido.

A ETR solucionada ao longo de todo o espectro radiante e em todas as direções espaciais. A solução direcional pode ser obtido pelo método das Ordenadas Discretas (*Discrete Ordinate Method* - DOM), o qual representa a dependência direcional da intensidade de radiação de forma discreta, para um ângulo sólido de 4π . Pelo DOM as intensidades espectrais da radiação são solucionadas para cada hemisfério do ângulo sólido, resultando em equações para as intensidades radiantes no sentido positivo I_η^+ e negativo I_η^- . Nesse trabalho, a dependência direcional da ETR é solucionada considerando 15 direções (em cada hemisfério do ângulo sólido) para o método WSGG e 15 direções para o LBL.

Para a dependência espectral solucionada pelo LBL e a dependência direcional solucionada pelo DOM, a ETR é escrita como:

$$+\mu_l \frac{dI_{\eta,l}^+(s)}{ds} = k_\eta I_{b,\eta} - k_\eta(s) I_{\eta,l}^+(s), \quad (4.22)$$

$$-\mu_l \frac{dI_{\eta,l}^-(s)}{ds} = k_\eta I_{b,\eta} - k_\eta(s) I_{\eta,l}^-(s), \quad (4.23)$$

onde μ_l representa o cosseno na direção l .

As condições de contorno para as equações (4.22) e (4.23) são definidas como sendo a intensidade de radiação de um corpo negro a temperatura local. Para o domínio computacional representado na Figura (3.1), as condições de contorno são $I_{\eta,l}^+(s) = I_{b,\eta}(s)$ em $s = -L$ e $I_{\eta,l}^-(s) = I_{b,\eta}(s)$ em $s = +L$.

A partir da solução de I_{η}^+ e I_{η}^- empregando o LBL juntamente com o DOM, tem-se que as equações do fluxo radioativo e da geração volumétrica de calor são descritas, respectivamente por:

$$q_R''(s) = \sum_{l=1}^L \int_{\eta=1}^{\infty} 2\pi\mu_l\omega_l [I_{\eta,l}^+(s) - I_{\eta,l}^-(s)] d\eta, \quad (4.24)$$

$$\dot{q}_R(s) = \sum_{l=1}^L \int_{\eta=1}^{\infty} [2\pi\kappa_{\eta}\omega_l [I_{\eta,l}^+(s) + I_{\eta,l}^-(s)] - 4\pi\kappa_{\eta}I_{b,\eta}] d\eta. \quad (4.25)$$

Para a dependência espectral solucionada pelo WSGG e a dependência direcional solucionada pelo DOM, a ETR para cada gás cinza passa a ser escrita como:

$$+\mu_l \frac{dI_{i,l}^+(s)}{ds} = k_{p,i} p_a(s) a_i(T) I_b(s) - k_{p,i} p_a(s) I_{i,l}^+(s), \quad (4.26)$$

$$-\mu_l \frac{dI_{i,l}^-(s)}{ds} = k_{p,i} p_a(s) a_i(T) I_b(s) - k_{p,i} p_a(s) I_{i,l}^-(s). \quad (4.27)$$

De forma similar à solução empregando o LBL juntamente com o DOM, o fluxo de calor e o termo fonte de radiação térmica para o método WSGG passam a ser:

$$q_R''(s) = \sum_{i=0}^I \sum_{l=1}^L 2\pi\mu_l\omega_l [I_{i,l}^+(s) - I_{i,l}^-(s)], \quad (4.28)$$

$$\dot{q}_R(s) = \sum_{i=1}^I \sum_{l=1}^L 2\pi\omega_l k_{p,i} p_a(s) [[I_{i,l}^+(s) - I_{i,l}^-(s)] - 2a_i(s) I_b(s)]. \quad (4.29)$$

Mais detalhes quanto à modelagem da radiação térmica podem ser encontrados em diferentes trabalhos [Dorigon, 2013; Cassol, 2013; Ziemniczak, 2014].

4.3. Implementação dos métodos de solução de radiação térmica

O Chem1D já possui o modelo OTA implementado para a solução do problema radiativo. Visando obter modelos mais detalhados para a modelagem da radiação térmica, os códigos LBL e WSGG, desenvolvidos pelo grupo do Laboratório de Radiação Térmica, são implementados como subrotinas no código Chem1D. Enquanto o Chem1D é baseado no método dos volumes finitos, ambos os códigos de radiação térmica são construídos com base no método das diferenças finitas. Para o cálculo das intensidades radiantes, os códigos de radiação necessitam dos valores dos escalares no ponto central das células do domínio computacional. Desta forma, primeiramente são fornecidas as posições centrais dos volumes de controle do Chem1D aos códigos de radiação térmica para a discretização das derivadas. Então, os valores locais de pressões parciais dos gases participantes e de temperatura, ambos calculados pelo Chem1D, são fornecidos como dados de entrada para a solução da ETR pelos modelos de radiação térmica. Por fim, os métodos LBL e WSGG fornecem o termo fonte

radiante, o qual é empregado para a solução da equação de conservação da entalpia específica da mistura (Eq. 4.5).

