

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

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>

por

Luís Gustavo Pires Rodrigues

Dissertação para obtenção do Título de Mestre em Engenharia

Porto Alegre, novembro de 2016

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>

por

Luís Gustavo Pires Rodrigues  
Licenciado em Física

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Energia

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Luís Mauro Moura, PPGEM / PUCPR

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno, DEMEC / UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 25, novembro de 2016

*“There is no dark side of the moon really. Matter of fact it’s all dark.”*

*Eclipse – Pink Floyd*

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço à minha família pelo apoio e suporte em todos os momentos. Aos meus pais Celso e Carmen, irmãos Márcia e Marcelo e sobrinhos Francisco, Davi e Antonella.

Aos meus amigos Lucas, Filipe e Guinever pelo companheirismo e pelas boas músicas compartilhadas.

Ao meu orientador Francis H. R. França pela confiança e toda a dedicação para a realização deste trabalho.

Aos colegas do Laboratório de Radiação Térmica, aos colegas do Laboratório de Combustão e aos demais colegas do PROMEC.

Aos professores do PROMEC e aos professores da banca avaliadora.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Aos referidos e a todos aqueles que de alguma forma contribuíram para que esta etapa fosse concluída, meu muito obrigado!

## RESUMO

Simulações acopladas do escoamento reativo e dos processos de transferência de calor para o estudo de chamas são problemas dispendiosos computacionalmente. A transferência de calor por radiação em processos de combustão, devido às elevadas temperaturas, é o processo de troca energética dominante. Ainda, o comportamento altamente irregular do coeficiente de absorção com o comprimento de onda se constitui em uma dificuldade adicional na modelagem da transferência radiativa em meios participantes. Para contornar essa dificuldade modelos espectrais foram desenvolvidos com o objetivo de simular o comportamento de um gás real. Dentre esses modelos destacam-se o gás cinza (GG: *Gray Gas*), o mais simples, que negligencia o comportamento espectral do coeficiente de absorção, e o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG: *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) onde a integração sobre todo o espectro é substituída por um número finito de gases cinza. Com o avanço de ferramentas computacionais, principalmente códigos CFD (*Computational Fluid Dynamics*), abordagens computacionais se tornaram atrativas frente ou em complemento às abordagens experimentais. Desse modo, o presente trabalho tem por objetivo a aplicação dos modelos WSGG e GG com novas correlações na simulação detalhada de chamas difusivas laminares de metano diluído com dióxido de carbono e nitrogênio com o código CFD comercial ANSYS/Fluent. Foram desenvolvidas rotinas de usuário (UDF: *User-Defined Functions*) para o acoplamento dos modelos espectrais ao código CFD. A verificação das rotinas de usuário foi realizada comparando os resultados obtidos via simulação Fluent com dados obtidos pelo modelo WSGG com um código FORTRAN próprio desenvolvido pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Radiação Térmica (LRT/UFRGS) para o problema unidimensional de superfícies negras e infinitas preenchidas por um meio não-isotérmico e não-homogêneo. Os erros encontrados para o fluxo de calor radiativo nas superfícies e para o termo fonte radiativo ao longo do meio foram da ordem de 1% indicando o funcionamento correto das rotinas UDF acopladas ao Fluent. Por fim, as rotinas foram aplicadas na simulação numérica para chamas de potência constante com diluição dos reagentes e os dados obtidos com a solução numérica foram comparados com dados experimentais para a fração radiante e fluxo de calor radiativo. Os desvios médios encontrados para o fluxo de calor radiativo ficaram em torno de 10% para todas as chamas, excetuando as chamas com diluição de CO<sub>2</sub> de 30%, 40% e 50%, em volume, para as quais os desvios médios ficaram em torno de 15%. O termo fonte para as

chamas apontou para a predominância da emissão do meio em relação à absorção. Todas as chamas estudadas se encontram no regime opticamente fino (*optically thin*) para o qual, segundo apontam estudos da literatura, a escolha do modelo espectral possui impacto pequeno em resultados globais da chama como a temperatura e a concentração das espécies na mistura. Nesse aspecto os resultados encontrados concordaram com a previsão da literatura, entretanto para a transferência radiativa, o modelo GG se mostrou sensivelmente menos preciso em comparação ao modelo WSGG, principalmente para a fração radiante e para o fluxo radiativo na região da pluma aquecida, indicando a dependência do modelo espectral adotado.

Palavras-chave: transferência radiativa; radiação térmica; soma-ponderada-de-gases-cinza; gás cinza; chamas difusivas laminares.

## ABSTRACT

Coupled simulations of the reactive flow with the heat transfer processes for flame studying are computationally demanding problems. The radiative transfer in combustion processes is the main heat transfer mechanism due to the high temperatures involved. However, the highly irregular behavior of the absorption coefficient with the wavenumber composes in an additional difficulty on modeling the radiative transfer in participating media. In order to overcome this issue, spectral models were developed with the objective of simulate the behavior of real gases. Some of the most known models are the gray gas (GG) for which the spectral behavior of the radiative properties of the medium is neglected and the weighted-sum-of-gray-gases (WSGG) for which the integration over the entire spectrum is replaced by a summation over a finite number of gray gases with constant absorption coefficients. With the development of computational tools, mainly Computational Fluid Dynamics (CFD) codes, numerical approaches became attractive instead or in complement of experimental set ups. In this way, the present work aims to couple the WSGG and the GG models with new correlations in a detailed simulation of diffusive laminar flames of methane diluted with carbon dioxide and nitrogen with the commercial CFD code ANSYS/Fluent. User-defined functions (UDF) were developed to the coupling of the spectral models. The verification was carried out through the WSGG model by comparing the Fluent solution with a solution obtained with a FORTRAN code developed by the Thermal Radiation Laboratory (LRT/UFRGS) research group for the one-dimensional system of black surfaces filled with a non-homogeneous and non-isothermal medium. The deviations for the radiative heat flux for the walls and the radiative heat source along the domain were of 1% or less, indicating the correct coupling between the UDF routines and the CFD code. Finally, the UDF were applied in the solution of constant power flames with fuel diluted with carbon dioxide and nitrogen. The obtained data was then compared with experimental measurements for the radiant fraction and the radiative heat flux along the flame axis. The average deviations found were in order of 10% for all flames, except for the flames with 30%, 40% and 50% of CO<sub>2</sub> dilution, in volume, for which the deviations found were in order of 15%. The radiative heat source was plotted and indicated for the medium emission predominance in comparison with the medium absorption. All flames studied were optically thin flames for which, studies pointed, the spectral model have minor impact over global results as flame temperature and mixture

concentration. For this aspect the results found showed agreement with the literature studies predictions, however the GG model showed itself less accurate in comparison with the WSGG model for the radiant fraction and the radiative heat flux computations. So the spectral models have influence on the radiative transfer even if its effect on flame structure can be negligible.

Keywords: radiative transfer; thermal radiation; weighted-sum-of-gray-gases; gray gas model; diffusive laminar flames.

# ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
1.1	Revisão da literatura .....	3
1.2	Objetivos do trabalho .....	18
1.3	Organização do texto .....	19
<b>2</b>	<b>MODELAGEM DE CHAMAS LAMINARES DIFUSIVAS .....</b>	<b>21</b>
2.1	Equações de conservação .....	21
2.1.1	Equação da conservação de massa .....	21
2.1.2	Equação de conservação da quantidade de movimento .....	22
2.1.3	Equação de conservação da massa das espécies químicas .....	22
2.1.4	Equação de conservação da energia .....	25
2.2	Mecanismos da cinética química .....	26
<b>3</b>	<b>MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA .....</b>	<b>28</b>
3.1	Intensidade de radiação .....	29
3.2	Radiação de corpo negro .....	32
3.3	Intensidade de radiação em meios participantes .....	33
3.3.1	Atenuação da intensidade por absorção do meio .....	33
3.3.2	Incremento da intensidade por emissão do meio .....	35
3.3.3	A equação da transferência radiativa .....	37
3.4	Modelos espectrais para o coeficiente de absorção .....	38
3.4.1	Modelo de gás cinza .....	38
3.4.2	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza .....	40
<b>4</b>	<b>CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA .....</b>	<b>43</b>
4.1	Medidas experimentais .....	43
4.2	Domínio computacional e condições de contorno .....	46
<b>5</b>	<b>ABORDAGEM COMPUTACIONAL .....</b>	<b>49</b>
5.1	Método numérico .....	49
5.2	Construção e validação das rotinas de usuário .....	50
5.3	Estudo de qualidade de malha .....	57
<b>6</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES .....</b>	<b>61</b>
6.1	Análise dos resultados globais .....	61

6.2	Análise dos resultados para a chama sem diluição .....	69
6.3	Análise dos resultados para as chamas com diluição de N <sub>2</sub> .....	74
6.4	Análise dos resultados para as chamas com diluição de CO <sub>2</sub> .....	82
<b>7</b>	<b>CONCLUSÕES .....</b>	<b>91</b>
7.1	Propostas de continuidade .....	93
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>95</b>
	<b>APÊNDICE A – Tabelas com os fluxos radiativos para as chamas da série de chamas de potência constante .....</b>	<b>102</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Espectro da radiação eletromagnética [Incropera e De Witt, 2008] .....	28
Figura 3.2	Emissão da radiação por uma área diferencial $dA$ para um ângulo sólido $d\omega$ subtendido por $dA_n$ sobre $dA$ [adaptado de Incropera e De Witt, 2008] .....	30
Figura 3.3	Radiação incidindo perpendicularmente em um elemento de volume de um meio participante que absorve e espalha radiação [adaptado de Siegel e Howell, 2002] .....	33
Figura 3.4	Geometria para derivação da emissão de radiação por um volume do meio [adaptado de Siegel e Howell, 2002] .....	36
Figura 4.1	Vista em corte do queimador Santoro adaptado [Machado, 2015] .....	44
Figura 4.2	Esquema construtivo da bancada experimental [Machado, 2015] .....	45
Figura 4.3	Esquema da geometria e condições de contorno do problema computacional .....	48
Figura 5.1	Fluxograma com a sequência de execução das rotinas UDF dentro do <i>solver</i> [adaptado de ANSYS, 2016b] .....	51
Figura 5.2	Representação gráfica dos perfis de temperatura (a) e dos perfis de fração molar das espécies participantes (b) adotados para a validação das rotinas UDF [adaptado de Dorigon et al., 2013] .....	53
Figura 5.3	Termo fonte para o perfil dado pelas Eq.(5.1)Eq.(5.4) para razão de pressão parcial 1,0 (a) e 2,0 (b); para o perfil dado pelas Eq.(5.2)Eq.(5.5) para razão de pressão parcial 1,0 (c) e 2,0 (d); para o perfil dado pelas Eq.(5.3)Eq.(5.6) para razão de pressão parcial igual 1,0 (e) 2,0 (f).....	56
Figura 5.4	Refino na região próxima à saída de combustível para as malhas construídas para o estudo de qualidade de malha .....	58
Figura 6.1	Temperatura máxima em função do percentual de diluição para a série de chamas com diluição de $N_2$ .....	62

Figura 6.2	Fração molar máxima de CO <sub>2</sub> (a) e fração molar máxima de H <sub>2</sub> O (b) em função do percentual de diluição para a série de chamas com diluição de N <sub>2</sub> .....	62
Figura 6.3	Temperatura máxima ao longo da linha de centro versus percentual de diluição para a série de chamas com diluição de CO <sub>2</sub> .....	64
Figura 6.4	Fração molar máxima de CO <sub>2</sub> (a) e fração molar máxima de H <sub>2</sub> O (b) ao longo da linha de centro versus percentual de diluição para a série de chamas com diluição de CO <sub>2</sub> .....	64
Figura 6.5	Distribuição espacial de CO <sub>2</sub> para a chama sem diluição (a), com diluição de 50% de CO <sub>2</sub> (b) e com diluição de 50% de N <sub>2</sub> (c) .....	65
Figura 6.6	Distribuição espacial de temperatura (a), CH <sub>4</sub> (b), H <sub>2</sub> O (c) e O <sub>2</sub> (d) para a chama sem diluição .....	66
Figura 6.7	Fração radiante em função do percentual de diluição para as chamas diluídas com N <sub>2</sub> (a) e para as chamas diluídas com CO <sub>2</sub> (b) .....	67
Figura 6.8	Campo de temperatura próximo à saída de combustível para as chamas com 40% de diluição de CO <sub>2</sub> sem as perdas radiativas (a) e com as perdas radiativas (b); e para a chama com 40% de diluição de N <sub>2</sub> sem as perdas radiativas (c) e com as perdas radiativas (d) .....	68
Figura 6.9	Gráfico do fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama .....	69
Figura 6.10	Termo fonte radiativo para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b) ao longo do domínio .....	71
Figura 6.11	Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de CO <sub>2</sub> para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de H <sub>2</sub> O para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio .....	72
Figura 6.12	Razão de concentração das espécies participantes para as linhas axiais (a) e radiais (b) em que o termo fonte radiativo foi obtido para o modelo WSGG/Dorigon .....	73
Figura 6.13	Fluxo de calor radiativo máximo em função do percentual de diluição para a série de chamas diluídas com N <sub>2</sub> .....	75
Figura 6.14	Gráfico do fluxo de calor radiativo ao longo do eixo da chama para as chamas PC0050N20 (a) e PC0050N40 (b) .....	76

Figura 6.15	Termo fonte radiativo para a chama PC0050N20 para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); e para a chama PC0050N40 para linhas axiais (c) e linhas radiais (d) ao longo do domínio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol .....	77
Figura 6.16	Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de CO <sub>2</sub> para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de H <sub>2</sub> O para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050N20 .....	79
Figura 6.17	Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de CO <sub>2</sub> para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de H <sub>2</sub> O para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050N40 .....	80
Figura 6.18	Razão de concentração para a chama PC0050N20 para linhas axiais (a) e radiais (b) ao longo do domínio; e razão de concentração para a chama PC0050N40 para linhas axiais (c) e radiais (d) ao longo do domínio .....	81
Figura 6.19	Máximo fluxo radiativo em função do percentual de diluição para a série de chamas diluídas com CO <sub>2</sub> .....	83
Figura 6.20	Fluxo de calor radiativo ao longo do eixo da chama para as chamas PC0050C20 (a) e PC0050C40 (b) .....	84
Figura 6.21	Termo fonte radiativo para a chama PC0050C20 para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); e para a chama PC0050C40 para linhas axiais (c) e linhas radiais (d) ao longo do domínio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol .....	86
Figura 6.22	Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de CO <sub>2</sub> para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de H <sub>2</sub> O para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050C20 .....	87

Figura 6.23	Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de CO <sub>2</sub> para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de H <sub>2</sub> O para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050C40 .....	88
Figura 6.24	Razão de concentração para a chama PC0050C20 para linhas axiais (a) e radiais (b) ao longo do domínio; e razão de concentração para a chama PC0050C40 para linhas axiais (c) e radiais (d) ao longo do domínio .....	89
Figura 7.1	Fluxo de calor radiativo para as chamas PC0050N50 (a) e PC0050C50 (b) para o modelo WSGG da superposição .....	94

## LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção do modelo de gás cinza [Cassol et al., 2014] .....	39
Tabela 3.2	Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$ [Dorigon et al., 2013] .....	42
Tabela 3.3	Coeficientes do modelo WSGG para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$ [Dorigon et al., 2013] .....	42
Tabela 4.1	Tabela com as condições de entrada para o combustível .....	48
Tabela 5.1	Erro calculado nas paredes para o fluxo de calor radiativo para razão de pressão parcial entre as espécies participantes igual a 1,0 .....	54
Tabela 5.2	Erro calculado nas paredes para o fluxo de calor radiativo para razão de pressão parcial entre as espécies participantes igual a 2,0 .....	54
Tabela 5.3	Erros máximos e médios para o termo fonte radiativo para razões de concentração entre as espécies participantes iguais a 1,0 e 2,0 .....	55
Tabela 5.4	Valores numéricos para a temperatura e concentrações das espécies participantes para as três malhas adotadas .....	59
Tabela 5.5	Valores calculados para o GCI e para $\chi$ para a temperatura e para as concentrações das espécies participantes .....	59
Tabela 5.6	Valores numéricos para o fluxo de calor radiativo para os três níveis de discretização angular .....	60
Tabela 5.7	Valores calculados para o GCI e para $\chi$ para o fluxo de calor radiativo.....	60
Tabela 6.1	Médias das razões de concentração entre as espécies participantes para o modelo WSGG/Dorigon para linhas axiais e radiais ao longo do domínio .....	74
Tabela 6.2	Razão de concentração entre as espécies participantes para o modelo WSGG/Dorigon para linhas axiais e radiais ao longo do domínio para as chamas PC0050N20 e PC0050N40 .....	82
Tabela 6.3	Razões de concentração entre as espécies participantes para o modelo WSGG/Dorigon para linhas axiais e radiais ao longo do domínio .....	90
Tabela A.1	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N00 (ou PC0050C00) ...	102
Tabela A.2	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N10 .....	103
Tabela A.3	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N20 .....	104

Tabela A.4	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N30 .....	105
Tabela A.5	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N40 .....	106
Tabela A.6	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N50 .....	107
Tabela A.7	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C10 .....	108
Tabela A.8	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C20 .....	109
Tabela A.9	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C30 .....	110
Tabela A.10	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C40 .....	111
Tabela A.11	Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C50 .....	112

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ABF	Mecanismo de cinética química
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CSD-1000	<i>High-temperature carbon dioxide spectroscopic databank</i>
CK	<i>Correlated-k</i>
CRECK	Mecanismo de cinética química
DLR	Mecanismo de cinética química
DOM	<i>Discrete Ordinates Method</i>
DTM	<i>Discrete Transfer Method</i>
EWB	<i>Exponential Wide Band</i>
FSCK	<i>Full Spectrum Correlated-k</i>
FSK	<i>Full Spectrum k</i>
FSSK	<i>Full Spectrum Scaled-k</i>
FTN	FORTTRAN
FVM	<i>Finite Volume Method</i>
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>
GG	<i>Gray Gas</i>
GNB	<i>Gray-Narrow-Band</i>
GWB	<i>Gray-Wide-Band</i>
HITEMP2010	<i>High temperature molecular database</i>
HITRAN92	<i>High-resolution transmission molecular absorption database</i>
ISAT	<i>In-situ adaptive tabulation</i>
ITF	<i>Inverse Transient Flamelet</i>
LBL	<i>Line-by-Line</i>
LC	Laboratório de Combustão
LII	<i>Laser Induced-Incandescence</i>
LRT	Laboratório de Radiação Térmica
MDA	<i>Modified Differential Approximation</i>
OTA	<i>Optically Thin Approximation</i>
P1	Método dos Harmônicos Esféricos
P3	Método dos Harmônicos Esféricos