Originalmente os códigos de radiação são programados considerando apenas malha uniforme. No entanto, o Chem1D emprega um algoritmo de malha adaptativa. Assim, um cuidado especial deve ser tomado quanto a discretização das equações das intensidades radiantes ($I_{n,l}^+$ e $I_{n,l}^-$) contabilizando as variações dos tamanhos das células do domínio computacional. As equações discretizadas para as intensidades radiantes são dadas por:

$$I_{n,l,p}^+ = \frac{(x_p - x_{p-1})k_{n,p}I_{b,n,p}}{\mu_l + k_{n,p}(x_p - x_{p-1})} + \frac{\mu_l I_{p-1}^+}{\mu_l + k_{n,p}(x_p - x_{p-1})} \quad p=2, \dots, N_p, \quad (4.30)$$

$$I_{n,l,p}^- = \frac{(x_{p+1} - x_p)k_{n,p}I_{b,n,p}}{\mu_l + k_{n,p}(x_{p+1} - x_p)} + \frac{\mu_l I_{p+1}^-}{\mu_l + k_{n,p}(x_{p+1} - x_p)} \quad p=N_p-1, \dots, 1, \quad (4.31)$$

sendo p o índice da célula da malha computacional, e N_p o número total de células.

O fluxograma do processo de solução do código Chem1D empregando os modelos de radiação térmica é apresentado na Figura 4.1. Primeiramente as condições de contorno são definidas e as propriedades da mistura são computadas. Após, cada termo das equações de conservação é calculado em sua forma integral. Nesta etapa, modelos específicos para os termos fontes das equações são calculados, como as taxas de produção/consumo de espécies químicas e a taxa volumétrica de radiação térmica. Após, os resíduos das equações são computados. O procedimento se repete até que o critério de convergência de E-10 (erro relativo entre a iteração atual e a anterior) é atingido para todas as equações.

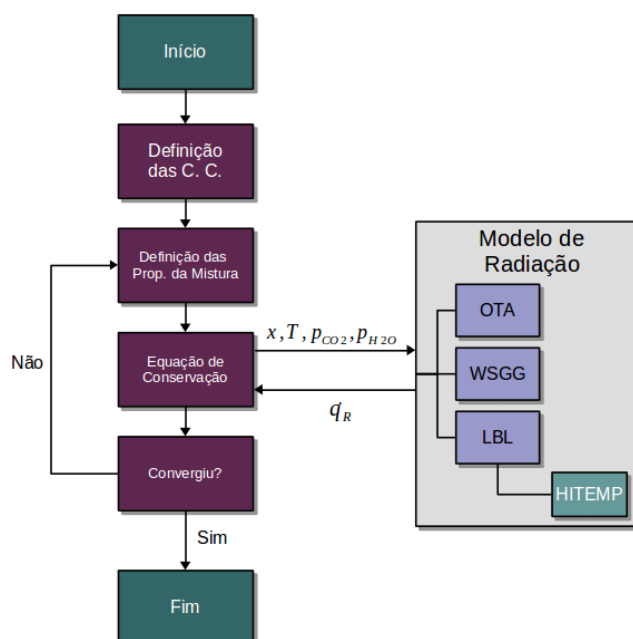


Figura 4.1 – Esquemática do processo de solução do Chem1D.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Chamas unidimensionais laminares contra-corrente de metano diluído com nitrogênio foram simuladas. A estrutura da chama é comparada para os diferentes modelos de radiação térmica (OTA, WSGG, LBL) na Sessão 5.1. O limite crítico de diluição em que ocorre a extinção de chama foi investigado para diferentes taxas de deformação considerando os modelos OTA e WSGG para a radiação térmica na Seção 5.2.

5.1 Avaliação da estrutura da chama

As simulações foram comparadas aos resultados obtidos numericamente por Oh *et al.*, 2008, considerando o combustível formado por 19% de CH_4 e 81% de N_2 (em base molar) e taxas de deformação de 20 s^{-1} e 60 s^{-1} . Um dos desafios encontrados ao se comparar resultados de chamas contra-corrente com dados (tanto numéricos quanto experimentais) da literatura é a correta definição da taxa de deformação da chama. Experimentalmente a taxa de deformação é definida a partir da quantidade de movimento do escoamento nos bocais de injeção do combustível e oxidante pela expressão

$$a_g = \frac{2u_{ox}}{L} \left(1 + \frac{u_{fu} \sqrt{\rho_{fu}}}{u_{ox} \sqrt{\rho_{ox}}} \right), \quad (5.1)$$

onde os subíndices ox e fu indicam, respectivamente o oxidante e o combustível. Esta taxa de deformação é um parâmetro global, de forma que uma comparação direta de dados experimentais com numéricos nem sempre é possível. De acordo com Law, 2010, para uma mesma taxa de deformação, diferentes abordagens para as condições de contorno do escoamento (como escoamento potencial ou velocidade prescrita) devem resultar em mesma estrutura interna da chama.

A fim de se avaliar a estrutura interna da chama, perfis de velocidade para as taxas de deformação de 20 s^{-1} (Figura 5.1.a) e 60 s^{-1} (Figura 5.1.b) são comparadas com os resultados numéricos unidimensionais de Oh *et al.*, 2008. Visto que efeitos de empuxo não são contabilizados pelo Chem1D, perfis de velocidade para a menor taxa de deformação são comparados com os resultados para microgravidade apresentados pelos autores. Uma boa concordância é observada entre os perfis de velocidade para a região do escoamento afetada termicamente em ambas as taxas de deformação. Fora dessa região os perfis OTA, WSGG e LBL continuam coincidentes, embora comecem a divergir sensivelmente dos resultados de referência. Isso pode ser explicado devido às condições de contorno (velocidade prescrita em Oh *et al.*, 2008, e escoamento potencial no Chem1D).

A estrutura interna da chama também pode ser verificada para uma taxa de deformação local a_l , a qual é definida como o gradiente da velocidade normal à superfície da chama no ponto de máxima liberação de calor. Para $a_g = 20 \text{ s}^{-1}$ observou-se o valor de $a_l = 38 \text{ s}^{-1}$, enquanto Hamins *et al.*, 2007, e Oh *et al.*, 2008, apresentam valores de $a_l \approx 60 \text{ s}^{-1}$ para gravidade normal e $a_l \approx 35 \text{ s}^{-1}$ para microgravidade. Para a maior taxa de deformação, $a_g = 60 \text{ s}^{-1}$, foi calculado $a_l = 112 \text{ s}^{-1}$ enquanto Oh *et al.*, 2008, apresenta o valor de $a_l = 105 \text{ s}^{-1}$.

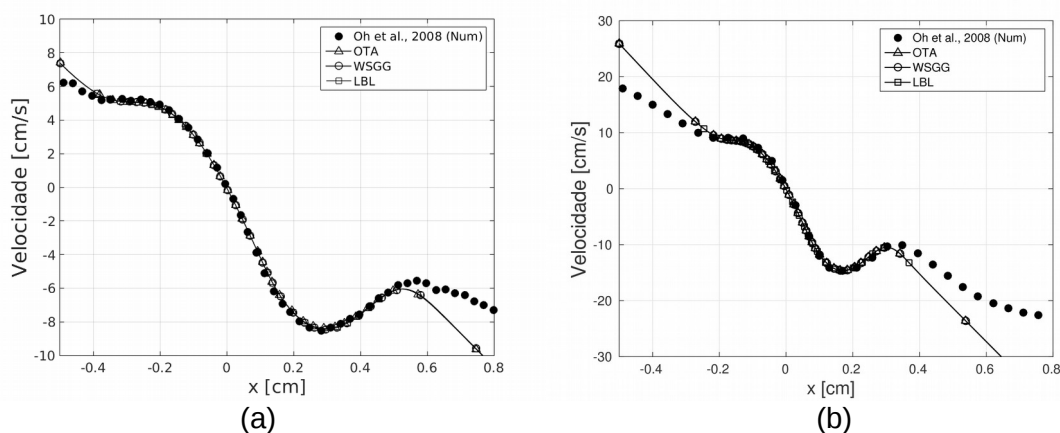


Figura 5.1 - Perfis de velocidades para diluição de 81% de N_2 e taxas de deformação $a = 20 \text{ s}^{-1}$ (a) e $a = 60 \text{ s}^{-1}$ (b).

Essas pequenas diferenças são atribuídas ao fato dos valores apresentados da literatura serem obtidos a partir de simulações bidimensionais empregando mecanismo de 3 reações químicas para uma diluição de combustível com 79% de N_2 . Estes resultados demonstram a influência do empuxo na solução para baixas taxas de deformação.