PCI	Poder Calorífico Inferior
PDF	<i>Probability Density Function</i>
PMC	<i>Photon Monte Carlo Method</i>
POX	Chama de oxidação parcial
RT	<i>Ray Tracing</i>
RTE	Radiative Transfer Equation
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
Skm-DRM19	Mecanismo <i>skeleton</i> de cinética química
SLF	<i>Steady Laminar Flamelet</i>
SLW	<i>Spectral line based weighted-sum-of-gray-gases model</i>
SNB	<i>Statistical Narrow Band</i>
SNBCK	<i>Statistical Narrow Band Correlated-k</i>
SSE	<i>Spectral Soot Emission</i>
TRI	<i>Turbulence-Radiation Interaction</i>
UDEL	Mecanismo de cinética química
UDF	<i>User-Defined Function</i>
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
WSGG	<i>Weighted-sum-of-gray-gases</i>

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A$	Fator pré-exponencial, $\text{m}^3 \text{s}^{-1} \text{kmol}^{-1}$
$a_j$	Coefficiente de ponderação da emissividade no modelo WSGG, $\text{m}^{-1}$
$b_{j,k}$	Coefficientes polinomiais do coeficiente de emissividade no modelo WSGG
$C_{p,i}$	Calor específico a pressão constante, $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
$c_0$	Velocidade da luz no vácuo, $\text{m s}^{-1}$
$c_0, c_1, c_2, c_3, c_4, c_5$	Coefficientes polinomiais do modelo GG
$D_{i,j}$	Coefficiente de difusão da espécie $i$ na espécie $j$ , $\text{m}^2 \text{s}$
$D_{i,M}$	Coefficiente médio de difusão mássica da $i$ -ésima espécie, $\text{m}^2 \text{s}$
$dA$	Elemento de área, $\text{m}^2$
$desv_{q_R^*}$	Desvio entre dados numéricos e experimentais para o fluxo radiativo
$dq$	Taxa de calor radiativo, $\text{J s}^{-1}$
$dS$	Diferencial de caminho percorrido pela radiação, $\text{m}$
$dV$	Elemento de volume, $\text{m}^3$
$dT$	Diferencial de temperatura, $\text{K}$
$d\eta$	Diferencial de número de onda, $\text{m}^{-1}$
$d\Omega, d\omega$	Elemento de ângulo sólido, $\text{sr}$
$E$	Poder emissivo hemisférico total, $\text{W m}^{-2}$
$E_b$	Poder emissivo de corpo negro, $\text{W m}^{-2}$
$E_\eta$	Poder emissivo hemisférico espectral, $\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
$E_a$	Energia de ativação, $\text{kJ kmol}^{-1}$
$erro_{q_R^*}$	Erro calculado para o fluxo de calor radiativo
$erro_{i_R}$	Erro calculado para o termo fonte radiativo
$F_s$	Fator de segurança para o cálculo do GCI
$f_1, f_2, f_3$	Valores obtidos com a solução numérica para cada uma das malhas
$\vec{g}$	Vetor representativo das forças de campo, $\text{N}$
$h$	Constante de Planck, $\text{J s}$
$h$	Entalpia específica da mistura, $\text{kJ kg}^{-1}$
$h_i$	Entalpia específica da $i$ -ésima espécie na mistura, $\text{kJ kg}^{-1}$

$h_i^0$	Entalpia específica de formação da $i$ -ésima espécie, $\text{kJ kg}^{-1}$
$I$	Intensidade de radiação, $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1}$
$\hat{I}$	Tensor identidade, adimensional
$I_b$	Intensidade de radiação de corpo negro, $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1}$
$I_{\eta,b}$	Intensidade de radiação de corpo negro espectral, $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$
$I_{\eta}$	Intensidade de radiação espectral, $\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$
$\vec{J}_i$	Vetor de difusão mássica, $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$\vec{J}_q$	Vetor fluxo de calor, $\text{W m}^{-2}$
$\vec{j}_i^T$	Fluxo de difusão mássica devido aos gradientes de temperatura (efeito Soret), $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$\vec{j}_i^p$	Fluxo de difusão mássica devido aos gradientes de pressão, $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$\vec{j}_i^d$	Fluxo de difusão mássica devido aos gradientes de concentração das espécies, $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
$K_{c,j}$	Constante de equilíbrio para a $j$ -ésima reação, adimensional
$k$	Constante de Boltzmann, $\text{J k}^{-1}$
$k_{b,j}$	Constante de reação no sentido inverso, $\text{m}^3 \text{s}^{-1} \text{kmol}^{-1}$
$k_{f,j}$	Constante de reação no sentido direto, $\text{m}^3 \text{s}^{-1} \text{kmol}^{-1}$
$\mathcal{M}_i$	Forma molecular da $i$ -ésima espécie
$MW$	Massa molecular da mistura, $\text{kg kmol}^{-1}$
$\dot{m}$	Vazão mássica de combustível, $\text{kg s}^{-1}$
$N_g$	Número de gases cinza
$N_r$	Número de reações químicas
$N_s$	Número de espécies químicas
$p$	Pressão, atm
$p_0$	Pressão de referência (atmosférica), atm
$p_i$	Pressão parcial das espécies participantes, atm
$\dot{q}_R$	Termo fonte radiativo, $\text{kW m}^{-3}$
$q_R''$	Fluxo de calor radiativo, $\text{kW m}^{-2}$
$R$	Raio da esfera, m
$R_u$	Constante universal dos gases ideais, $\text{kJ kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$

$S$	Caminho percorrido pela radiação ao longo de um meio participante, m
$T$	Temperatura, K
$T_{REF}$	Temperatura de referência (ambiente), K
$t$	Tempo, s
$\vec{v}$	Velocidade do escoamento, m s <sup>-1</sup>
$v_{combustível}$	Módulo da velocidade de entrada do combustível, m s <sup>-1</sup>
$X_i$	Fração molar das espécies participantes, adimensional
$X_r$	Fração radiante, adimensional
$Y_i$	Fração mássica da $i$ -ésima espécie, adimensional

### Símbolos Gregos

$\beta$	Coeficiente da temperatura, adimensional
$\Delta y$	Diferença entre as posições de medida do fluxo radiativo, m
$\varepsilon$	Emitância total do meio, adimensional
$\eta$	Número de onda, m <sup>-1</sup>
$\theta$	Ângulo polar, rad
$K_\eta$	Coeficiente de extinção espectral do meio, m <sup>-1</sup>
$\kappa$	Coeficiente de absorção, m <sup>-1</sup>
$\kappa_{p,j}$	Coeficiente de absorção baseado na pressão, m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup>
$\kappa_\eta$	Coeficiente de absorção espectral, m <sup>-1</sup>
$\lambda$	Condutividade térmica da mistura, W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
$\mu$	Viscosidade dinâmica, N s m <sup>-2</sup>
$v'_{i,j}$	Coeficiente estequiométrico da espécie $i$ na $j$ -ésima reação para os reagentes
$v''_{i,j}$	Coeficiente estequiométrico da espécie $i$ na $j$ -ésima reação para os produtos
$\rho$	Massa específica da mistura, kg m <sup>-3</sup>
$\sigma$	Constante de Stefan-Boltzmann, W m <sup>-2</sup> K <sup>-4</sup>
$\sigma_{s\eta}$	Coeficiente de espalhamento, m <sup>-1</sup>
$\hat{\tau}$	Tensor das tensões, N m <sup>-2</sup>
$\varphi$	Ângulo azimutal, rad

$\chi$	Convergência da solução da faixa assintótica
$\dot{\omega}_i$	Termo fonte devido às reações químicas, $W \text{ m}^{-3}$

### **Super-índices**

'	Reagentes
"	Produtos e grandezas por unidade de área
·	Grandeza por unidade de volume

### **Sub-índices**

$b$	Propriedade de corpo negro e sentido inverso de reação
$f$	Sentido direto de reação
$i$	Espécie química e espécie participante
$j$	Espécie química, reação e gás cinza
$\eta$	Propriedade de corpo negro

# 1 INTRODUÇÃO

Atualmente a maior parte da oferta de energia no mundo é proveniente, direta ou indiretamente, dos diferentes processos de combustão. Apesar do desenvolvimento e maior aproveitamento de fontes alternativas, a perspectiva é que o panorama atual se mantenha nas próximas décadas, com a combustão sendo a principal fonte de conversão de energia e os combustíveis de origem fóssil ainda representando a maior parcela da oferta de energia disponível.

No Brasil, apesar da abundância em recursos hídricos, fontes renováveis representam menos da metade da oferta interna de energia (41,2% contra 13,7% em base mundial), de acordo com o relatório da Empresa Brasileira de Pesquisas (EPE, 2016). Dentre as fontes não-renováveis, petróleo e derivados (37,3%) e gás natural (13,7%) são os principais combustíveis utilizados para a conversão de energia. Segundo o mesmo relatório, os combustíveis fósseis representam 57,5% da matriz energética nacional e 22,1% da matriz elétrica. Deste modo, mesmo com todos os recursos naturais disponíveis, a demanda por energia no Brasil ainda é significativamente dependente da queima de combustíveis (sejam de origem fóssil ou não).

O fenômeno da combustão está presente, ainda, em diversas aplicações na indústria como em motores de combustão interna, caldeiras geradoras de vapor, fundição de metais, secadores, turbinas a gás, sistemas de *flaring* em refinarias e plataformas de petróleo, etc. Os gases gerados nesses processos emitem grande quantidade de radiação térmica devido às elevadas temperaturas (acima de 1000 K), tornando a transferência de calor por radiação o principal mecanismo de transferência de calor.

Embora a radiação térmica seja significativa, constitui apenas uma parte do fenômeno global de combustão. São ainda relevantes o regime mecânico do escoamento (laminar ou turbulento), a cinética química, convecção, formação de fuligem, entre outros, estando todos fortemente acoplados. Dentre as dificuldades na modelagem da radiação térmica está o comportamento espectral complexo das propriedades radiativas do meio. Para gases típicos da combustão como o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e o vapor de água ( $\text{H}_2\text{O}$ ), que participam das trocas radiativas absorvendo e emitindo energia, o comportamento altamente irregular do coeficiente de absorção com relação ao número de onda, concentrações das espécies participantes e da temperatura constitui por si só um campo de pesquisa científica.

Simulações multidimensionais que resolvam o regime mecânico do escoamento empregando mecanismos detalhados de cinética química, modelos para a formação de fuligem e modelos detalhados para a modelagem espectral da radiação térmica podem ser proibitivas do ponto de vista computacional até mesmo para fins de pesquisa científica. Ainda, o forte acoplamento entre os fenômenos envolvidos constitui-se um grande desafio quanto à convergência da solução numérica. Deste modo, diversos estudos focam em modelagens de certos fenômenos utilizando uma abordagem mais simplificada ou até mesmo negligenciando outros.

Com o significativo avanço das ferramentas computacionais e o desenvolvimento de códigos CFD (*Computational Fluid Dynamics*), tais como o Fluent, StarCD e CFX, as simulações numéricas têm ganho cada vez mais espaço alternativamente ou em complemento a experimentos. Abordagens experimentais podem ser, além de dispendiosas e demoradas, impraticáveis por questões de complexidade e/ou escala. Códigos CFD apresentam como vantagem a facilidade em se trabalhar com geometrias complexas, malhas não-estruturadas, e empregar, de forma simples, diferentes modelos e condições de contorno. O pacote Fluent, por exemplo, permite ao usuário customizar a solução a partir de rotinas de usuário (UDF: *user-defined functions*) possibilitando alterar modelos, condições de contorno, propriedades de materiais, entre outras possibilidades. O estudo numérico de chamas é, portanto, além de um campo fértil de pesquisa científica, uma importante alternativa para aplicações de desenvolvimento e otimização na indústria.

O presente trabalho apresenta um estudo numérico da transferência radiativa em chamas laminares de metano diluídas com  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$ . A cinética química foi modelada de acordo com as equações de Arrhenius empregando o mecanismo de cinética química *skeleton skm-DRM19* e propriedades termodinâmicas e de transporte complexas. Para a modelagem da radiação térmica foi empregado o método das ordenadas discretas (DOM: *Discrete Ordinates Method*) acoplado ao modelo da soma-ponderada-de gases-cinza (WSGG: *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) com coeficientes atualizados a partir da base de dados espectrais HITEMP2010 [Dorigon et al., 2013]. Para fins de comparação, o modelo de gás cinza (GG: *Gray Gas*) com coeficientes obtidos com a base de dados espectral HITEMP2010 e levando em consideração a composição do meio para o cálculo do coeficiente de absorção [Cassol et al., 2014] também foi implementado. A simulação foi realizada com o código CFD comercial ANSYS/Fluent e os resultados obtidos, comparados com dados experimentais para o fluxo de calor radiativo e

fração radiante [Machado, 2015]. O acoplamento dos modelos espectrais com o Fluent foi realizado através de funções de usuário. As UDF desenvolvidas foram validadas comparando os resultados para fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo com a solução linha-por-linha (LBL: *line-by-line*) para o problema unidimensional de placas planas infinitas com perfis prescritos de temperatura e fração molar das espécies participantes conforme apresentado por Dorigon et al., 2013.

## 1.1 Revisão da literatura

A seguir, serão apresentados diversos trabalhos disponíveis na literatura envolvendo a modelagem da radiação térmica e sua aplicação no processo de combustão. Foram escolhidos estudos em chamas laminares unidimensionais e chamas multidimensionais laminares e turbulentas. Por fim serão apresentados estudos sobre modelos espectrais onde não foi feita a aplicação direta na modelagem da combustão, focando na comparação e desenvolvimento dos modelos.

Estudos com chamas unidimensionais são importantes porque podem, entre outras vantagens, auxiliar na compreensão de características de chamas multidimensionais. Os efeitos combinados da radiação e da pressão na velocidade de chama e no limite de flamabilidade foram estudados numericamente em chamas unidimensionais pré-misturadas de  $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{CO}_2$  por Ruan et al., 2001. Foram empregados os modelos *statistical narrow band* (SNB) e *optically thin model* (OTM) para a modelagem espectral da radiação térmica. Os efeitos da radiação mostraram-se mais significativos para maiores pressões e concentrações do diluente na corrente de oxidante. O modelo SNB mostrou-se mais efetivo na predição dos efeitos apresentando melhores resultados para a determinação do limite de flamabilidade e da velocidade de chama quando comparado com dados experimentais.

Efeitos da diluição na velocidade de propagação e no limite de extinção em chamas laminares de metano/ar foram estudados experimental e numericamente por Qiao et al., 2010, He, Ar,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  foram utilizados como diluentes. O experimento foi realizado em uma câmara de combustão esférica em queda livre de 1 m. As simulações numéricas foram realizadas com o módulo de chamas esféricas do COSILAB e, para a chama planar, com o código PREMIX. Em ambas as simulações o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0 foi adotado. Para a modelagem da radiação foram empregados os modelos *optically*

*thin approximation* (OTA) e o *discrete transfer method* (DTM) combinado com o modelo *wide band* modificado para o tratamento das propriedades espectrais. Todos os diluentes reduziram a velocidade da chama com o aumento da concentração, sendo  $N_2$  e  $CO_2$  os mais efetivos. A abordagem com o método DTM combinado com o modelo *wide band* apresentou melhor concordância com os dados experimentais principalmente em condições próximas ao limite de extinção. Com o aumento da concentração de  $CO_2$  ambos os modelos de radiação apresentam resultados menos precisos, indicando para a necessidade de modelos mais sofisticados para o tratamento das propriedades espectrais no estudo de chamas diluídas. Em outro estudo numérico/experimental, Zhang et al., 2016, avaliaram os efeitos da diluição de  $CO_2$  e  $N_2$  na velocidade de chama e na emissão de poluentes em chamas laminares de metano/ar. A técnica *travelling thermocouple* foi utilizada para medir o perfil de temperatura em chamas estabilizadas em um queimador plano McKenna. A solução numérica foi obtida com o código PREMIX. O mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0 foi adotado. A solução das espécies químicas foi obtida baseada nos perfis de temperatura medidos. As chamas diluídas com  $N_2$  apresentaram temperaturas relativamente maiores que as chamas diluídas com  $CO_2$ . A adição de diluente aumentou a espessura da zona de reação (sendo o efeito mais evidente para o  $CO_2$ ). O aumento da diluição diminuiu a velocidade de chama e a diluição com  $CO_2$  mostrou-se mais eficiente na inibição da emissão de NO se comparado com as chamas diluídas com  $N_2$ .

Kim et al., 2016, apresentaram um estudo computacional de chamas de contracorrente em condições de oxi-combustão diluídas com  $CO_2$  para investigar o impacto da perda radiativa e o efeito químico da diluição de  $CO_2$  na corrente de oxidante na extinção e formação de  $NO_x$  causada pela infiltração de ar. Foi adotada a aproximação OTA para a radiação e o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0. Os efeitos químicos do  $CO_2$  foram avaliados a partir de uma espécie fictícia com as mesmas propriedades, porém totalmente inerte. Para as chamas com diluição de  $N_2$ , a perda por radiação não teve efeito significativo na concentração de diluente para a extinção em chamas com baixa taxa de deformação. Para as chamas com  $CO_2$  e ar infiltrado, os efeitos da perda radiativa foram significativos na concentração de diluente para a extinção. A formação de  $NO_x$  foi suprimida significativamente pela perda radiativa e efeitos químicos da adição de  $CO_2$ .

A formação de fuligem em chamas de contracorrente de etileno/ar foi estudada numericamente por Hernández et al., 2013. A cinética química foi modelada empregando o

mecanismo detalhado UDEL, um modelo semi-empírico de duas equações para a formação de fuligem e o método das ordenadas discretas (DOM: *discrete ordinates method*) acoplado com o modelo espectral *Statistical narrow band correlated-k* (SNBCK) para a modelagem da radiação térmica. A radiação emitida pela fuligem se mostrou predominante frente à radiação emitida pelos gases e as perdas por radiação resultaram em uma diminuição da temperatura e consequentemente da concentração de fuligem uma vez que sua taxa de formação é reduzida.

Embora estudos em chamas unidimensionais sejam muito importantes e computacionalmente mais viáveis, a interação entre a transferência de calor e as reações químicas em sistemas de combustão necessita que sejam realizados estudos em geometrias multidimensionais. Mesmo com o grande avanço dos recursos computacionais, simulações tridimensionais de sistemas de combustão envolvendo cinética química detalhada e os processos de transferência de calor podem ser muitas vezes inviáveis. Nesse sentido, estudos em geometrias bidimensionais e axissimétricas de sistemas com um co-escoamento anular (*coflow*) se tornam factíveis. Assim como as chamas de contracorrente, o sistema de *coflow* pode ser usado para avaliar tanto chamas não pré-misturadas quanto chamas parcialmente e pré-misturadas.

O efeito do nível da pré-mistura foi estudado de modo numérico experimental por Bennett et al., 2000, em chamas de metano/ar variando a razão de equivalência com o objetivo de avaliar o efeito do nível de pré-mistura na estrutura da chama. O modelo computacional inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 2.11 e a aproximação para meios opticamente finos (OTA) para a radiação térmica. Resultados mostraram que todas as chamas estudadas apresentaram pelo menos uma frente de chama externa não pré-misturada e, ao aumentar a razão de equivalência, uma frente interna pré-misturada. A liberação de calor na frente externa da chama diminuiu com a diminuição do nível de pré-mistura, enquanto, para a frente interna, a liberação de calor aumentou (esse efeito possui influência sobre a temperatura ao longo da linha de centro, fazendo com que apareça um “ombro” no seu perfil). A temperatura máxima na linha de centro aumentou conforme o aumento do nível de pré-mistura enquanto a posição em que a máxima temperatura ocorre diminuiu. Em estudo semelhante, Claramunt et al., 2004, estudaram computacionalmente os efeitos da pré-mistura em chamas laminares de metano em ar. O modelo computacional inclui diversos mecanismos de cinética química e a aproximação OTA para a modelagem da radiação térmica. Um estudo de qualidade de malha baseado na

abordagem *grid convergence index* (GCI) foi realizado. A emissão de poluentes se mostrou sensível a escolha do mecanismo de cinética química e a temperatura e o comprimento de chama se mostraram sensíveis à abordagem para a difusão mássica e propriedades de transporte. Os resultados apontaram, ainda, para a necessidade de uma abordagem detalhada da radiação para a predição do campo de temperatura e emissão de poluentes.

Abordagens puramente experimentais ou em complemento a abordagens numéricas para o estudo de chamas multidimensionais são importantes para gerar dados que possam servir para validar diferentes abordagens para o problema. Em uma abordagem numérica e experimental, McEnally et al., 2000, realizaram um estudo de uma chama laminar não pré-misturada de metano/ar. Para inibir a formação e influência da fuligem, o combustível foi diluído em nitrogênio. O modelo numérico inclui um mecanismo detalhado de cinética química e a aproximação OTA para a radiação térmica. As medidas experimentais foram realizadas com as técnicas *Rayleigh-Raman Imaging*, termopares e *on-line mass spectrometry*. A distribuição espacial da temperatura concordou muito bem com os dados experimentais. O ponto onde a máxima temperatura ocorre ao longo da linha de centro concordou de forma razoável e a maior discrepância foi vista na temperatura da parte fria da chama pelas medidas com termopar. Para as espécies químicas, tanto a distribuição espacial quanto as concentrações concordaram muito bem.

A despeito da dificuldade em se realizar experimentos em condições de gravidade zero, Zhang et al., 2014, realizaram experimentos em condições de microgravidade ( $\mu\text{g}$ ) e gravidade terrestre (1g) com o objetivo de avaliar os efeitos da velocidade do *coflow* no comprimento de chama e diâmetro máximo da chama, oscilação, cor e perda radiativa. Resultados apontaram que as características das chamas de  $\mu\text{g}$  são significativamente afetadas pela velocidade do ar no *coflow*, enquanto que para as chamas de 1g esse efeito é mínimo. O aumento da velocidade do *coflow* foi acompanhado de uma diminuição do diâmetro da chama. As chamas de  $\mu\text{g}$  não apresentaram oscilação, já as chamas de 1g apresentaram um aumento da frequência de oscilação e diminuição da amplitude com o aumento da velocidade do *coflow*. O tempo de residência para a fuligem reduziu com o aumento da velocidade do *coflow* nas chamas de  $\mu\text{g}$ . Comparativamente a perda radiativa é menor nas chamas de 1g com um tempo de residência para a fuligem muito menor.

A formação de fuligem em chamas laminares é amplamente estudada e sob diversas abordagens, por exemplo, comparando dados experimentais com resultados obtidos a partir de

modelos computacionais. Nesse sentido, Sivathanu e Gore, 1997, realizaram uma simulação acoplada da radiação e formação de fuligem em uma chama laminar de metano/ar. O termo fonte radiativo foi obtido pelo *Multiray method* acoplado com o modelo *Narrow band*. Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais obtidos com a técnica *Laser-induced incandescence* (LII) para a fração volumétrica de fuligem. Resultados mostraram que para a chama estudada, as espécies participantes ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ) dominaram a radiação em comparação com a fuligem em uma ordem de grandeza, aproximadamente. As perdas por radiação influenciam fortemente a concentração de fuligem na chama uma vez que afetam o campo de temperatura, diminuindo a taxa de formação. Ainda nessa linha de comparação entre dados experimentais e resultados numéricos, Liu et al., 2004, apresentaram um estudo do efeito da radiação térmica em uma chama laminar não pré-misturada de metano em ar considerando fuligem. O modelo numérico inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0 sem as reações de formação de  $\text{NO}_x$ , um modelo semi-empírico baseado no acetileno para a formação da fuligem e os modelos OTA e SNBCK para o tratamento espectral da radiação térmica. As distribuições de temperatura e fração volumétrica de fuligem, o valor máximo da fração volumétrica de fuligem e o comprimento de chama visível apresentaram boa concordância com dados experimentais da literatura. O uso de modelos aproximados de radiação mostrou impacto significativo na formação e oxidação de fuligem. Os efeitos de absorção da radiação mostraram-se menores se comparados com chamas mais fuliginosas.

Os efeitos da radiação térmica na formação de fuligem e na estrutura de chamas laminares de etileno/ar em condições de  $\mu\text{g}$  e  $1\text{g}$  foram estudados por Liu et al., 2011. O método numérico inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0 sem as reações relacionadas com a formação de  $\text{NO}_x$ , um modelo para a formação de fuligem semi-empírico de duas equações baseado no acetileno e o modelo SNBCK para a modelagem espectral da radiação térmica. Os resultados mostraram que a perda por radiação tem grande impacto na estrutura da chama diminuindo a temperatura, aumentando o comprimento visível e diminuindo a concentração de fuligem, sendo os efeitos mais significativos para chamas de  $\mu\text{g}$ . Em outro estudo, Demarco et al., 2013, avaliaram os efeitos da transferência radiativa na formação de fuligem em chamas laminares normais e inversas. Foram utilizados como combustíveis hidrocarbonetos de até 3 carbonos em condições de  $\mu\text{g}$  e  $1\text{g}$ . O modelo numérico inclui o modelo *steady laminar flamelet* (SLF) para a integração da cinética

química, um modelo semi-empírico baseado no acetileno e no benzeno para a formação de fuligem e o modelo SNBCK para a modelagem espectral da radiação térmica. Os resultados para os campos de velocidade, temperatura e para a fração volumétrica de fuligem e perda radiativa mostraram concordância com dados experimentais disponíveis na literatura. Para a determinação dos campos de temperatura e da fração volumétrica de fuligem é fundamental a escolha do modelo de radiação, sendo mais importante para as chamas de  $\mu\text{g}$  onde os efeitos da perda radiativa são maiores. Ainda no estudo da fuligem em chamas de  $\mu\text{g}$  e  $1\text{g}$ , Ma et al., 2015, investigaram o comportamento da fuligem em chamas laminares de metano. O modelo computacional inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0, o modelo *sectional aerosol* para a formação de fuligem e a aproximação OTA para a radiação térmica. Em comparação, as chamas de  $\mu\text{g}$  são mais longas e largas que as chamas de  $1\text{g}$  e possuem uma maior fração volumétrica de fuligem. Os resultados mostraram, ainda, que a distribuição de fuligem se deslocou da linha de centro para a chama de  $1\text{g}$  para a região externa da chama (*wings*) nas chamas de  $\mu\text{g}$ . Os dados numéricos concordaram com experimentos para a predição da estrutura da chama e do deslocamento da distribuição de fuligem, entretanto os valores para a concentração de fuligem foram subestimados.

Uma vez que simulações detalhadas da cinética química envolvem dezenas de espécies químicas e centenas de reações elementares, a demanda numérica pode se tornar muito grande. Portanto, diversos estudos têm sido desenvolvidos no sentido de empregar métodos de redução da integração da cinética química, com especial destaque para a técnica de *flamelets*. Dentro dessa linha, Messig et al., 2013, realizaram um estudo numérico com o objetivo de avaliar diferentes abordagens na modelagem da radiação para os modelos *Lagrangian Flamelet* e *Eulerian Flamelet* comparando os resultados com os obtidos pela solução das equações de transporte. A solução numérica com as equações de transporte foi validada a partir de dados experimentais disponíveis na literatura [Bennett et al., 2000]. Kim e Kim, 2015, utilizaram o método *interactive transient flamelet* (ITF) para simular realisticamente processos lentos como a formação de fuligem e a radiação térmica em chamas laminares não pré-misturadas com tempo de residência relativamente longo. O método numérico inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 2.11 e um modelo semi-empírico de duas equações para a formação de fuligem. A radiação térmica para os gases é modelada com a aproximação OTA e para a fuligem como função da fração volumétrica e da temperatura. Os resultados numéricos foram validados comparando os resultados com os obtidos a partir da

solução das equações de transporte e dados experimentais da literatura. A formação de fuligem foi simulada de forma acoplada e desacoplada da cinética dos gases. Os resultados numéricos apresentaram boa concordância com os dados experimentais. A radiação térmica mostrou-se significativa para a correta predição da fuligem mesmo em chamas de metano onde a concentração é pequena.

Garten et al., 2013 apresentaram um estudo numérico de uma chama laminar de oxidação parcial de metano com o objetivo de avaliar diferentes abordagens para a radiação térmica. As solução numérica obtida com o código CFD *open source* OpenFOAM. Para a solução espacial da RTE foram adotados os métodos DOM, *modified differential approximation* (MDA), harmônicas esféricas (P1) e OTA. Os modelos espectrais adotados foram o *spectral line based weighted-sum-of-gray-gases* (SLW), *weighted-sum-of-gray-gases* (WSGG) com as correlações geradas por Kangwanpongpan et al., 2012, *gray absorption* (RADCAL) e um coeficiente de absorção constante baseado no modelo SLW. Para a chama de oxidação parcial, o oxidante entra por um duto central ( $O_2$  puro) enquanto combustível ( $CH_4/CO_2$ ) entram pelo escoamento coaxial. O modelo numérico inclui uma versão reduzida do mecanismo detalhado GRI-Mech 3.0 com 28 espécies e 112 reações. Também foi realizada a simulação de uma chama difusiva de metano (apresentada por Bennett et al., 2000) onde o mecanismo GRI-Mech 1.2 foi adotado. Os efeitos da absorção mostraram-se importantes causando impacto no termo fonte radiativo para a chama de oxidação parcial. O modelo OTM não foi capaz de capturar esse efeito, enquanto os métodos MDA e P1 acoplados aos modelos SLW e WSGG apresentaram resultados coerentes para o campo de temperatura, sendo o modelo SLW mais preciso. Para a chama de metano/ar os efeitos da radiação são bem estimados com modelos mais simples como o OTM, uma vez que é uma chama opticamente fina.

Os efeitos da diluição na corrente de combustível e oxidante também é objeto de investigação, com interesse nos efeitos sobre a estrutura da chama, transferência radiativa, formação de fuligem, entre outros. Guo et al., 2010, apresentaram um estudo numérico da diluição de  $N_2$ ,  $CO_2$  e Ar na corrente de oxidante no levantamento de chamas laminares de metano/ar em uma câmara de combustão. Os resultados obtidos foram comparados com dados numéricos previamente obtidos. O modelo numérico inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0 e o método DOM acoplado com o modelo SNBCK para a modelagem da radiação térmica. Com a adição de diluentes a temperatura de chama foi

reduzida. Os resultados obtidos mostraram que a adição de  $N_2$  afetou o levantamento por efeitos de diluição; a adição de  $CO_2$  afetou por efeitos de diluição, térmicos e químicos (sendo a diluição o mais efetivo entre os três efeitos); e a adição de Ar afetou por efeitos de diluição, térmico e químico (tendendo a um equilíbrio entre os efeitos de diluição e térmico e químico combinados, fazendo com que o Ar apresente maior razão de concentração para que ocorra o levantamento de chama).

Em outro estudo, Fuentes et al., 2013, investigaram os efeitos da concentração de oxigênio na corrente de oxidante (composta por  $O_2$  e  $N_2$ ) sobre o comprimento de chama, a formação e oxidação de fuligem, *smoke point*, e a distribuição axial do fluxo de calor radiativo em chamas laminares de etileno/ar. Dados experimentais foram comparados com previsões feitas pelo modelo numérico que inclui um mecanismo detalhado de cinética química com 70 espécies químicas e 463 reações elementares e o modelo SNBCK para a modelagem espectral da radiação térmica. Os resultados mostraram que a formação de fuligem aumenta junto com o índice de oxigênio no oxidante, levando a uma maior fração volumétrica e um aumento do máximo fluxo de calor radiativo.

A partir de uma abordagem numérica e experimental, Cao et al., 2015, estudaram os efeitos da diluição de combustível, velocidade de entrada e da gravidade na forma e estrutura de chamas laminares de metano em ar. O modelo computacional inclui o mecanismo detalhado de cinética química GRI-Mech 3.0 e o modelo *sectional aerosol* para a fuligem, bem como a aproximação OTA para o tratamento da radiação térmica. Resultados mostraram que o comprimento de chama é proporcional à vazão mássica de combustível e, de um modo geral, que as chamas de  $\mu g$  são mais longas que as chamas de  $1 g$ . Em outro estudo numérico e experimental, Liu et al., 2015, avaliaram os efeitos da diluição de  $CO_2$  e  $N_2$  na corrente de combustível na formação de fuligem e na estrutura de chamas de  $C_2H_5$ /ar sob pressões entre 5 e 20 atm. Para a realização dos experimentos foi mantida constante a vazão de combustível a uma diluição constante de 1:2 (combustível:oxidante, por massa). Os perfis radiais de temperatura e de fração volumétrica de fuligem foram medidos com a técnica *Spectral soot emission* (SSE). O modelo numérico inclui o emprego de dois mecanismos de cinética química (DLR e ABF), um modelo *sectional* para a formação de fuligem e o método DOM acoplado ao modelo SNBCK para a radiação térmica. Os resultados mostraram que a forma da chama é fortemente afetada pela pressão. Para a chama de  $CO_2$  a formação de fuligem mostrou-se maior para maiores pressões. O comprimento de chama visível medido foi

ligeiramente maior para chamas de  $N_2$ . Conforme se aumentou a pressão, a temperatura da chama diminuiu enquanto a variação de temperatura na chama aumentou. A máxima fração volumétrica de fuligem aumentou significativamente com o aumento da pressão. O mecanismo de cinética química DLR não capturou de forma satisfatória o efeito químico da diluição de  $CO_2$ , enquanto que o mecanismo ABF obteve maior concordância com os aspectos medidos. A diluição com  $CO_2$  foi mais efetiva que a diluição com  $N_2$  na supressão da fuligem para altas pressões. Os efeitos químicos do  $CO_2$  foram estudados acrescentando uma espécie fictícia  $FCO_2$  com mesmas propriedades do  $CO_2$ , entretanto totalmente inerte.

Uma vez que chamas turbulentas são frequentemente encontradas em equipamentos de combustão, o estudo do escoamento reativo turbulento é muito importante e as interações entre a turbulência/cinética química/radiação são ainda objeto de ampla pesquisa científica.

A chama turbulenta conhecida como *flame D*, largamente estudada numericamente e para qual há diversos dados experimentais disponíveis [Bergmann, 1998; Meier et al., 2000; Schneider et al., 2003] foi estudada por Coelho, 2004, onde foram utilizadas diversas abordagens para a radiação térmica: foram adotados os métodos DOM e *Ray tracing* para a solução da RTE acoplados com os modelos *correlated-k* (CK) e SNB para o tratamento das propriedades espectrais. O modelo numérico inclui ainda diversas abordagens de TRI (*turbulence-radiation interaction*). Foram realizadas simulações desacopladas da radiação usando campos medidos experimentalmente para a temperatura e espécies químicas. Os campos foram então interpolados a partir dos dados experimentais para gerar a distribuição. Os resultados indicaram que o TRI tem importante influencia na perda radiativa e ambos os modelos apresentam resultados bons para a chama estudada (*optically thin*). Em outro estudo para a mesma chama, Bidi et al., 2008, realizaram simulações para analisar as influências da radiação térmica. O método DOM acoplado ao modelo WSGG foi adotado para a modelagem da radiação, o modelo k- $\epsilon$  para a turbulência e um mecanismo global de 5 passos para a cinética química. Os resultados obtidos mostraram que a temperatura máxima diminui quando a radiação é considerada e a região de maior temperatura se torna mais ampla. Considerando a radiação, ao longo da linha de centro, a temperatura máxima diminui e os valores se aproximam dos dados experimentais. Os valores computados para as espécies químicas também se aproximam dos dados experimentais quando as perdas por radiação são consideradas.