Perfis de temperatura para $a=20\text{ s}^{-1}$ são apresentados na Figura 5.2. Considerando-se a razão de velocidades de injeção calculadas pelo Chem1D como próxima a 1, o perfil de temperatura considerando o modelo OTA foi comparado com os resultados experimentais de Hamins *et al*, 2007, e numéricos de Oh *et al*, 2008, ambos para microgravidade. O mesmo modelo de radiação térmica foi empregado nas simulações de Oh, 2008. Observa-se que o perfil de temperatura calculado reproduz satisfatoriamente os resultados da referência quanto a largura da região afetada termicamente e a temperatura máxima da chama. Perfis experimentais e numéricos unidimensionais de temperatura para $a=60\text{ s}^{-1}$ não são apresentados na literatura. Perfis numéricos são apresentados somente para simulações bidimensionais empregando um mecanismo global de cinética química, os quais apresentam chamas mais largas e com maior temperatura máxima em relação às simulações unidimensionais.

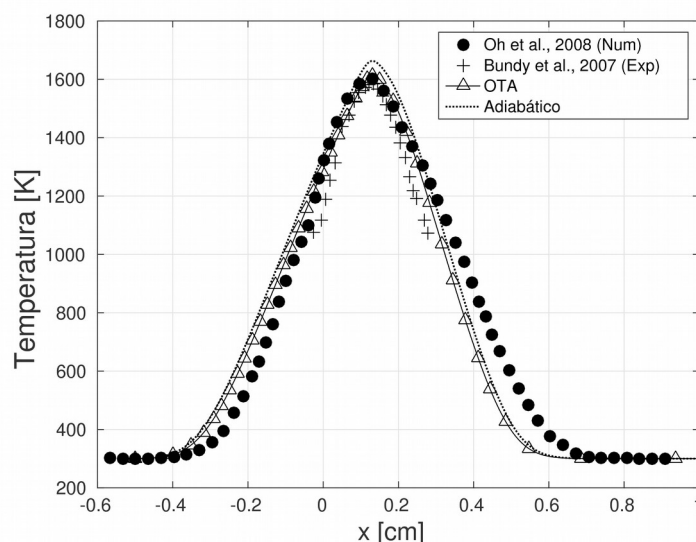


Figura 5.2 - Perfis de temperatura para diluição de 81% de N_2 e taxa de deformação $a=20\text{ s}^{-1}$.

Os resultados para velocidade e temperatura demonstram que as perfis calculados estão de acordo com a literatura. Além do mais, a taxa de deformação imposta como condição de contorno no Chem1D de fato se aproxima da taxa de deformação global ($a \approx a_g$) para razões de velocidade de injeção entre o combustível próxima de 1. Desta forma, diferenças na estrutura de chama obtida pelos diferentes modelos de radiação térmica podem ser avaliadas.

Perfis de temperatura obtidos pelo OTA (considerando dois e quatro gases participantes), WSGG e LBL, são apresentados na Figura 5.3 para a região próxima das temperaturas máximas. Considerando as soluções empregando o método LBL como referência, observa-se uma redução da temperatura máxima de 68 K da menor para a maior taxa de deformação. Uma boa concordância entre os modelos WSGG e LBL é encontrada. Em ambas as taxas de deformação analisadas, a diferença relativa da temperatura máximas entre o WSGG e o LBL são menores que 0,1%, e entre o WSGG ao OTA são na ordem de 1%. A temperatura máxima de chama encontrada com o OTA é subestimada para ambas taxas de deformação, isso deve-se ao fato de o OTA superestimar o termo fonte de radiação. Quando comparados ao resultado adiabático, o WSGG apresenta temperaturas respectivamente 2,41% e 1,48% menores para $a=20\text{ s}^{-1}$ e $a=60\text{ s}^{-1}$. Não são observadas diferenças significativas no perfil de temperatura para as duas variantes do OTA. Os resultados ilustram o aumento da

importância do termo fonte de radiação à medida que as taxas de deformação diminuem.

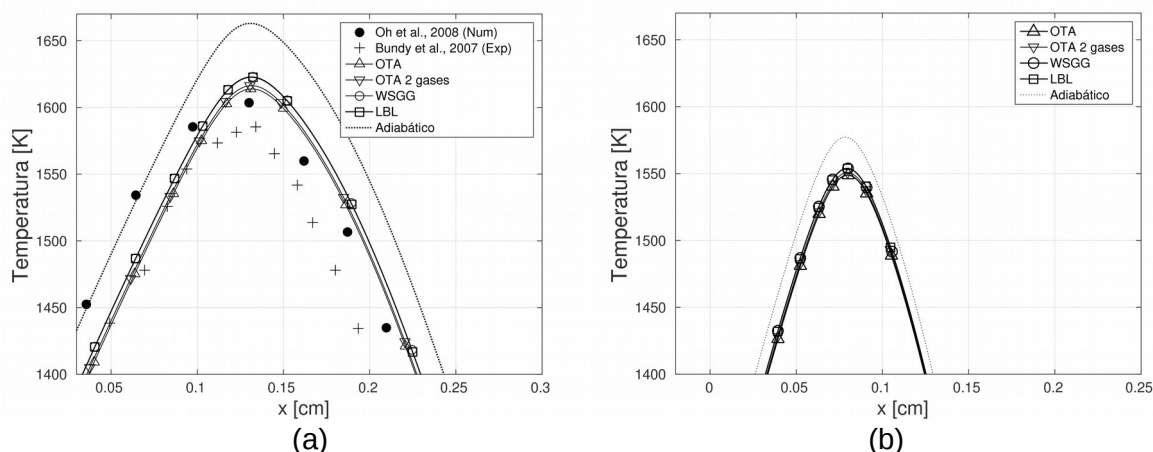


Figura 5.3 - Perfis de temperaturas na região de máximas temperaturas para diluição de 81% de N_2 e taxa de deformação $a=20\text{ s}^{-1}$ (a) e $a=60\text{ s}^{-1}$ e (b).

Os termos fontes de radiação são avaliados para taxas de deformação de $a=20\text{ s}^{-1}$ e $a=60\text{ s}^{-1}$ na Figura 5.4. Os resultados mostram a boa concordância entre os valores simulados para o WSGG e o LBL. É visível a maior liberação de calor por radiação prevista pelo modelo OTA em comparação aos outros dois modelos. O termo fonte máximo para o modelo OTA tem magnitude 8,82 % e 6,54 % maior em relação ao modelo LBL. Outra particularidade do modelo OTA em relação aos outros dois é a largura da região de liberação de calor, uma vez que o modelo WSGG e a integração LBL diferem basicamente apenas para o valor máximo. Parte dessas divergências podem ser explicadas pelo fato de os modelos WSGG e LBL considerarem apenas o CO_2 e H_2O como espécies participantes, ao passo que o OTA (quatro gases) também leva em conta o CO e o CH_4 como espécies participantes. Isso pode ser observado através da diferença no termo fonte de radiação térmica encontrada entre os modelos OTA (dois e quatro gases participantes). No entanto, a diferença entre o modelo OTA de quatro gases e o WSGG/LBL pode ser atribuído aos efeitos de absorção de radiação não contabilizada pela aproximação para meios opticamente finos.

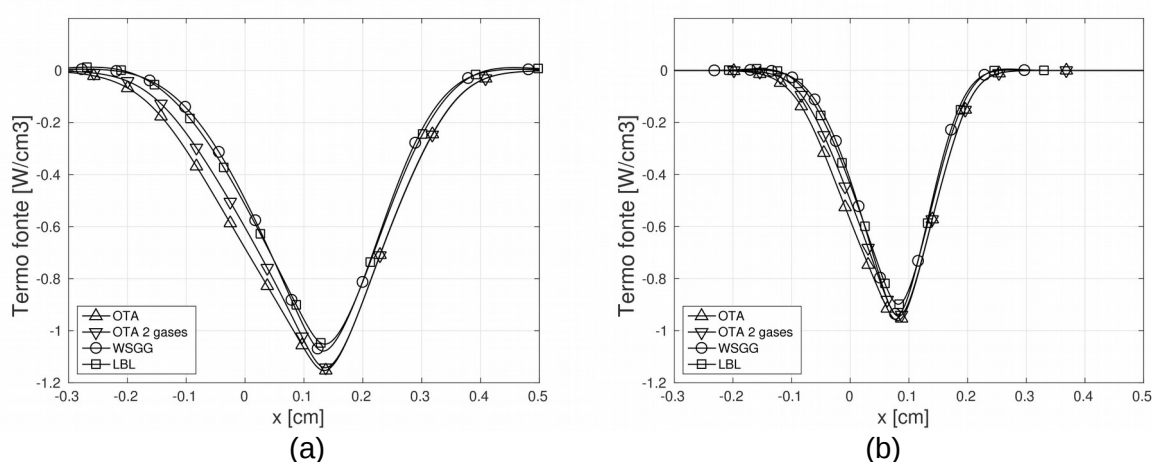


Figura 5.4 - Termos fonte de radiação para diluição de 81% de N_2 e taxa de deformação $a=20\text{ s}^{-1}$ (a) e $a=60\text{ s}^{-1}$ e (b).