Hu e Yan, 2013, apresentaram um estudo numérico da transferência de calor por radiação na oxi-combustão de carvão. O objetivo do estudo é avaliar a relação entre a reciclagem dos gases da combustão e a concentração efetiva de  $O_2$ , o efeito do coeficiente de absorção na transferência radiativa e as características da radiação incidente e intensidade de radiação sob diferentes condições de operação (oxi-combustão e combustão em ar). Os cálculos foram realizados com o código CFD comercial ANSYS/Fluent 13.0. Dados experimentais foram obtidos com o *0,5MW combustion test facility* (OTF). O modelo numérico inclui ainda o modelo k- $\epsilon$  para a turbulência, um modelo de devolatilização do carvão e um mecanismo global de 2 passos para os gases ( $CO_2$  e  $H_2O$ ). Para emular a reciclagem dos gases da combustão supõe-se que o escoamento secundário seja composto por  $O_2$  e  $CO_2$ . O tratamento da radiação térmica é feito com o método DOM acoplado ao WSGG (Smith et al., 1982 e Yin et al., 2010), um coeficiente de absorção constante e um coeficiente de espalhamento de  $0,2\text{ m}^{-1}$ . O modelo WSGG de Yin et al., 2010 prediz bem intensidade de radiação, enquanto o WSGG Smith subestima os valores. Para o coeficiente de absorção constante foi encontrada uma concordância aceitável. A intensidade de radiação aumenta com aumento da concentração efetiva de  $O_2$ .

Os efeitos da radiação térmica na simulação numérica de uma chama turbulenta não pré-misturada de metano/ar foi estudado por Centeno et al., 2014. O método DOM acoplado ao modelo WSGG com novas correlações obtidas a partir da base de dados espectral HITEMP2010 apresentadas por Dorigon et al., 2013 foi adotado para a modelagem da radiação térmica. O modelo k- $\epsilon$  foi empregado para a modelagem da turbulência e um mecanismo global de dois passos para a cinética química. Ainda foram considerados os efeitos da interação turbulência-radiação (TRI). Resultados apontaram para a influência da radiação na temperatura, no termo fonte radiativo e no fluxo de calor na parede, enquanto efeitos sobre as concentrações das espécies químicas mostraram-se desprezíveis. Os resultados numéricos concordam bem com dados experimentais da literatura (quando considerada a radiação na modelagem). A influência do TRI ainda mostrou-se maior em resultados globais, tais como a temperatura máxima e a fração radiante para a chama estudada. Em outro estudo, Centeno et al., 2016, avaliaram os efeitos da fuligem na transferência radiativa em uma câmara de combustão cilíndrica. Para a integração da RTE foi adotado o método DOM acoplado ao modelo WSGG [Cassol et al., 2014] com correlações obtidas a partir da base de dados espectral HITEMP2010. Efeitos de TRI são incluídos na

análise. Para fins de comparação a solução LBL é obtida a partir dos campos convergidos com o modelo WSGG. O modelo numérico inclui, ainda, um mecanismo global de 2 passos para a cinética química e um modelo de formação de fuligem. Um estudo de qualidade de malha foi realizado utilizando a abordagem GCI. Os resultados obtidos mostram que a fuligem aumenta a emissão de radiação na chama e possui pouco efeito nas concentrações das espécies participantes. Para a temperatura a maior diferença foi observada na região de maior concentração de fuligem. O fluxo de calor radiativo aumentou com a fuligem na região de maior concentração. A perda radiativa (e fração radiante, conseqüentemente) aumentou com a inclusão da fuligem. A solução desacoplada apresentou boa concordância entre os modelos WSGG e LBL com a inclusão da fuligem reduzindo o erro entre as soluções. O modelo WSGG é mais eficiente computacionalmente se comparado ao LBL, porém apresenta menor precisão.

Ainda, Centeno et al., 2015, simularam a transferência radiativa em uma câmara 2D axissimétrica com misturas não-isotérmicas/homogêneas de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O usando diferentes abordagens para o modelo WSGG. As abordagens consistem de correlações para razões constantes [Dorigon et al., 2013] de pressão parcial das espécies participantes e para razões arbitrárias [Cassol et al., 2014]. As correlações para ambas as abordagens foram obtidas com a base de dados espectral HITEMP2010. Foram realizadas comparações com a solução exata LBL. A RTE foi resolvida com o método DOM acoplado ao modelo espectral. Os erros máximos encontrados ficaram em torno de 8% para ambos os modelos WSGG para o termo fonte radiativo. O modelo para razões arbitrárias apresenta resultados levemente mais precisos (devido à melhor captura da variação local da razão de concentração). Os erros médios ficaram abaixo de 2%. O fluxo de calor radiativo teve com boa concordância com a solução LBL. Ambas as abordagens para o modelo WSGG são mais eficientes do ponto de vista do tempo computacional se comparadas com a solução LBL, entretanto o WSGG para razões arbitrárias possui uma demanda maior que o WSGG para razão constante.

Pal et al., 2015 apresentaram um estudo da precisão e do tempo computacional para diversos modelos de radiação na simulação de chamas turbulentas difusivas tipo jato. Foram simuladas chamas luminosas e não luminosas (*flame D*). O método numérico inclui o modelo *standard* k-ε para a modelagem da turbulência, e o *composition PDF method* para a integração da cinética química. Foram utilizados os métodos de solução da RTE P1, P3, FVM/DOM, *photon monte Carlo method* (PMC) acoplado a base de dados LBL e diversas abordagens do

modelo FSK para as propriedades espectrais. Para chamas opticamente finas (*optically thin*) todos os modelos espectrais e métodos de solução da RTE apresentam bons resultados, podendo aplicar abordagens mais simples, como P1 acoplado com um modelo de gás cinza ou a aproximação OTA. Para chamas opticamente espessas (*optically thick*) o método de solução da RTE possui maior impacto na radiação se comparado com a escolha do modelo espectral. Os modelos de radiação e TRI possuem ainda grande efeito na formação de NO, reduzindo sua concentração em ordens de magnitude.

Os efeitos da diluição de CO<sub>2</sub> na temperatura, composição da mistura e emissão em chamas turbulentas não pré-misturadas de metano/ar foi apresentado por Erete et al., 2016. A diluição de CO<sub>2</sub> foi feita mantendo a vazão do combustível constante até chegar ao ponto de extinção. Resultados apontam que a diluição aumenta o levantamento e diminui o comprimento de chama, bem como reduz a temperatura e as concentrações de NO<sub>x</sub>. A luminosidade também diminui com aumento da diluição. O *blow-out* se mostrou sensível ao nível de diluição. O CO<sub>2</sub> é um diluente efetivo para inibir a formação de fuligem, reduzir a temperatura da chama e concentração de NO<sub>x</sub>. Ainda com o aumento da diluição, houve um aumento nas emissões de CO, e redução nas emissões de NO<sub>x</sub>.

Estudos caracterizando chamas de *flares*, de modo geral, utilizam como combustível metano e gás natural. Nesse sentido, Aboje et al., 2015, realizaram um estudo numérico/experimental de chamas de metano e propano operando sob condições semelhantes. Comparações entre comprimento de chama, temperatura, concentração de NO<sub>x</sub> e CO e efeitos da espessura do bocal do combustível no levantamento da chama foram realizadas. A solução foi obtida com o código CFD comercial ANSYS/Fluent. O modelo numérico inclui o modelo k-ε para a modelagem da turbulência, o modelo *laminar flamelet model* para cinética química, o método DOM para a solução da RTE e o modelo de Moss e Brookes (disponível no Fluent) para a formação de fuligem. Os mecanismos de cinética química adotados foram o CRECK para o propano e o GRI-Mech 3.0 para o metano. Os resultados obtidos mostraram que a chama de propano é mais longa e possui menor temperatura máxima devido a concentração de fuligem. O maior índice de emissão de NO<sub>x</sub> foi encontrado para a chama de metano. A solução numérica apresentou índice maior de CO para a chama de metano enquanto dados experimentais apontaram índice maior para a chama de propano. O maior levantamento foi observado para a chama de metano devido ao aumento da espessura do bocal do combustível.

Estudos envolvendo modelos espectrais para o tratamento da radiação térmica são importantes para o desenvolvimento de modelos a partir da geração de novas correlações e novas abordagens. Nesse sentido, destacam-se diversos trabalhos que fizeram uso da base de dados espectrais HITEMP2010 para a obtenção de novas correlações para o modelo WSGG [Kangwanpongpan et al., 2012; Dorigon et al., 2013; Cassol et al., 2014; Bordbar et al., 2014; Guo et al., 2015].

Kangwanpongpan et al., 2012, geraram correlações para o modelo WSGG para temperaturas entre 400-2500 K e frações molares de  $H_2O$  e  $CO_2$  entre 0,125-4 e *pressure path-lengths* entre 0,001 e 60 bar.m. Os resultados foram validados comparando o termo fonte radiativo com a solução LBL para o problema unidimensional de placas planas infinitas com perfis prescritos de temperatura e concentrações das espécies participantes. Bordbar et al., 2014, apresentaram uma formulação levando em conta a fração molar das espécies participantes ( $H_2O$  e  $CO_2$ ), sendo mais preciso para meios não homogêneos. A fuligem foi negligenciada neste estudo. Para ambos os estudos a RTE foi resolvida com o método DOM acoplado com o WSGG adotado e os resultados obtidos foram comparados com outros WSGG disponíveis na literatura [Smith et al., 1982; Yin et al., 2010; Johansson et al., 2011] apresentando maior precisão para os casos estudados. Guo et al., 2015, apresentaram novos parâmetros para o modelo WSGG obtidos a partir da base de dados HITEMP2010 combinando características do modelo FSK com o WSGG, no qual os fatores de ponderação e os coeficientes de absorção são obtidos da distribuição k. O modelo é validado comparando termo fonte e o fluxo de calor radiativo com a solução LBL em um sistema unidimensional. Os casos estudados incluem meios não isotérmicos e/ou não homogêneos. Foram ainda realizadas comparações com outros WSGG disponíveis na literatura (Yin et al., 2010; Johansson et al., 2011; Kangwanpongpan et al., 2012] e o modelo SLW.

Dorigon et al., 2013, apresentaram coeficientes para misturas de  $H_2O$  e  $CO_2$  para razões de pressão parcial iguais a 1 e 2. Cassol et al., 2014, geraram correlações individuais para as espécies participantes ( $CO_2$  e  $H_2O$ ). Os coeficientes do modelo WSGG para a mistura foram gerados a partir da superposição das correlações individuais. O modelo WSGG a partir da superposição foi aplicado em misturas não-homogêneas de  $H_2O$ ,  $CO_2$  e fuligem. Ambos os modelos WSGG foram aplicados em casos teste unidimensionais não-isotérmicos e não-homogêneos e sua precisão foi avaliada comparando com os resultados obtidos com a solução *benchmark* LBL. Foram encontrados resultados com boa concordância para o fluxo de calor

radiativo e o termo fonte com a solução LBL. Cassol et al., 2014, ainda compararam a abordagem da superposição com o modelo WSGG com as correlações de Dorigon et al., 2013, encontrando resultados mais precisos para meios não-homogêneos, uma vez que o modelo WSGG *standard* se aplica para razões fixas de concentração das espécies participantes, enquanto o modelo WSGG a partir da superposição se aplica para razões que variam localmente (cenário comum na combustão, por exemplo).

São comuns também estudos que realizam comparações entre modelos espectrais a fim de avaliar aspectos como a precisão e o tempo de cálculo. Porter et al., 2010, realizaram uma comparação entre os modelos espectrais FSCK e WSGG (abordagem cinza) para ambientes de combustão em ar e oxi-combustão. Para a solução da RTE foram empregados os métodos dos harmônicos esféricos (P1) e ordenadas discretas (DOM). Efeitos da quadratura numérica no tempo de cálculo também foram avaliados. A solução *benchmark* foi obtida com o método *Ray tracing* (RT) acoplado ao modelo espectral SNB. Para o modelo SNB foi adotada a base de dados HITRAN92, para o modelo FSCK as bases de dados HITEMP e CDSD-1000 e, para o modelo WSGG as correlações clássicas de Smith et al., 1982. O coeficiente de absorção de gás cinza para o WSGG foi obtido a partir da emissividade total do meio (pela lei de Beer) e a abordagem *mean beam length*. O modelo FSCK se mostrou mais preciso que o modelo WSGG em todos os casos estudados e principalmente em ambientes de oxi-combustão. De forma semelhante, Demarco et al., 2011, resolveram a RTE pelo método dos volumes finitos (FVM: *finite volume method*) em configurações 1D e 2D axissimétrica contendo misturas de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e fuligem com o objetivo de avaliar a precisão de diferentes modelos espectrais para a radiação térmica. Os modelos espectrais empregados foram o SNBCK, WSGG (com as correlações de Smith et al., 1982 com as abordagens *mean beam length* e *mean path length* para o coeficiente de absorção), FSCK, SLW, *gray-narrow-band* (GNB) e *gray-wide-band* (GWB). A solução *benchmark* foi obtida com o método *ray tracing* (RT) acoplado ao modelo SNB. Para soluções que necessitem de um alto grau de precisão é recomendado o uso do modelo SNBCK, entretanto os modelos FSCK e SLW foram os que apresentam a melhor relação precisão e custo computacional, sendo, portanto, mais recomendados para aplicações CFD. Clements et al., 2015, apresentaram um estudo com o objetivo de avaliar a precisão do modelo FSCK utilizando diferentes abordagens. Os cálculos foram realizados em meios de oxi-combustão. O modelo SNB foi usado como solução *benchmark*. Para fins de comparação foi adotada uma abordagem cinza para o modelo WSGG. Foram utilizadas as abordagens FSCK

e *full spectrum scaled k* (FSSK). A implementação foi realizada com o código CFD comercial Fluent v14.5 com rotinas de usuário UDF para a radiação. O modelo FSSK apresentou resultados mais precisos principalmente para meios com grande variação da concentração das espécies participantes.

Efeitos da pressão na radiação térmica foram estudados por Chu et al., 2015, que empregaram os modelos espectrais LBL, SNB, SNBCK, WSGG e FSSK para a solução do problema unidimensional de placas paralelas com o meio preenchido por misturas isotérmica/homogênea e não-isotérmica/homogênea. As bases de dados HITEMP2010 e CDS-1000 foram usadas no cálculo LBL que serviu de solução *benchmark*. Os cálculos SNB, SNBCK e FSSK usaram os parâmetros 1997 EM2C SNB e um recente *update* 2012 *parameters* para investigar a influência dos parâmetros em altas pressões. O modelo WSGG considerado foi apresentado por Bordbar et al., 2014, com as correlações obtidas a partir da base de dados HITEMP2010. A pressão total foi variada entre 1-30 atm. Os resultados mostram que a pressão afeta a radiação primariamente pelo aumento da densidade molecular e levemente pelo alargamento das linhas espectrais. O aumento da pressão aumenta a radiação tanto no fluxo radiativo como no termo fonte. Os resultados com os modelos SNB e SNBCK são praticamente os mesmos quando os mesmos parâmetros são utilizados. Os resultados SNB e SNBCK usando o 1997 EM2C SNB *parameters* apresentam erros em torno de 2% enquanto os resultados SNB e SNBCK usando o 2012 EM2C SNB *parameters* são levemente menos precisos e o erro relativo aumenta com a pressão. O modelo WSGG apresenta grandes erros no fluxo de calor radiativo nas regiões próximas das paredes. Os erros para o WSGG e o FSSK aumentam significativamente com o aumento da pressão.

Um importante fator para a precisão da solução obtida pelo modelo espectral está relacionado à base de dados espectrais adotada. Para processos de combustão, por exemplo, onde estão envolvidas altas temperaturas, é recomendado o uso da base de dados espectral HITEMP2010 [Rothman et al., 2010]. Chu et al., 2011, resolveram o problema unidimensional de placas planas paralelas infinitas com o meio preenchido por H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> ou mistura utilizando diferentes abordagens para a modelagem da radiação térmica a fim de se avaliar a dependência dos resultados com a base de dados espectrais adotada. Foi utilizado para a integração espectral da RTE o modelo LBL com as bases de dados HITEMP1995, HITRAN2004, HITRAN2008, HITEMP2010 e CDS-1000 e o modelo SNB com a base de dados EM2C *narrow-band*. Os resultados obtidos a partir da comparação da performance dos

modelos em diversos casos e da comparação com resultados da literatura apontaram para a influência da base de dados na performance da solução LBL, sendo recomendado o uso da base de dados espectrais HITEMP2010 para o H<sub>2</sub>O e o CO<sub>2</sub>. Assim, uma vez que cálculos LBL demandam muito esforço computacional e pode ser inviável, o modelo SNB pode ser usado como solução *benchmark* para problemas multidimensionais quando soluções LBL não estão disponíveis. Dado seu desempenho, a solução LBL com a base de dados HITEMP2010 pode servir de *benchmark* para avaliar a precisão de modelos espectrais aproximados.

## 1.2 Objetivos do trabalho

Embora existam diversos trabalhos na literatura empregando a modelagem da radiação térmica em chamas laminares, boa parte enfatiza os efeitos da radiação sobre outros aspectos, como a formação de fuligem e os impactos na estrutura da chama (temperatura, concentração das espécies da mistura, levantamento, entre outros). Poucos trabalhos tratam de aspectos da transferência radiativa como a fração radiante, termo fonte e fluxo de calor radiativo. Estudos com esse enfoque usualmente resolvem problemas unidimensionais e realizam comparações entre modelos.

Tendo em vista a versatilidade de aplicações CFD para a simulação de chamas laminares multidimensionais, o presente trabalho tem por objetivo avaliar a transferência radiativa na simulação detalhada de chamas não pré-misturadas laminares com diluição de CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> na corrente de combustível, comparando os dados obtidos da solução numérica com medidas experimentais realizadas por Machado, 2014, para a fração radiante e para o fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama. Deste modo, foram desenvolvidas rotinas de usuário (UDF) para a implementação do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) com as correlações apresentadas por Dorigon et al., 2013, no código CFD comercial ANSYS/Fluent.

A validação das rotinas UDF é realizada a partir de uma comparação dos resultados obtidos com os dados da solução LBL para o problema unidimensional de placas planas paralelas infinitas (tratadas como superfícies negras) preenchidas por um meio não-isotérmico e não-homogêneo com perfis prescritos de temperatura e concentração das espécies participantes (CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O).

Ainda, dado que a literatura aponta que para chamas opticamente finas (*optically thin*) a escolha do modelo espectral possui um impacto desprezível sobre resultados globais como o campo de temperatura e concentrações das espécies químicas, é realizada uma comparação entre os modelos WSGG e GG (conforme proposto por Cassol et al., 2014) a fim de verificar o impacto da escolha do modelo espectral na estrutura da chama e em aspectos da transferência radiativa como a fração radiante, fluxo de calor e termo fonte radiativo.

A principal contribuição do presente trabalho constitui-se na aplicação do modelo WSGG na simulação de chamas laminares bidimensionais comparando os resultados da simulação numérica com dados experimentais.

Para o grupo de pesquisa do Laboratório de Radiação Térmica (LRT/UFRGS) fica como principal contribuição o desenvolvimento e a validação da ferramenta computacional das rotinas UDF para a modelagem espectral da radiação térmica com o código ANSYS/Fluent. As rotinas desenvolvidas permitem uma modelagem mais precisa da transferência radiativa uma vez que os modelos empregados no código CFD são abordagens simplificadas e pouco precisas para aplicações como, por exemplo, o estudo de chamas multidimensionais laminares e turbulentas e ainda abrem a possibilidade de trabalhos em colaboração com o grupo de pesquisa do Laboratório de Combustão (LC/UFRGS).

### **1.3 Organização do texto**

A presente dissertação é dividida em sete capítulos principais. Este primeiro capítulo apresenta uma breve introdução e motivação ao estudo com a abordagem CFD da transferência de calor em chamas laminares, onde são apresentados os principais trabalhos disponíveis na literatura sobre estudos em chamas e transferência radiativa de um modo geral. Também são apresentados os principais objetivos do trabalho e a sua principal contribuição para o estudo numérico da transferência de calor por radiação.

No segundo capítulo é discutida a fundamentação física do problema do escoamento reativo em regime laminar. São descritas as equações de conservação pertinentes à modelagem do problema proposto, bem como as principais hipóteses e simplificações adotadas.

O terceiro capítulo apresenta a fundamentação teórica da radiação térmica. A RTE é introduzida e são descritos os modelos espectrais GG e WSGG empregados para o tratamento do coeficiente de absorção/emissão.

No quarto capítulo é descrito o problema físico estudado. É apresentada a abordagem experimental pela qual os dados de fluxo de calor radiativo e fração radiante foram obtidos, bem como o domínio computacional construído baseado no experimento e as condições de contorno do problema físico.

No quinto capítulo é apresentado o método numérico. O *solver* empregado pelo *software* ANSYS/Fluent é descrito, bem como as estratégias adotadas para a solução numérica e para a integração da cinética química. Ainda é discutida a construção das rotinas UDF e o estudo realizado para a validação do acoplamento com o código CFD. Por fim, é apresentada a abordagem e o estudo de qualidade de malha realizado.

No sexto capítulo são apresentados e discutidos os principais resultados obtidos a partir das simulações das chamas laminares com os modelos espectrais empregados e a comparação com os dados experimentais.

Finalmente, no sétimo capítulo, são apresentadas as principais conclusões do presente estudo e propostas de continuidade para a pesquisa desenvolvida.

## 2 MODELAGEM DE CHAMAS LAMINARES DIFUSIVAS

Chamas de difusão, também denominadas não pré-misturadas, são aquelas em que os reagentes estão inicialmente separados e a reação química ocorre na interface entre o combustível e o oxidante quando do encontro. Os processos de mistura e reação se dão, portanto, de forma simultânea. A chama de uma vela é um exemplo de uma chama não pré-misturada.

Chamas de difusão, diferentemente de chamas pré-misturadas, não possuem velocidade de propagação [Coelho e Costa, 2007]. Como a razão de equivalência varia desde 0 para a região do oxidante até  $\infty$  para a região do combustível, não há propagação da chama em direção ao combustível ou em direção ao oxidante, fazendo das chamas de difusão o tipo mais comum em equipamentos de combustão, uma vez que apresentam maior segurança.

A modelagem matemática do escoamento reativo em regime laminar é baseada na aplicação das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e massa das espécies químicas, bem como da cinética química e das propriedades termodinâmicas e de transporte.

### 2.1 Equações de conservação

#### 2.1.1 Equação de conservação da massa

A equação de conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, é expressa por

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

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

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

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

### 2.1.2 Equação de conservação da quantidade de movimento

A conservação da quantidade de movimento (ou *momentum*) é expressa pela equação de Navier-Stokes na sua forma compressível conforme

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

onde  $p$  é a pressão,  $\vec{g}$  é o vetor que representa as forças de campo e  $\hat{\tau}$  o tensor das tensões. Os termos do lado esquerdo da equação representam a derivada material da velocidade, ou seja, a aceleração de uma partícula de fluido. Os termos do lado direito representam as forças de pressão, as forças de campo e as forças viscosas por unidade de volume, respectivamente. Uma vez que o campo de pressão varia muito pouco em relação à pressão de referência (atmosférica), o termo representativo das forças de pressão pode ser negligenciado. Assumindo a hipótese de Stokes para um fluido newtoniano, o tensor das tensões pode ser escrito como

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

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $\hat{I}$  o tensor identidade.

### 2.1.3 Equação de conservação da massa das espécies químicas

A conservação da massa das espécies químicas pode ser expressa em termos da fração mássica para cada espécie para as  $N_s$  espécies envolvidas conforme a equação de transporte

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i + \dot{\omega}_i, \quad \text{para } i=1, N_s-1 \quad (2.5)$$

onde  $\vec{J}_i$  representa o vetor de difusão mássica e  $\dot{\omega}_i$  o termo fonte devido às reações químicas. De modo a garantir a conservação da massa, a fração mássica na espécie  $N_s$  (inerte  $N_2$ ) é calculada como

$$Y_{N_s} = 1 - \sum_{i=1}^{N_s-1} Y_i \quad (2.6)$$

O fluxo de difusão mássica no escoamento ocorre devido aos efeitos dos gradientes de temperatura (também conhecido como efeito Soret),  $\vec{j}_i^T$ , dos gradientes de pressão,  $\vec{j}_i^p$ , e dos gradientes de concentração das espécies químicas,  $\vec{j}_i^d$ . Portanto o vetor de difusão mássica é dado conforme

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

Em processos de combustão à pressão atmosférica, os gradientes de pressão são muito pequenos e, portanto, o termo de difusão mássica devido aos gradientes de pressão pode ser desprezado [Coelho e Costa, 2007]. Uma vez que os efeitos do gradiente de temperatura na difusão mássica são mais importantes somente em espécies de baixo peso molecular ( $H$ ,  $H_e$  e  $H_2$ ), a contribuição pelo efeito Soret também pode ser desprezada [Ibid]. Deste modo, a difusão das espécies se dá somente devido aos efeitos dos gradientes de concentração ( $\vec{J}_i = \vec{j}_i^d$ ), que pode ser aproximada segundo a lei de Fick para difusão binária de acordo com

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

onde  $D_{i,M}$  é o coeficiente médio de difusão mássica da  $i$ -ésima espécie na mistura e pode ser calculado conforme proposto por Hirschfelder et al., 1956, por

$$D_{i,M} = \frac{1 - Y_i}{\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{N_s} \frac{X_j}{D_{i,j}}} \quad (2.9)$$

para qual  $D_{i,j}$  é o coeficiente de difusão da espécie  $i$  na espécie  $j$ .

O termo fonte presente na equação de transporte para massa das espécies químicas (Eq. 2.4) é modelado segundo as equações cinéticas de Arrhenius. Genericamente uma reação elementar pode ser escrita como



onde  $\nu'_{i,j}$  e  $\nu''_{i,j}$  são os coeficientes estequiométricos da espécie  $i$  na  $j$ -ésima reação para os reagente e produtos, respectivamente, e  $\mathcal{M}_i$  representa a forma molecular da espécie  $i$ .

A taxa líquida de reação para a  $j$ -ésima reação é expressa conforme

$$\bar{\dot{\omega}}_j = k_{f,j} \prod_{i=1}^{N_s} [\mathcal{M}_i]^{\nu'_{i,j}} - k_{b,j} \prod_{i=1}^{N_s} [\mathcal{M}_i]^{\nu''_{i,j}} \quad (2.11)$$

na qual  $k_{f,j}$  e  $k_{b,j}$  são as constantes de reação nos sentidos direto ( $f$ : *forward*) e inverso ( $b$ : *backward*), respectivamente, e  $[\mathcal{M}_i]$  a concentração molar da espécie  $i$ . A constante de reação direta pode ser obtida segundo a forma modificada da equação de Arrhenius, dada por

$$k_{f,j} = AT^\beta e^{\frac{-E_a}{R_a T}} \quad (2.12)$$

onde  $A$  é o fator pré-exponencial,  $\beta$  o expoente da temperatura (adimensional) e  $E_a$  a energia de ativação. A constante de reação inversa pode ser obtida através da constante de reação direta conforme

$$k_{b,j} = \frac{k_{f,j}}{K_{c,j}} \quad (2.13)$$

para qual  $K_{c,j}$  é a constante de equilíbrio para a reação  $j$  (função da temperatura).

Finalmente, o termo fonte total para as  $N_r$  reações envolvidas é expresso como

$$\dot{\omega}_i = MW_i \sum_{j=1}^{N_r} (v''_{i,j} - v'_{i,j}) \overline{\dot{\omega}_j} \quad (2.14)$$

#### 2.1.4 Equação de conservação da energia

A equação de conservação da energia pode ser escrita de diversas formas de acordo com a variável de interesse. Em termos da entalpia específica da mistura, a conservação da energia é expressa como

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} h) = \frac{Dp}{Dt} + \hat{\tau} : \vec{\nabla} \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q + \dot{q}_R \quad (2.15)$$

onde os termos do lado esquerdo representam o transporte da entalpia,  $h$ , por advecção e o termo transiente, enquanto que os termos do lado direito representam, respectivamente, a derivada material da pressão, a dissipação viscosa, o divergente do vetor fluxo de calor,  $\vec{J}_q$ , e o termo fonte radiativo,  $\dot{q}_R$ . Uma vez que a modelagem da radiação térmica é um dos principais objetivos deste trabalho, a modelagem deste termo será discutida em detalhes no Capítulo 3.

Dado que a aproximação para baixos números de Mach é válida, a derivada material da pressão pode ser negligenciada. O termo de dissipação pode ser desconsiderado, pois a liberação de calor na chama é muito maior.

O vetor fluxo de calor é composto por três fenômenos: o fluxo de calor por condução, devido aos gradientes de temperatura, representado pela lei de Fourier; o fluxo de calor devido aos gradientes de concentração das espécies químicas, nominalmente efeito Dufour,

usualmente negligenciado em processos de combustão; e o fluxo de calor devido à difusão mássica. O vetor fluxo de calor é dado, portanto, por

$$\vec{J}_q = -\lambda \vec{\nabla} T + \sum_{i=1}^{N_s} h_i \vec{j}_i \quad (2.16)$$

onde  $\lambda$  é a condutividade térmica da mistura e  $h_i$  a entalpia específica da  $i$ -ésima espécie química. O efeito das reações químicas é computado pela entalpia específica, conforme

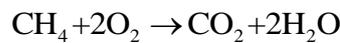
$$h = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i h_i \quad (2.17)$$

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_{REF}}^T C_{p_i}(T) dT \quad (2.18)$$

onde  $h_i^0$  é a entalpia específica de formação da espécie  $i$  na temperatura de referência,  $T_{REF} = 298K$  e  $C_{p_i}$  o calor específico a pressão constante.

## 2.2 Mecanismos de cinética química

O efeito global da reação entre um combustível e oxidante pode ser expresso a partir de uma reação química global como, por exemplo, para o metano com oxigênio conforme



Entretanto uma reação global descreve apenas os estados iniciais e finais, desprezando como a reação ocorre a nível molecular. De fato, a reação de um combustível com um oxidante envolve certo número de reações elementares em que participam espécies químicas intermediárias. O conjunto de reações elementares necessário para descrever uma reação global é denominado mecanismo de reação, podendo envolver um grande número de reações elementares, chegando a centenas para mecanismos detalhados [Coelho e Costa, 2007].

Mecanismos de reação detalhados descrevem como as reações se desenvolvem a nível molecular onde, para cada passo, são descritas as ligações que são rompidas e criadas envolvendo o rearranjo de átomos e que dão origem a novas espécies químicas. Os

mecanismos de cinética química são desenvolvidos com base teórica e experimental para os combustíveis mais comuns e testados para determinadas condições de combustão (diferentes pressões e temperatura, por exemplo).

O mecanismo de cinética química empregado para a realização das simulações computacionais é o mecanismo *skeleton* skm-DRM19 para a combustão do metano, desenvolvido por Kazakov e Frenklach, 1994. Trata-se de uma versão reduzida do mecanismo GRI-Mech 1.2 [Frenklach et al., 1994] sendo formado por 84 reações elementares e 21 espécies químicas. As propriedades termodinâmicas e de transporte empregadas são as referente ao mecanismo detalhado GRI-Mech 1.2.

### 3 MODELAGEM DA RADIAÇÃO TÉRMICA

O fenômeno da transferência de calor por radiação pode ser compreendido de um ponto de vista da mecânica clássica como o transporte de energia por ondas eletromagnéticas ou, de forma equivalente, também pode ser entendido pela mecânica quântica através do conceito de fótons. A radiação se distingue, portanto, dos outros fenômenos de transferência de calor por não necessitar de um meio material para que ocorra.

Matéria aquecida (nos estados sólido, líquido e gasoso) emite radiação térmica. Para os propósitos da transferência de calor, tem-se particular interesse na região do espectro eletromagnético que vai de  $0,1 \mu\text{m}$  a  $100 \mu\text{m}$  e compreende uma parcela do ultravioleta e toda faixa visível e infravermelha, chamada de radiação térmica (Figura 3.1).

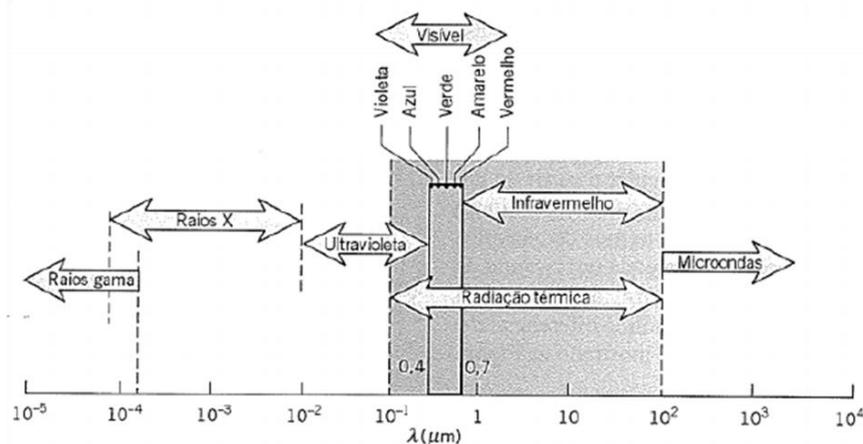


Figura 3.1 – Espectro da radiação eletromagnética [Incropera e De Witt, 2008].

Em processos que envolvem temperaturas elevadas (da ordem de  $10^3 \text{ K}$ ), a radiação térmica se torna o processo de transferência de calor dominante, tais como fornos industriais, na conversão de energia solar, na indústria de aço e vidro e em sistemas de *flares* em refinarias e plataformas de petróleo, entre outros.

Na combustão de hidrocarbonetos são gerados gases como produtos, tais como o vapor de água e o dióxido de carbono que são relevantes na absorção e emissão de radiação (denominados gases participantes). A modelagem da radiação em meios participantes é uma tarefa desafiadora devido às complexidades associadas ao fenômeno. Além de conhecer as propriedades do meio localmente (ponto a ponto), estas variam drasticamente com o número

de onda (ou, de forma equivalente, com o comprimento e onda) necessitando uma abordagem do ponto de vista espectral.

Existem diversos modelos espectrais de gases que visam simular o comportamento de um gás real de modo a obter as propriedades radiativas de um meio com relação ao espectro, onde a precisão/detalhamento/demanda computacional devem ser avaliadas de acordo com a necessidade do problema a ser resolvido.

Neste capítulo são apresentados os fundamentos da transferência de calor por radiação. Nas Seções 3.1 e 3.2 são definidas a intensidade de radiação e a radiação de corpo negro. Na Seção 3.3 é discutida a intensidade da radiação em meios participantes, onde são abordadas as contribuições da absorção e da emissão do meio e é apresentada a equação da transferência radiativa. Por fim, na Seção 3.4 são apresentados os modelos espectrais adotados para a modelagem da radiação no meio participante.

### **3.1 Intensidade de radiação**

A radiação emitida por uma superfície pode se propagar para todas as direções. Reciprocamente, a radiação que incide sobre uma superfície pode ser oriunda de diferentes direções. Deste modo, pode vir a ser de grande interesse conhecer a distribuição direcional da radiação emitida e/ou como a superfície responde ao efeito direcional da radiação incidente. Tais efeitos podem ser fundamentais na determinação da taxa de transferência de calor radiativo e podem ser tratados com a introdução do conceito de intensidade de radiação.

Considerando a emissão de radiação por uma superfície diferencial  $dA$  para uma determinada direção, conforme Figura 3.2, a direção de emissão pode ser especificada a partir dos ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  a partir de um sistema de coordenadas esféricas. A área  $dA_n$  através da qual a radiação passa compreende um ângulo sólido  $d\omega$  quando visto de um ponto sobre  $dA$ .



O poder emissivo hemisférico espectral,  $E_\eta$ , é definido como a taxa na qual radiação com número de onda  $\eta$  é emitida em todas as direções a partir de uma superfície por unidade de intervalo de número de onda  $d\eta$  no entorno de  $\eta$  e por unidade de área superficial. O poder emissivo hemisférico espectral é, portanto, o fluxo de calor espectral associado à emissão para um hemisfério hipotético sobre  $dA$ , portanto

$$E_\eta(\eta) = q_\eta''(\eta) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I_\eta(\eta, \theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi \quad (3.3)$$

É importante notar que  $E_\eta$  é um fluxo baseado na área superficial real, enquanto  $I_\eta$  é baseado na área projetada.

O poder emissivo hemisférico total, em unidades de  $W/m^2$ , é a taxa na qual a radiação é emitida por unidade de área em todos os números de onda possíveis e em todas as direções possíveis, logo

$$E = \int_0^\infty E_\eta(\eta) d\eta \quad (3.4)$$

ou

$$E = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} I_\eta(\eta, \theta, \varphi) \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi d\eta \quad (3.5)$$

O termo “poder emissivo” implica em emissão para todas as direções possíveis, portanto o adjetivo “hemisférico” se torna redundante e é omitido. Para um emissor difuso, ou seja, para o qual a intensidade de radiação emitida é independente da direção e  $I_\eta(\eta, \theta, \varphi) = I_\eta(\eta)$ , a integração do poder emissivo espectral e do poder emissivo total resultam, portanto, respectivamente, em

$$E_\eta(\eta) = \pi I_\eta(\eta) \quad (3.6)$$

e

$$E = \pi I \quad (3.7)$$

onde  $I$  é a intensidade total da radiação emitida.