A produção de espécies químicas para cada modelo de radiação é apresentada na Figura 5.5. Verifica-se que as diferenças entre os modelos na fração mássica dos principais

produtos da combustão para a chama estuda não são visíveis. Com a redução da taxa de deformação é observado um aumento significativo na fração mássica de H_2O , enquanto CO_2 e H_2 apresentam apenas um pequeno aumento. Por outro lado, a fração mássica de CO se reduz consideravelmente. A redução da taxa de deformação representa um aumento no tempo de residência da chama. Assim, a formação dos produtos tende a valores no equilíbrio, ou seja, ocorre uma maior conversão das espécies intermediárias em espécies estáveis.

De forma geral, percebe-se uma boa concordância entre os modelos de radiação térmica avaliados. No entanto a exigência computacional entre os modelos é bem distinta. Partindo-se de uma solução de chama adiabática, enquanto simulações empregando o modelo OTA atingem a convergência em segundos, o tempo computacional sobe para alguns poucos minutos empregando o WSGG, ao passo que uma solução LBL leva horas para convergir.

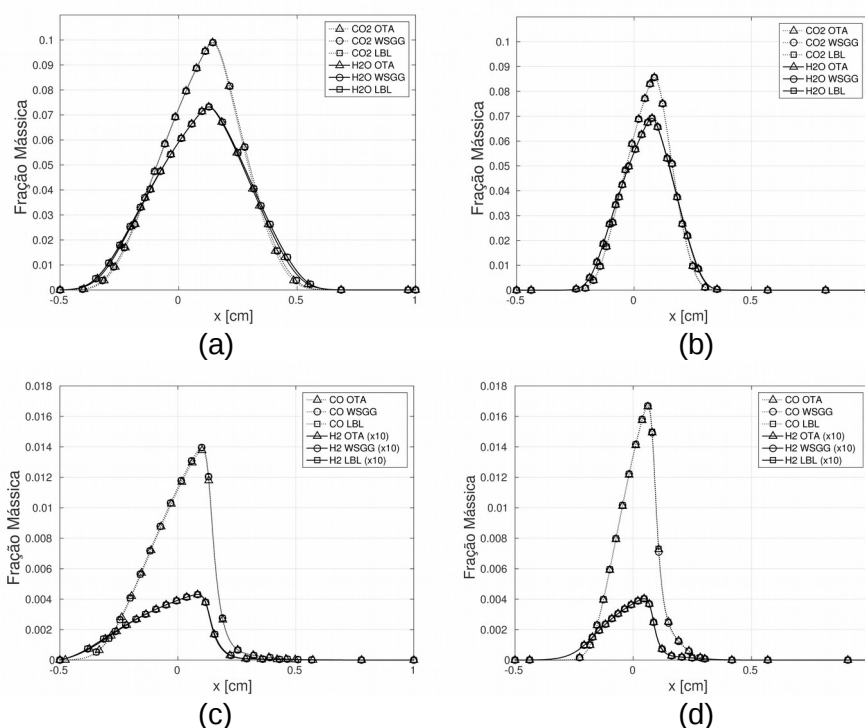


Figura 5.5 - Produção de espécies CO_2 e H_2O para $a = 20 \text{ s}^{-1}$ (a), CO_2 e H_2O para $a = 60 \text{ s}^{-1}$ (b), CO e H_2 para $a = 20 \text{ s}^{-1}$ (c) e CO e H_2 para $a = 60 \text{ s}^{-1}$ (d).

5.2 Avaliação dos limites de extinção por diluição

A segunda etapa do trabalho consiste em avaliar os limites de extinção das chamas por diluição de N_2 no combustível. Uma série de simulações foram realizadas para taxas de deformação de 10 s^{-1} a 60 s^{-1} . Para uma taxa de deformação definida, o limite de extinção é encontrado aumentando a concentração de N_2 do combustível, desde a condição de metano puro até o ponto de não convergência do sistema de equações (representando o limite de extinção da chama). Com base na concordância dos resultados do WSGG em relação ao LBL quanto a estrutura da chama, e devido à grande demanda computacional exigida pelo LBL, as simulações foram realizadas apenas para os modelos simplificados (OTA e WSGG). Os limites de extinção obtidos pelos modelos de radiação foram comparados aos resultados experimentais de Bundy *et al.*, 2003 (para gravidade normal), aos resultados experimentais de Hamins *et al.*, 2007, e Maruta *et al.*, 1998 (para microgravidade), e aos resultados numéricos unidimensionais obtidos por Oh *et al.*, 2008 (para microgravidade). Os resultados numéricos obtidos por Oh *et al.*, 2008, considerando os efeitos de empuxo (não apresentados) são muito próximos aos valores experimentais encontrados para gravidade normal, no entanto, estas simulações foram realizadas em um escopo multidimensional.