### 3.2 Radiação de corpo negro

O corpo negro é uma idealização conveniente para se determinar as propriedades radiativas de superfícies reais. Trata-se de um absorvedor e um emissor perfeito e possui as seguintes características: (i) absorve toda a radiação incidente independente do comprimento de onda e da direção; (ii) emite a maior quantidade de energia para uma dada temperatura e comprimento de onda; (iii) a radiação é emitida igualmente em todas as direções, ou seja, é um emissor difuso.

A intensidade de radiação espectral do corpo negro é dada pela distribuição de Planck, proposta pelo físico alemão Max Planck em 1900, conforme

$$I_{\eta,b}(\eta, T) = \frac{2hc_0^2\eta^3}{e^{\left(\frac{hc_0\eta}{kT}\right)} - 1} \quad (3.8)$$

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

Dado que o corpo negro é um emissor difuso, seu poder emissivo espectral é dado por

$$E_{\eta,b}(\eta, T) = \pi I_{\eta,b}(\eta, T) \quad (3.9)$$

Integrando o poder emissivo em todo o espectro, chega-se na expressão conhecida como lei de Stefan-Boltzmann

$$E_b(T) = \sigma T^4 \quad (3.10)$$

onde  $\sigma = 5,670367(13) \times 10^{-8} \text{Wm}^{-2} \text{K}^{-4}$  é a constante de Stefan-Boltzmann. A intensidade total da radiação emitida pelo corpo negro é dada, portanto, por

$$I_b(T) = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (3.11)$$

### 3.3 Intensidade de radiação em meios participantes

#### 3.3.1 Atenuação da intensidade por absorção do meio

Considerando a radiação espectral de intensidade  $I_\eta$  que incide perpendicular em um elemento de volume de espessura  $dS$  que absorve e espalha radiação, conforme Figura 3.3.

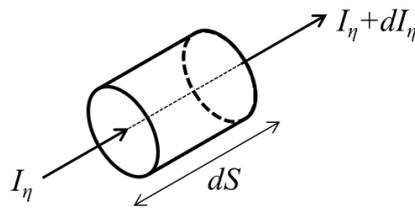


Figura 3.3 – Radiação incidindo perpendicularmente em um elemento de volume de um meio participante que absorve e espalha radiação [adaptado de Siegel e Howell, 2002].

Conforme a radiação viaja através de  $dS$ , a intensidade da radiação é atenuada devido aos efeitos da absorção e do espalhamento. De modo experimental, foi possível verificar que a alteração na intensidade depende da magnitude da intensidade local. Introduzindo um coeficiente de proporcionalidade  $K_\eta$  (função das propriedades locais do meio), a atenuação é dada por

$$dI_\eta = -K_\eta(S)I_\eta dS \quad (3.12)$$

onde  $K_\eta$  é o coeficiente de extinção espectral do meio, em unidades de  $m^{-1}$ . O coeficiente de extinção é uma propriedade física do meio e é função da temperatura, pressão, composição do meio (indicada em termos da fração molar das espécies químicas) e do número de onda da radiação incidente, logo  $K_\eta = K_\eta(\eta, T, p, X_i)$ .

Integrando a Equação 3.12 para um caminho  $S$ , temos

$$\int_{I_\eta(0)}^{I_\eta(S)} \frac{dI_\eta}{I_\eta} = -\int_0^S K_\eta(S^*) dS^* \quad (3.13)$$

onde  $I_\eta(0)$  é a intensidade na origem do caminho e  $S^*$  é uma variável utilizada para a integração do caminho. Como resultado, temos

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp\left[-\int_0^S K_\eta(S^*) dS^*\right] \quad (3.14)$$

Essa equação é conhecida como Lei de Bouguer e mostra que, como consequência da proporcionalidade, a intensidade da radiação espectral ao longo de um caminho é atenuada exponencialmente. O expoente é a integral do coeficiente de extinção local sobre o comprimento do caminho percorrido pela radiação.

O coeficiente de extinção é composto de duas partes: o coeficiente de absorção  $\kappa_\eta(\eta, T, p)$  e o coeficiente de espalhamento  $\sigma_{s\eta}(\eta, T, p)$ , portanto

$$K_\eta(\eta, T, p) = \kappa_\eta(\eta, T, p) + \sigma_{s\eta}(\eta, T, p) \quad (3.15)$$

Conforme apresentado por Smith et al., 1982, e por Modest, 2003, o coeficiente de extinção (e consequentemente os coeficientes de absorção e de espalhamento) pode ser escrito em função da pressão parcial das espécies participantes da troca radiativa. Portanto

$$K_{\eta,p} = \kappa_{\eta,p} + \sigma_{s\eta,p} = \frac{K_\eta}{p} = \frac{\kappa_\eta}{p} + \frac{\sigma_{s\eta}}{p} \quad (3.16)$$

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. Para meios onde o espalhamento pode ser negligenciado, ou seja,  $\sigma_{s\eta} \approx 0$ , então  $K_{\eta} = \kappa_{\eta}$ , e a Equação (3.14) se torna

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

Se  $\kappa_{\eta}$  não é função da posição, como é a situação em um meio com propriedades uniformes, tal como para um gás bem misturado, então a Equação (3.14) fica

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0)\exp(-\kappa_{\eta}S) \quad (3.18)$$

O forte comportamento espectral do coeficiente de absorção é discutido detalhadamente na seção 3.4.

### 3.3.2 Incremento da intensidade por emissão do meio

Considerando um elemento de volume  $dV$  de um meio, com coeficiente de absorção  $\kappa_{\eta}(\eta, T, p)$ , no centro de uma cavidade esférica com superfície negra de raio  $R$  e a uma temperatura uniforme  $T$ , conforme a Figura 3.4. O espaço entre  $dV$  e a superfície da cavidade é preenchido por um meio não participante (transparente).

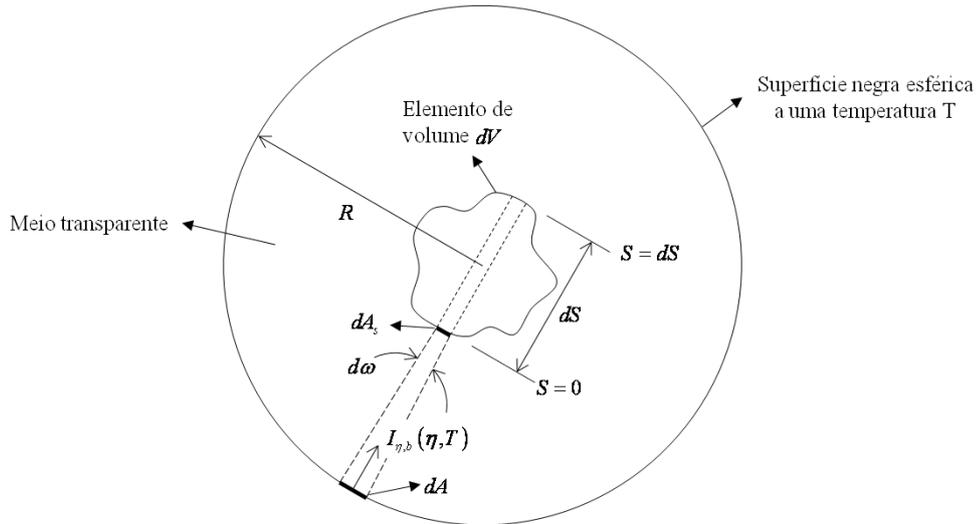


Figura 3.4 – Geometria para derivação da emissão de radiação por um volume do meio [adaptado de Siegel e Howell, 2002].

A intensidade espectral de radiação sobre  $dA_s$  em  $dV$  emitida pelo elemento de área  $dA$  na superfície da esfera é

$$I_{\eta}(S=0) = I_{\eta,b}(\eta, T) \quad (3.19)$$

A alteração na intensidade em  $dV$  como resultado da absorção é dada por

$$-I_{\eta}(0)\kappa_{\eta}dS = -I_{\eta,b}(\eta, T)\kappa_{\eta}dS \quad (3.20)$$

A energia emitida por  $dA$  e absorvida por todo o volume  $dSdA_s$  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 determinada pela integração sobre todos os elementos  $dSdA_s$ .

Para levar em conta toda a energia incidente sobre  $dV$  oriunda da superfície da cavidade, integra-se sobre todos os ângulos sólidos. Para manter a cavidade em equilíbrio, a energia emitida por  $dV$  deve ser igual àquela que é absorvida, portanto

$$dI_{\eta} = 4\pi I_{\eta,b}(\eta, T) \kappa_{\eta} dS dA_s d\eta \quad (3.21)$$

A equação 3.21 é válida para elementos de volume  $dV$  suficientemente pequenos, de tal modo que toda energia emitida no interior do volume escape antes de ser reabsorvida.

Para todas as condições consideradas, a emissão de energia é uniforme para todas as direções (isotrópica), portanto a intensidade espectral emitida por um elemento de volume em qualquer direção,  $dI_{\eta}$ , é obtida dividindo a Equação 3.21 por  $4\pi d\eta$  e pela área da seção transversal  $dA_s$ , de modo a obter

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

### 3.3.3 Equação da transferência radiativa

A equação do transporte radiante (RTE: *Radiative Transfer Equation*) é uma equação de balanço que leva em conta os efeitos da absorção, emissão e espalhamento na intensidade de radiação para um determinado meio participante ao longo de um caminho  $S$ . Para um meio que absorve, emite e não espalha radiação, a RTE é dada pela combinação dos efeitos descritos pelas Equações (3.17) e (3.22) e pode ser escrita como

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = -\kappa_{\eta} I_{\eta} + \kappa_{\eta} I_{\eta,b} \quad (3.23)$$

onde o termo negativo corresponde ao decréscimo na intensidade pela absorção do meio e o termo positivo o acréscimo pela emissão. Os efeitos de espalhamento na intensidade de radiação podem ser desprezados uma vez que são estudadas chamas de metano, para as quais há baixa formação de fuligem.

### 3.4 Modelos espectrais para o coeficiente de absorção

A solução da RTE requer uma modelagem das propriedades espectrais do coeficiente de absorção.

A solução LBL resolve a RTE para todos os números de onda fornecendo soluções muito precisas (usualmente utilizadas como *benchmark*), entretanto possui um elevado custo computacional inviabilizando sua aplicação em problemas multidimensionais. Outra abordagem possível são os modelos espectrais que produzem resultados com boa precisão e apresentam moderado custo computacional. Existem vários modelos espectrais para gases na literatura. Serão apresentados aqui os modelos de gás cinza e o modelo da soma-ponderada-de gases-cinza, os quais foram empregados nas simulações numéricas das chamas laminares.

#### 3.4.1 Modelo de gás cinza

O modelo de gás cinza (GG: *Gray Gas*) considera que o coeficiente de absorção é independente do número de onda. Considerando o modelo de gás cinza, a RTE pode ser escrita como

$$\frac{dI}{dS} = -\kappa I + \kappa I_b \quad (3.24)$$

onde  $I$  é a intensidade de radiação do gás cinza e  $I_b$  é a intensidade de radiação de corpo negro ( $I_b = \sigma T^4 / \pi$ ). De modo a minimizar os efeitos da hipótese de meio cinza e tornar o modelo mais eficiente, o coeficiente de absorção pode ser escrito como uma função da temperatura e da concentração das espécies participantes. No presente trabalho é implementado o modelo de gás cinza apresentado por Cassol et al., 2014, onde o coeficiente de absorção é calculado de acordo com

$$\kappa_i = p_i \left( c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 + c_4 T^4 + c_5 T^5 \right) \quad (3.25)$$

onde  $p_i$  é a pressão parcial da espécie participante e o subscrito  $i$  indica a espécie química ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ). Os coeficientes polinomiais (Tabela 3.1) foram obtidos a partir da base de dados espectrais HITEMP2010, tendo sido ajustados separadamente para cada espécie através de uma média de Planck, definida por

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{b,\eta} d\eta}{\int_{\eta} I_{b,\eta} d\eta} \quad (3.26)$$

Tabela 3.1 – Coeficientes polinomiais para o cálculo do coeficiente de absorção do modelo de gás cinza [Cassol et al., 2014].

	i = $\text{CO}_2$	i = $\text{H}_2\text{O}$
$c_0$ ( $\text{cm}^{-1} \text{atm}^{-1}$ )	$-6.4750 \cdot 10^{-1}$	$7.5702 \cdot 10^{-1}$
$c_1$ ( $\text{cm}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-1}$ )	$4.2895 \cdot 10^{-3}$	$-1.9716 \cdot 10^{-3}$
$c_2$ ( $\text{cm}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-2}$ )	$-6.6089 \cdot 10^{-6}$	$2.1998 \cdot 10^{-6}$
$c_3$ ( $\text{cm}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-3}$ )	$4.4190 \cdot 10^{-9}$	$-1.2492 \cdot 10^{-9}$
$c_4$ ( $\text{cm}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-4}$ )	$-1.3796 \cdot 10^{-12}$	$3.5385 \cdot 10^{-13}$
$c_5$ ( $\text{cm}^{-1} \text{atm}^{-1} \text{K}^{-5}$ )	$1.6484 \cdot 10^{-16}$	$-3.9663 \cdot 10^{-17}$

Uma vez calculado o coeficiente de absorção de cada espécie participante, o coeficiente de absorção da mistura, utilizado na integração da RTE, é calculado como

$$\kappa = (\kappa_{\text{CO}_2} + \kappa_{\text{H}_2\text{O}}) \times 100 \quad (3.27)$$

A comunicação entre o modelo espectral e a RTE com a equação da energia é feita pelo termo fonte radiativo que pode ser expresso como o negativo do divergente do fluxo de calor conforme

$$\dot{q}_R = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_R'' = \kappa \left[ \left( \int_{4\pi} I d\Omega \right) - 4\pi I_b \right] \quad (3.28)$$

O modelo GG é o de mais simples implementação e apresenta resultados pouco acurados. Entretanto, para simulações acopladas da radiação/combustão em problemas multidimensionais onde a demanda computacional é elevada, o modelo GG se transforma em uma alternativa viável para a integração da RTE ou para iniciar uma solução onde, posteriormente, outro modelo mais sofisticado é utilizado para alcançar a convergência.

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

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG: *Weighted-Sum-of-Gray-Gases*) foi inicialmente proposto por Hottel e Sarofim, 1967, onde a integração das propriedades no espectro é substituída pelo somatório de um número finito de gases cinza a fim de simular o comportamento de um gás real. Deste modo, uma das hipóteses básicas do modelo WSGG é que a emitância total de um gás ao longo de um caminho  $S$ , que corresponde à razão entre a intensidade de radiação que é emitida ao longo deste caminho em uma dada temperatura e a intensidade do corpo negro para esta mesma temperatura, pode ser calculada de acordo com

$$\varepsilon(S) = \sum_{j=1}^{N_g} a_j(T) \left[ 1 - e^{-\kappa_{p,j} p S} \right] \quad (3.29)$$

onde  $a_j$  e  $\kappa_{p,j}$  representam, respectivamente, o coeficiente de ponderação e o coeficiente de absorção para cada um dos  $N_g$  gases cinza (usualmente três ou quatro). Para uma mistura gasosa,  $p$  representa a soma das pressões parciais das espécies químicas. Fisicamente o fator de ponderação representa a fração de energia de corpo negro que é emitida pelo gás cinza a uma determinada temperatura.

Smith et al., 1982, propuseram uma função polinomial para descrever os coeficientes de ponderação, onde

$$a_j = \sum_{k=1}^{N_g+1} b_{j,k} T^{k-1} \quad (3.30)$$

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

$$a_0 = 1 - \sum_{j=1}^{N_g} a_j \quad (3.31)$$

Modest, 1991, demonstrou que o modelo WSGG pode ser empregado com qualquer método de solução espacial da equação da transferência radiativa. Sendo assim, a RTE pode ser escrita como

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j I_b \quad (3.32)$$

onde  $\kappa_j$  e  $I_j$  são, respectivamente, o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação para o  $j$ -ésimo gás cinza. O termo negativo representa a atenuação na intensidade devido à absorção do meio, enquanto o termo positivo representa o incremento na intensidade devido à emissão do meio. Para misturas, o coeficiente de absorção para cada gás cinza pode ser calculado como uma função das pressões parciais das espécies participantes ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ) conforme

$$\kappa_j = \kappa_{p,j} p (X_{\text{CO}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (3.33)$$

O termo fonte radiativo para o modelo WSGG é a soma do termo fonte obtido para cada um dos gases cinza, onde

$$\dot{q}_R = \sum_{j=1}^{N_g} -\vec{\nabla} \cdot \vec{q}_{R,j}'' = \sum_{j=1}^{N_g} \kappa_j \left[ \left( \int_{4\pi} I_j d\Omega \right) - 4\pi a_j I_b \right] \quad (3.34)$$

Smith et al., 1982, obtiveram os coeficientes  $\kappa_{p,j}$  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*). Estas correlações válidas para  $600\text{ K} \leq T \leq 2400\text{ K}$  e  $0,001\text{ atm m} \leq pS \leq 10\text{ atm m}$  são consideradas “correlações clássicas” e estão presentes em vários códigos CFD tais como o Fluent, CFX, StarCD, etc.

Dorigon et al., 2013, apresentaram novos coeficientes para o modelo WSGG realizando o ajuste das curvas de emitância total com relação aquelas calculadas a partir da integração LBL, utilizando as linhas espectrais obtidas através da base de dados espectrais HITEMP2010 [Rothman et al., 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  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$  (Tabela 3.2) e  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$  (Tabela 3.3) e são válidas para  $400\text{ K} \leq T \leq 2500\text{ K}$  e  $0,001\text{ atm m} \leq pS \leq 10\text{ atm m}$ .

Tabela 3.2 – Coeficientes do modelo WSGG para  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$  [Dorigon et al., 2013].

J	$\kappa_{p,j} (\text{atm m})^{-1}$	$b_{j,0}$	$b_{j,1} (\text{K}^{-1})$	$b_{j,2} (\text{K}^{-2})$	$b_{j,3} (\text{K}^{-3})$	$b_{j,4} (\text{K}^{-4})$
1	$1,873 \times 10^{-1}$	$7,197 \times 10^{-2}$	$8,724 \times 10^{-4}$	$-9,690 \times 10^{-7}$	$4,651 \times 10^{-10}$	$-7,917 \times 10^{-14}$
2	$1,723 \times 10^0$	$1,107 \times 10^{-1}$	$3,397 \times 10^{-4}$	$-2,467 \times 10^{-7}$	$4,647 \times 10^{-11}$	$-1,039 \times 10^{-15}$
3	$1,248 \times 10^1$	$2,091 \times 10^{-1}$	$-6,423 \times 10^{-5}$	$-3,200 \times 10^{-8}$	$1,718 \times 10^{-11}$	$-2,105 \times 10^{-15}$
4	$1,449 \times 10^2$	$7,092 \times 10^{-2}$	$6,586 \times 10^{-5}$	$-1,278 \times 10^{-7}$	$5,577 \times 10^{-11}$	$-7,709 \times 10^{-15}$

Tabela 3.3 – Coeficientes do modelo WSGG para  $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$  [Dorigon et al., 2013].

J	$\kappa_{p,j} (\text{atm m})^{-1}$	$b_{j,0}$	$b_{j,1} (\text{K}^{-1})$	$b_{j,2} (\text{K}^{-2})$	$b_{j,3} (\text{K}^{-3})$	$b_{j,4} (\text{K}^{-4})$
1	$1,921 \times 10^{-1}$	$5,617 \times 10^{-2}$	$7,844 \times 10^{-4}$	$-8,563 \times 10^{-7}$	$4,246 \times 10^{-10}$	$-7,440 \times 10^{-14}$
2	$1,719 \times 10^0$	$1,426 \times 10^{-1}$	$1,795 \times 10^{-4}$	$-1,077 \times 10^{-8}$	$-6,971 \times 10^{-11}$	$1,774 \times 10^{-14}$
3	$1,137 \times 10^1$	$1,362 \times 10^{-1}$	$2,574 \times 10^{-4}$	$-3,711 \times 10^{-7}$	$1,575 \times 10^{-10}$	$-2,267 \times 10^{-14}$
4	$1,110 \times 10^2$	$1,222 \times 10^{-1}$	$-2,327 \times 10^{-5}$	$-7,492 \times 10^{-8}$	$4,275 \times 10^{-11}$	$-6,608 \times 10^{-15}$

## 4 CARACTERIZAÇÃO DO PROBLEMA

O problema sob investigação consiste de uma série de chamas não pré-misturadas laminares de metano com diluição de inertes na corrente de combustível, onde dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e nitrogênio ( $\text{N}_2$ ) são utilizados como diluente.

Dados experimentais de comprimento de chama e fluxo de calor radiativo e fração radiante foram obtidos por Machado, 2015. As medidas foram realizadas para diferentes séries de chamas observando a forma como foi feita a diluição: (i) chamas de potência constante onde diluente é acrescido sem alteração na vazão do metano; (ii) chamas de vazão constante onde diluente é acrescido com decréscimo na vazão do metano, mantendo a vazão total constante; (iii) chamas de diluição constante.

Para os propósitos do presente trabalho foram simuladas computacionalmente as chamas da série de potência constante onde a vazão de hidrocarboneto, mantida constante para todas as chamas, é de 50 L/min, e ambos os diluentes foram utilizados. As chamas para esta série de chamas são identificadas no estudo realizado por Machado, 2015, como PC0050C## e PC0050N##, onde os dois primeiros dígitos indicam a série de chamas (PC), os próximos quatro dígitos a vazão do metano em L/min (0050), C e N indicam o diluente,  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$ , respectivamente, e os dígitos finais (##) indicam o percentual de diluição em volume. Essa identificação será mantida para a apresentação das chamas ao longo do trabalho.

Na Seção 4.1 são descritos os procedimentos experimentais para a obtenção do fluxo de calor radiativo e do comprimento de chama. Na Seção 4.2 é apresentado o domínio computacional construído com base na montagem experimental, bem como as condições de contorno do problema numérico. Na Seção 4.3 são apresentadas as condições de entrada para a série de chamas estudada.

### 4.1 Medidas experimentais

O queimador utilizado por Machado, 2015, para a realização das medidas consiste de uma versão adaptada do queimador proposto por Santoro et al., 2010, a fim de se estabilizar chamas não pré-misturadas para a realização de medições de fração volumétrica de fuligem por diferentes técnicas. A adaptação feita consiste de um prolongamento de 60 mm no duto

injetor de combustível para que se pudessem realizar medidas da radiação abaixo da saída do injetor.

O queimador Santoro (Figura 4.1) é composto por um tubo central (pelo qual escoo o combustível) com 11,1 mm de diâmetro interno e 12,7 mm de diâmetro externo. Um tubo externo coaxial com 101,6 mm de diâmetro interno e 107,9 mm de diâmetro externo forma um canal anular pelo qual escoo o oxidante (*coflow*) e é responsável pela estabilização da chama.

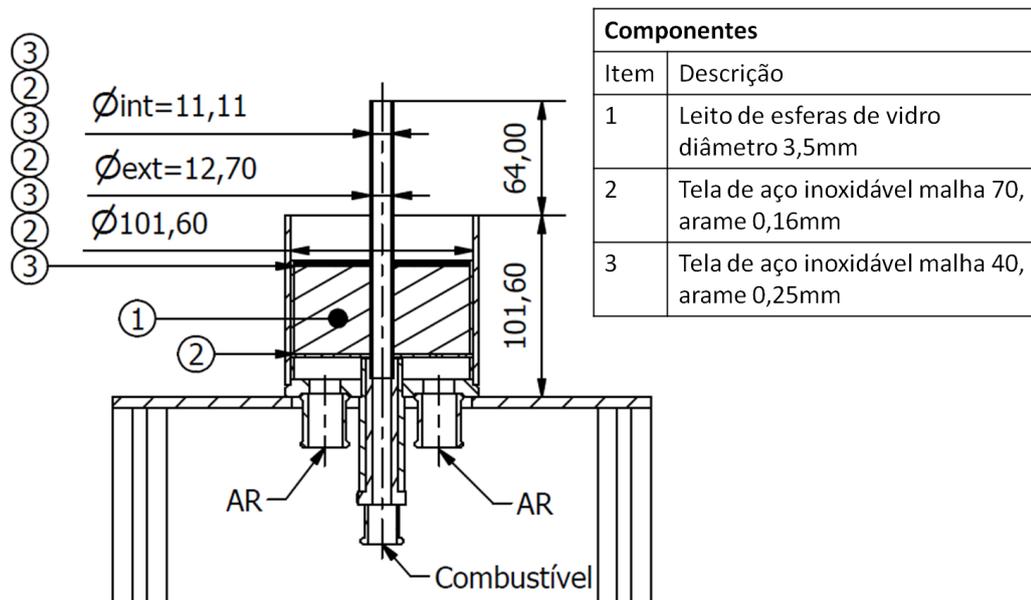


Figura 4.1 – Vista em corte do queimador Santoro adaptado [Machado, 2015].

A obtenção do fluxo de calor radiativo é realizada através de uma série de medições em diversas posições paralelas ao eixo da chama. As medições são feitas desde uma posição abaixo do duto pelo qual o combustível é injetado até uma posição após o topo da chama. A distância horizontal entre o eixo da chama e a face do sensor de radiação é mantida constante durante todas as séries de medidas verticais.

O sistema para medição da radiação é composto por um sensor de fluxo de calor e pelo sistema de aquisição de dados. O sensor utilizado para medir o fluxo radiante é um MEDTHERM 64-0.5-20/ZnSeW-1C-150, que é um transdutor de fluxo de calor do tipo Schmidt-Boelter. No sensor, a superfície sobre a qual incide a radiação é coberta por uma camada de tinta com absorção aproximadamente constante para uma ampla faixa de número

de onda. Segundo MEDTHERM CORPOTATION, 2003, os sensores do tipo Schmidt-Boelter são transdutores de fluxo capazes de produzir uma tensão elétrica proporcional ao fluxo de calor radiante incidente. O sinal elétrico é, portanto convertido em um valor de fluxo radiativo com o uso de uma constante de calibração do sensor. O sistema de aquisição dos sinais utilizado é da marca Agilent, modelo 34972<sup>a</sup>.

As vazões de combustível, diluentes e oxidante são controladas por medidores de vazão mássica Bronkhorst série EL200. O *coflow* é alimentado por ar atmosférico filtrado e desumidificado. Um esquema da montagem experimental pode ser visto na Figura 4.2.

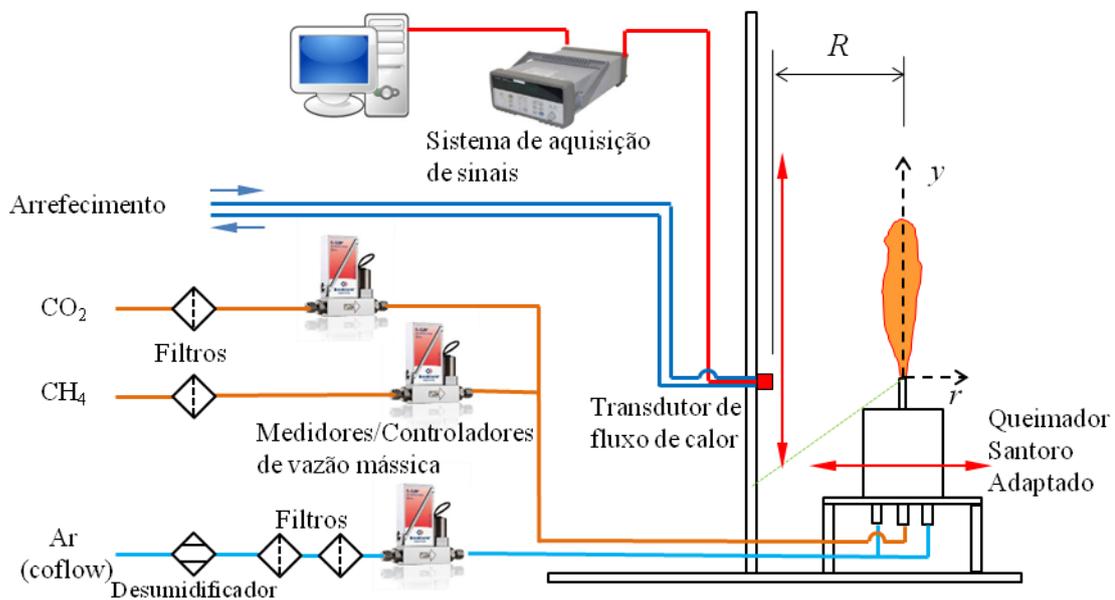


Figura 4.2 – Esquema construtivo da bancada experimental [Machado, 2015].

Os dados para a fração radiante foram obtidos a partir da abordagem sugerida por Houf e Schefer, 2007, onde os fluxos radiativos são integrados ao longo de uma superfície virtual em torno da chama. Essa superfície onde são medidos os fluxos pode ser considerada como um cilindro de raio  $R$  concêntrico ao eixo da chama. Deste modo, a fração radiante é dada por

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

onde  $\Delta y$  é a diferença entre as posições onde o fluxo radiativo é medido,  $n$  o número de medidas realizadas,  $\dot{m}$  a vazão de combustível e  $PCI$  seu poder calorífico inferior. Segundo Sivathanu e Gore, 1993, o cilindro imaginário se estende até a posição em que a radiação medida é inferior a 5% do valor máximo medido para a chama sendo, então, esse o critério para a realização das medidas.

Os dados de comprimento de chama são obtidos através de duas fotografias onde as configurações de posicionamento da câmera (zoom e foco) são mantidas constantes. A primeira imagem é feita com luz abundante para qual é posicionada uma escala métrica que passa pela linha de centro do injetor paralela ao plano da lente da câmera. A segunda imagem é capturada sem a escala. As duas fotografias são então alinhadas e o comprimento de chama é calculado como a diferença entre a base e o topo da chama.

Para mais detalhes sobre a montagem experimental, procedimentos e equipamentos, bem como dados completos das medições de fluxo radiativo e comprimento de chama podem ser encontrados em Machado, 2015.

## 4.2 Domínio computacional e condições de contorno

O problema numérico foi reduzido a um domínio bidimensional e axissimétrico baseado no queimador Santoro adaptado. Para os propósitos computacionais somente a região fora dos bocais foi considerada. Combustível e oxidante (*coflow*) são injetados através da face de dutos coaxiais com raios de 0,00555 m e 0,0508 m, respectivamente. Uma parede externa para a determinação do fluxo de calor radiativo foi posicionada a 0,0543 m da linha de centro, distância para qual foram obtidos os dados de fluxo radiante para esta série de chamas. A opção pela parede física e não por um domínio aberto se justifica pelo fato de que não é possível obter o fluxo radiativo pelo Fluent diretamente para a zona do fluido. Considera-se que a superfície está suficientemente longe e não afeta a condição de chama livre. O domínio possui um comprimento total de 0,414 m a partir do *coflow* que está posicionado 0,064 m abaixo do injetor de combustível. Para essas dimensões, alguns pontos abaixo e acima são “perdidos”, entretanto a opção por um domínio reduzido se fez em função de facilitar a convergência do problema computacional devido, principalmente, aos efeitos de empuxo. Verificou-se que, para um domínio mais longo, as chamas com maior comprimento de chama

não eram mais tão estáveis quanto as chamas menores, apresentando certa oscilação, e dificultando a convergência da equação da continuidade e da quantidade de movimento.

A parede lateral é modelada como superfície negra a uma temperatura constante de 298 K e condição de deslizamento livre. A parede do duto injetor de combustível é considerada adiabática e condição de não deslizamento. Para a parte superior do domínio é adotada a condição de contorno de *outflow* e para a radiação é dado o tratamento de superfície negra a uma temperatura constante de 298 K (não está sendo levada em conta, portanto, a temperatura da pluma ascendente). Foram testadas outras alternativas como, por exemplo, a temperatura da própria pluma aquecida e prescrever uma temperatura baseada na média da temperatura do escoamento, entretanto os melhores resultados foram encontrados para temperatura prescrita de 298 K. Combustível e oxidantes são injetados no domínio a uma temperatura de 298 K. A vazão de oxidante, constante para todas as chamas, é de 100 litros/min, resultando em uma velocidade média de 0,21 m/s, sendo composto por 21% de O<sub>2</sub> e 79% de N<sub>2</sub>, em volume. O combustível é composto por uma mistura de metano e diluente em diferentes percentuais de diluição onde a vazão total varia de acordo com o nível de diluição. Foi adotado ainda um perfil parabólico para a entrada de combustível, dado por

$$v(r) = 2v_{\text{combustível}} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (4.2)$$

onde  $R$  é o raio do tubo injetor de combustível e  $v_{\text{combustível}}$  é a velocidade média do combustível para cada chama conforme apresentado na Tabela 4.1.

As dimensões do domínio computacional bem como as condições de contorno estão esquematizadas na Figura 4.3.

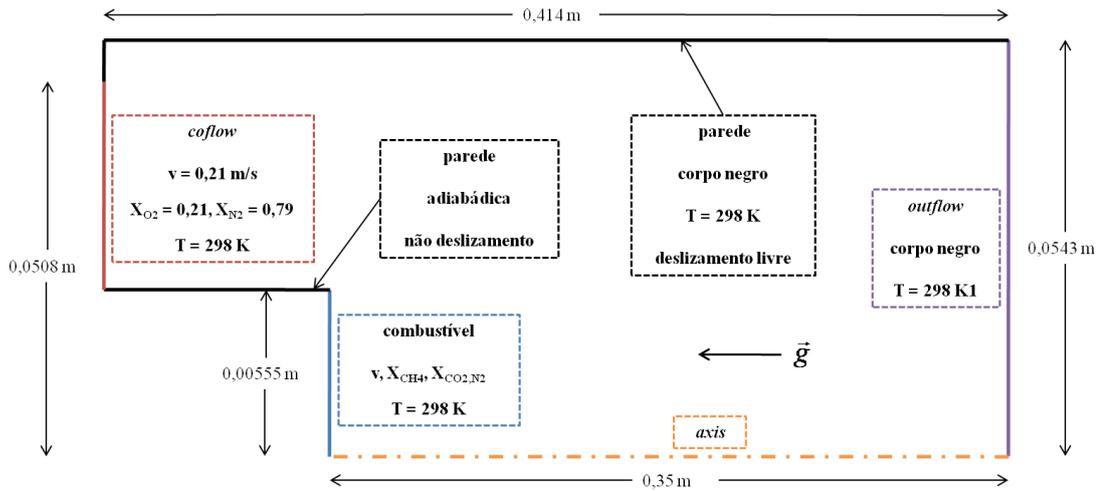


Figura 4.3 – Esquema da geometria e condições de contorno do problema computacional.

Tabela 4.1 – Tabela com as condições de entrada para o combustível.

Chama (TAG)	velocidade (m/s)	$X_{CH_4}$	$X_{CO_2}$	$X_{N_2}$	Re
PC0050C00	0,0861	1,0	0,0	0,0	57
PC0050C10	0,0964	0,9	0,1	0,0	70
PC0050C20	0,1085	0,8	0,2	0,0	86
PC0050C30	0,1222	0,7	0,3	0,0	107
PC0050C40	0,1429	0,6	0,4	0,0	134
PC0050C50	0,1722	0,5	0,5	0,0	172
PC0050N00	0,0861	1,0	0,0	0,0	57
PC0050N10	0,0964	0,9	0,0	0,1	64
PC0050N20	0,1085	0,8	0,0	0,2	73
PC0050N30	0,1222	0,7	0,0	0,3	84
PC0050N40	0,1429	0,6	0,0	0,4	98
PC0050N50	0,1722	0,5	0,0	0,5	119

Fonte: adaptada de Machado, 2015.

## 5 ABORDAGEM COMPUTACIONAL

Neste capítulo são apresentadas as abordagens pertinentes ao método numérico. Na Seção 5.1 é descrito o *solver* utilizado para a solução do sistema de equações algébricas obtido pelo método de discretização e as estratégias de solução adotadas para a solução do escoamento reativo e para a aceleração do processo de integração da cinética química. Na Seção 5.2 é discutida a construção das rotinas UDF para o modelo WSGG e sua implementação, além dos resultados obtidos para a validação do acoplamento junto ao Fluent. Por fim, na Seção 5.3, são apresentados a abordagem e o resultados obtidos para o estudo de qualidade de malha para a malha construída para a solução do problema multidimensional de chama laminar.