A Figura 5.6 apresenta os limites de extinção da chama por diluição de combustível. Percebe-se um boa concordância entre os limites computados e a literatura para taxas de deformação entre 20s^{-1} e 60s^{-1} . Para taxas de deformação inferiores a 20s^{-1} os modelos OTA e WSGG predizem taxas de diluição crítica mais elevadas que os resultados experimentais da referência. Isso se deve ao fato de a simulação unidimensional não prever corretamente os efeitos bidimensionais nem considerar forças de campo que resultam no efeito de empuxo, mesmo utilizando-se da taxa de estiramento.

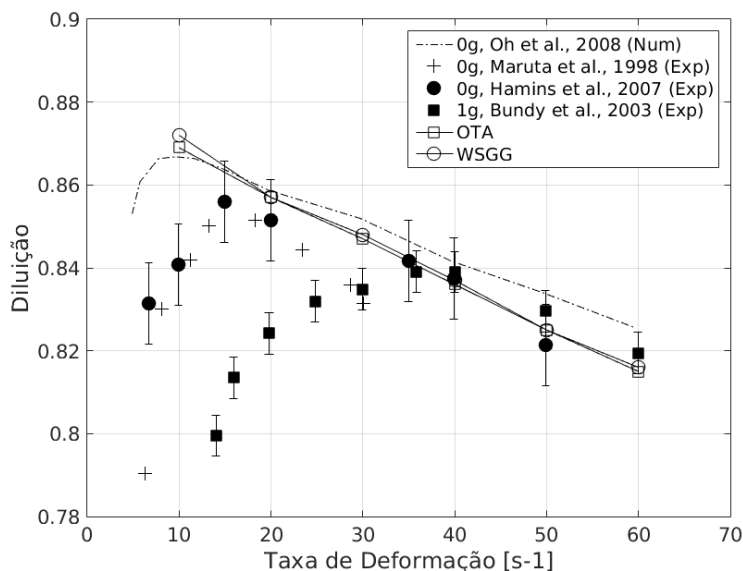


Figura 5.6 - Limites de extinção pela diluição de com N_2 para diferentes taxas de deformação.

6. CONCLUSÃO

O modelo WSGG e o método de integração espectral LBL para a predição da radiação de chamas foram implementados no código de chamas unidimensionais Chem1D. Chamas laminares contra-corrente não pré-misturadas de metano e ar foram simuladas para diferentes taxas de deformação e diferentes diluições com N_2 a fim de comparar as soluções da radiação.

Primeiramente, a estrutura da chama encontrada para os diferentes modelos de radiação foi estudada. Constatou-se uma boa concordância entre os perfis de temperatura, espécies químicas e termo fonte radiante para o WSGG e o LBL. O modelo OTA apresenta resultados satisfatórios frente aos modelos mais detalhados, embora superestime as perdas de calor por radiação, o que resulta em menores temperaturas da chama. Os resultados computados reproduzem adequadamente dados disponíveis na literatura [Oh *et al.*, 2008; Bundy *et al.*, 2003; Hamins *et al.*, 2007]. Mostrou-se que os modelos WSGG e OTA apresentam resultados satisfatórios para simulações de chamas de CH_4 diluído com N_2 , porém, com reduzido tempo computacional frente ao método LBL.

Após, os limites de extinção da chama por diluição do combustível com N_2 foram avaliados para diferentes taxas de deformação de chamas empregando os modelos OTA e WSGG. Verificou-se que os resultados se aproximam dos valores apresentados na literatura para taxas de deformação acima de 20s^{-1} . Não foram observadas diferenças significativas entre os dois modelos quanto aos limites de extinção de chama, o que ratifica que estas chamas são opticamente finas.

Para as chamas estudadas não são observadas grandes diferenças nos resultados para os diferentes modelos de radiação térmica. Assim, é sugerido como próximo passo, a avaliação dos modelos de radiação para condições em que a radiação térmica é mais significativa, como por exemplo, em taxas de deformação ainda menores ou em chamas diluídas com CO_2 (visto que o dióxido de carbono atua como gás participante nas emissões de radiação térmica).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bundy, M., Hamins, A., Lee, K.Y.; **“Suppression limits of low strain rate non-premixed methane flames”**, Combustion and Flame, vol. 133, pp 299–310, 2003.

Cassol, F.; **“Geração de soluções benchmark e avaliação de modelos de radiação térmica em processos de combustão”**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2013.

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

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

Chan, Y.L., Zhu, M.M., Zhang, Z.Z., Liu, P.F., Zhang, D.K.; **“The Effect of CO₂ Dilution on the Laminar Burning Velocity of Premixed Methane/Air Flames”**, Energy Procedia, vol. 75, pp 3048-3053, 2015.

Coelho, P., Costa, M.; **“Combustão”**, Edições Orion, 1ª edição, 2007.

Denison, M.K., Webb, B.W.; **“An Absorption-line Blackbody Distribution Function for Efficient Calculation of Total Gas Radiative Transfer”**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, vol. 5, pp 499-510, 1993.

Denison M.K; Webb, B.W.; **“The Spectral-line Weighted-Sum-of-Gray-Gases model for H₂O/CO₂”**, Journal of Heat Transfer, vol. 117, pp 788-792, 1995.

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

Hamins, A., Bundy, M., Oh, C.B., Kim, S.C.; **“Effect of buoyancy on the radiative extinction limit of low-strain-rate nonpremixed methane–air flames”**, Combustion and Flame, vol. 151, pp 225–234, 2007.

Hoerlle, C.A.; **“Estudo numérico de chamas laminares difusivas de CH₄ diluído com CO₂ empregando mecanismos cinéticos globais e a técnica Flamelet-Generated-Manifold”**, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.

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

Ju, Y., Guo, H., Maruta, K., Liu, F.; **“On the extinction limit and flammability limit of non-adiabatic stretched methane–air premixed flames”**, Journal of Fluid Mechanics, vol. 342 pp 315-334, 1997.

Law, C.K., **“Combustion Physics”**, Cambridge University Press, 2010.

Lee, C.E., Lee, S.R., Han, J.W., Park, J.; **“Numerical study on the effect of CO₂ addition in flame structure and NO_x formation of CH₄-air counterflow diffusion flames”**, International Journal of Energy Research, vol. 25 pp 343-354, 2001.

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

Maruta, K., Yoshida, M., Guo, H., Ju, Y., Niioka, T.; **“Extinction of Low-Stretched Diffusion Flame in Microgravity”**, Combustion and Flame, vol. 112, pp 181-186, 1998.

Maurenate, A., Vielmo, H.A., França, F.H.R.; **“Comparison of the standard weighted-sum-of-gray-gases with the absorption-line blackbody distribution function for the computation of radiative heat transfer in H₂O/ CO₂ mixtures”**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, vol. 109, pp 1758-1770, 2008.

Mossi, A.; **“Modelagem da radiação térmica em chamas laminares da combustão de metano em ar”**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.

Oh, C.B., Hamins, A., Bundy, M., Park, J.; **“The two-dimensional structure of low strain rate counterflow nonpremixed-methane flames in normal and microgravity”**, Combustion Theory and Modelling, vol. 12:2, pp 283-302, 2008.

Peters, N. e Rogg, B.; **“Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems, Lecture Notes in Physics”**, vol. 15, 1993.

Qiao, L., Gan, Y., Nishiie, T., Dahm, W.J.A., Oran, E.S.; **“Extinction of premixed methane/air flames in microgravity by diluents: Effects of radiation and Lewis number”**, Combustion and Flame, vol. 157, pp 1446-1455, 2010.

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

Somers, L.; **“The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models”**, Eindhoven University of Technology, 1994.

Smith, G.P., Golden, D.M., Frenklach, M., Moriarty, N.W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C.T., Hanson, R.K., Song, S., Gardiner, W.C., Lissianski, V.V., Qin, Z., **“GRI-Mech 3.0”**, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, Acessado em 11/11/2016.

Taine, J.; **“A line-by-line calculation of low-resolution radiative properties of CO₂-COtransparent nonisothermal gases mixtures up to 3000K”**, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, vol. 30-4, pp 371–379, 1983.

Thynell, S. T.; **“Discrete-ordinates method in radiative heat transfer”**, International Journal of Engineering Science, vol. 36, pp 1651-1675, 1998.

Turns, S. R.; **“An Introduction to Combustion”**, McGraw Hill, 2nd edition, 2000.

van Oijen, J., de Goey, L.; **“Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds”**, Combustion Science and Technology, vol. 161, pp 113–137, 2000.

Wang, L., Liu, Z., Chen, S., Zheng C., Li, J.; **“Physical and Chemical Effects of CO₂ and H₂O Additives on Counterflow Diffusion Flame Burning Methane”**, Energy Fuels, vol. 27 pp 7602-7611, 2013.

Ziemniczak, A.; Brittes, R., Cassol, F., França, F.H.R.; **“Evaluation of the number of gray gases in the WSGG model”**, 22nd International Congress of Mechanical Engineering, 2013.

Ziemniczak, A.; **“Geração de novas correlações da soma-ponderada-de-gases-cinza para espécies individuais de gases participantes: H₂O, CO₂, CO e CH₄”**, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2014.