### 5.1 Método numérico

O conjunto de equações algébricas obtido pelo método das diferenças finitas (FVM: *Finite Volume Method*) é implementado através do código CFD (*Computational Fluid Dynamics*) comercial Ansys-Fluent versão 17.0.

O acoplamento entre a pressão e a velocidade é dado pelo algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*) [Patankar, 1980], no qual uma equação de correção para a pressão é resolvida de modo a assegurar a conservação de massa e obter o campo de pressão. A discretização espacial para as equações governantes é dada pelo esquema *upwind* de segunda ordem para os termos advectivos e diferenças centrais para os termos difusivos.

Devido ao forte acoplamento entre os fenômenos envolvidos, a simulação foi realizada por etapas. Desta forma, a fim de se obter uma melhor convergência para o escoamento reativo, primeiro é resolvido o transporte a frio dos reagentes, ou seja, combustível e oxidante entram no domínio em um escoamento não reativo onde sua mistura se dá por efeitos de difusão e advecção. A solução do escoamento a frio é utilizada então como condição inicial para o escoamento reativo. Para iniciar o processo de combustão, uma alta temperatura é imposta em uma região próxima à entrada do combustível (onde a fração de mistura é próxima da condição estequiométrica) e as reações químicas são “ativadas” para o

prosseguimento da solução. Uma vez alcançada a convergência, a modelagem da radiação térmica é inclusa até que a convergência global seja alcançada.

Uma das dificuldades para a convergência do escoamento reativo reside na magnitude do termo fonte devido às reações químicas. Para reações muito rápidas, onde as escalas de tempo são muito menores que as escalas de tempo difusivas e convectivas, a solução da equação de transporte para as espécies químicas se torna difícil do ponto de vista numérico. Como forma de contornar esse problema é empregada a ferramenta *Stiff Chemistry Solver*, em que um algoritmo de passo fracionário é empregado. No primeiro passo as reações são resolvidas a pressão constante usando o integrador ISAT (*In-Situ Adaptive Tabulation*) e a ferramenta de aglomeração química (*Chemistry Agglomeration*). No segundo passo, os termos difusivos e advectivos são tratados como em uma simulação sem reações [ANSYS, 2016b].

O integrador ISAT, desenvolvido por Pope, 1997, é uma ferramenta capaz de reduzir consideravelmente o tempo computacional em simulações empregando mecanismos de cinética química detalhados. O ISAT é um método de armazenamento e recuperação de dados que tabula de forma dinâmica (ou seja, durante o processo de solução do escoamento reativo) a composição do espaço computacional baseado em controles de erros. A região que é acessada é definida pelo mecanismo de cinética química, propriedades termodinâmicas e de transporte, características do escoamento e condições de contorno [Ibid]. Outro aspecto importante do ISAT é que somente as composições pertinentes ao problema são tabuladas. O algoritmo de aglomeração química seleciona os volumes de controle de composição similar, atribui uma única composição média, realiza a integração pela ferramenta ISAT para a composição média e, finalmente, mapeia as reações de volta aos volumes originais. Uma vez que o escoamento reativo se estabiliza, o termo fonte químico passa a ser calculado via integração direta até a convergência [Ibid].

## 5.2 Construção e validação das rotinas de usuário

A implementação do modelo WSGG com o Fluent se dá por funções de usuário (UDF: *User-Defined Function*). Essas funções são rotinas escritas na linguagem de programação C, que acopladas ao código CFD permitem modificar modelos, tratamentos de variáveis, condições de contorno, propriedades de materiais, dentre outras funcionalidades. Para o modelo WSGG são necessárias duas UDF: uma para o cálculo do coeficiente de absorção e

outra para o cálculo do fator de ponderação da emissividade [ANSYS, 2016a]. Contudo com o objetivo de diminuir o tempo de solução (uma vez que o cálculo da radiação possui uma alta demanda computacional) foi feito uso de uma terceira UDF. Essa nova função de usuário calcula o fator de ponderação da emissividade ao final de cada iteração e armazena os valores, para cada gás cinza e para cada volume de controle, em uma variável global onde os valores são posteriormente recuperados pela UDF para o fator de ponderação da emissividade. Esse procedimento foi adotado uma vez que a terceira UDF executada ao final de cada iteração é executada apenas uma vez pelo Fluent, enquanto a UDF para o fator de ponderação da emissividade é executada para cada direção da discretização angular do modelo das ordenadas discretas em cada volume de controle, aumentando o tempo da solução numérica. Com isso conseguiu-se uma redução em torno de 20% no tempo de cálculo da radiação. A Figura 5.1 apresenta um fluxograma da solução com a sequência de execução das rotinas UDF dentro do *solver* segregado baseado na pressão.

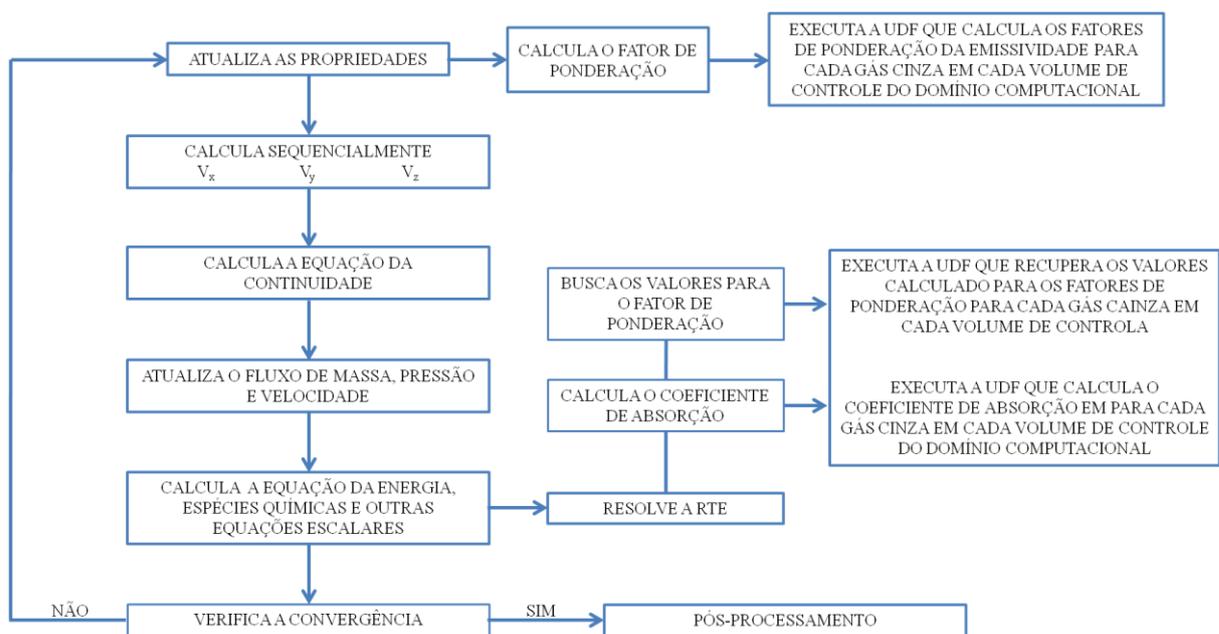


Figura 5.1 – Fluxograma com a sequência de execução das rotinas UDF dentro do *solver* [adaptado de ANSYS, 2016b].

Antes da aplicação das funções UDF na solução do problema acoplado envolvendo o escoamento reativo e os processos de transferência de calor, foi realizado um teste a fim de reproduzir os resultados apresentados por Dorigon et al., 2013, onde a solução obtida com o

modelo WSGG foi validada comparando o fluxo de calor e o termo fonte radiativo com a solução LBL.

O problema consiste de um meio não isotérmico e não homogêneo preenchendo o espaço entre duas placas planas infinitas (tratadas como superfícies negras) separadas entre si por uma distância  $S$ . São adotados três perfis de temperatura e fração molar das espécies participantes ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ). Os perfis de temperatura e concentração são dados conforme

$$T(s^*) = 400K + (1400K)\sin^2(\pi s^*) \quad (5.1)$$

$$T(s^*) = 400K + (1400K)\sin^2(2\pi s^*) \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} T(s^*) &= 880K + (920K)\sin^2(2\pi s^*), & \text{se } s^* \leq 0,25 \\ T(s^*) &= 400K + (1400K)\left\{1 - \sin^{3/2}\left[\frac{2}{3}\pi(s^* - 0,25)\right]\right\}, & \text{se } s^* > 0,25 \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$X_{\text{CO}_2}(s^*) = 0,2\sin^2(\pi s^*) \quad (5.4)$$

$$X_{\text{CO}_2}(s^*) = 0,2\sin^2(2\pi s^*) \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} X_{\text{CO}_2}(s^*) &= 0,25\sin^2(2\pi s^*), & \text{se } s^* \leq 0,25 \\ X_{\text{CO}_2}(s^*) &= 0,25\left\{1 - \sin\left[\frac{2}{3}\pi(s^* - 0,25)\right]\right\}, & \text{se } s^* > 0,25 \end{aligned} \quad (5.6)$$

onde  $s^* = s/S$ , para valores de  $S$  iguais a 0,5 m, 1,0 m e 2,0 m. Foram testadas as correlações para razões de pressão parcial ( $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2}$ ) iguais a 1,0 e 2,0. Os perfis de temperatura e concentração (Figura 5.2) foram implementados no *software* Fluent a partir de funções UDF.

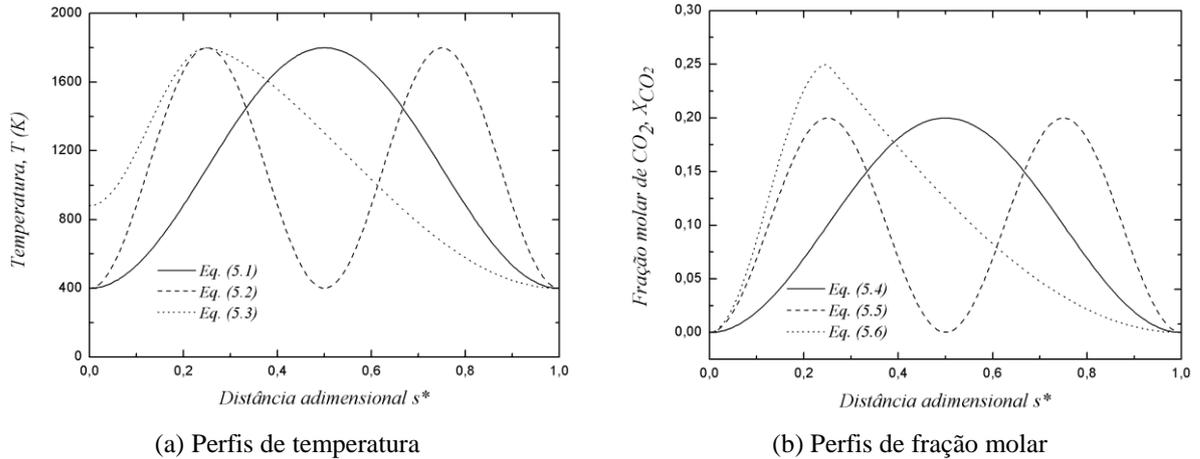


Figura 5.2 – Representação gráfica dos perfis de temperatura (a) e dos perfis de fração molar das espécies participantes (b) adotados para a validação das rotinas UDF [adaptado de Dorigon et al., 2013].

Dada a limitação do Fluent em trabalhar somente com geometrias 2D e 3D, um domínio computacional bidimensional foi construído de dimensões  $L \times S$  onde.  $L=(50,100,1000)S$ . Foram geradas três malhas: para  $L=50S$  o domínio possui  $50 \times 200$  volumes de controle; para  $L=100S$  o domínio possui  $75 \times 200$  volumes de controle; e para  $L=1000S$  o domínio possui  $100 \times 200$  volumes de controle.

Para a verificação do funcionamento do acoplamento das rotinas UDF com o Fluent, foi avaliado o fluxo de calor radiativo nas paredes e o termo fonte radiativo comparando com os dados da solução com o modelo WSGG obtida com um código Fortran próprio. Os erros são calculados, para o fluxo de calor e o termo fonte radiativo, segundo as expressões abaixo:

$$erro_{q''_R}(s) = \frac{|q''_{WSGG,UDF} - q''_{WSGG,FORTAN}|}{\max |q''_{WSGG,FORTAN}|} (100\%) \quad (5.7)$$

$$erro_{\dot{q}_R}(s) = \frac{|\dot{q}_{WSGG,UDF} - \dot{q}_{WSGG,FORTAN}|}{\max |\dot{q}_{WSGG,FORTAN}|} (100\%) \quad (5.7)$$

onde  $q''_{WSGG}$  e  $\dot{q}_{WSGG}$  representam o fluxo de calor nas paredes e o termo fonte radiativo, respectivamente.

Os resultados obtidos estão organizados para razão entre as pressões parciais pressão parcial igual a 1,0 na Tabela 5.1 e para razão entre as pressões parciais igual a 2,0 na Tabela 5.2.

Tabela 5.1 – Erro calculado nas paredes para o fluxo de calor radiativo para razão de pressão parcial entre as espécies participantes igual a 1,0.

WSGG/UDF		L50S			L100S			L1000S		
		<i>erro</i> <sub>q<sub>R</sub></sub> <sup>*</sup> (%)			<i>erro</i> <sub>q<sub>R</sub></sub> <sup>*</sup> (%)			<i>erro</i> <sub>q<sub>R</sub></sub> <sup>*</sup> (%)		
		S=0,5m	S=1,0m	S=2,0m	S=0,5m	S=1,0m	S=2,0m	S=0,5m	S=1,0m	S=2,0m
Eq.(5.1)	s <sup>*</sup> =0	0,10	0,10	0,15	0,10	0,09	0,15	0,10	0,09	0,15
Eq.(5.4)	s <sup>*</sup> =1	0,10	0,10	0,15	0,10	0,09	0,15	0,10	0,09	0,15
Eq.(5.2)	s <sup>*</sup> =0	0,16	0,15	0,16	0,16	0,14	0,16	0,16	0,14	0,16
Eq.(5.5)	s <sup>*</sup> =1	0,16	0,15	0,16	0,16	0,14	0,16	0,16	0,14	0,16
Eq.(5.3)	s <sup>*</sup> =0	0,03	0,04	0,12	0,03	0,04	0,12	0,03	0,04	0,12
Eq.(5.6)	s <sup>*</sup> =1	0,07	0,07	0,10	0,07	0,07	0,10	0,07	0,07	0,10

Tabela 5.2 – Erro calculado nas paredes para o fluxo de calor radiativo para razão de pressão parcial entre as espécies participantes igual a 2,0.

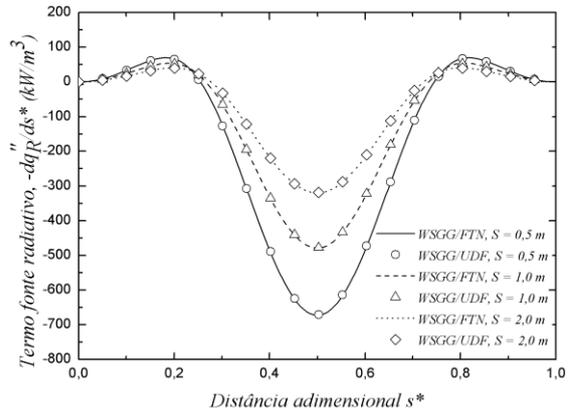
WSGG/UDF		L50S			L100S			L1000S		
		<i>erro</i> <sub>q<sub>R</sub></sub> <sup>*</sup> (%)			<i>erro</i> <sub>q<sub>R</sub></sub> <sup>*</sup> (%)			<i>erro</i> <sub>q<sub>R</sub></sub> <sup>*</sup> (%)		
		S=0,5m	S=1,0m	S=2,0m	S=0,5m	S=1,0m	S=2,0m	S=0,5m	S=1,0m	S=2,0m
Eq.(5.1)	s <sup>*</sup> =0	0,07	0,14	0,19	0,07	0,14	0,19	0,07	0,14	0,19
Eq.(5.4)	s <sup>*</sup> =1	0,07	0,14	0,19	0,07	0,14	0,19	0,07	0,14	0,19
Eq.(5.2)	s <sup>*</sup> =0	0,10	0,13	0,20	0,10	0,13	0,20	0,10	0,13	0,20
Eq.(5.5)	s <sup>*</sup> =1	0,10	0,13	0,20	0,10	0,13	0,20	0,10	0,13	0,20
Eq.(5.3)	s <sup>*</sup> =0	0,01	0,06	0,16	0,01	0,06	0,16	0,01	0,06	0,16
Eq.(5.6)	s <sup>*</sup> =1	0,06	0,10	0,12	0,06	0,10	0,12	0,06	0,10	0,12

Os resultados apresentados na Tabela 5.1 (razão de pressão parcial 1) apresentam erros máximos de 0,16% e para a Tabela 5.2 (razão de pressão parcial 2) erros máximos de 0,20% indicando, portanto, que as rotinas UDF conseguem prever o fluxo de calor radiativo nas paredes de maneira precisa. O modelo WSGG é o mesmo para o código FORTRAN próprio e

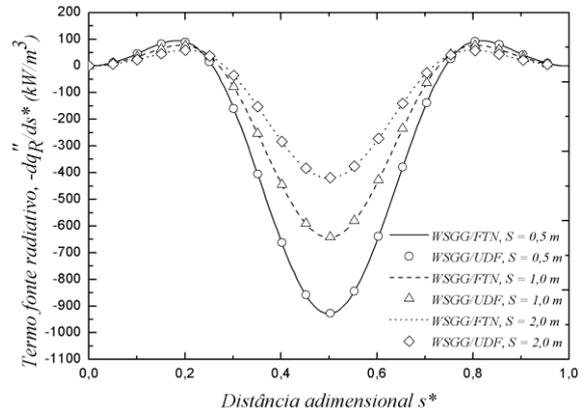
para o Fluent sendo as diferenças, portanto, devido à geometria bidimensional e ao número de direções da discretização angular para o modelo DOM. O termo fonte radiativo está representado graficamente nas Figuras 5.3 para razões de pressão parcial igual a 1,0 e 2,0. Os erros médios (calculado como a média aritmética dos erros ponto a ponto) e máximos para o termo fonte radiativo são apresentados na Tabelas 5.3 para razão de pressão parcial igual a 1,0 e razão de pressão parcial igual a 2,0.

Tabela 5.3 – Erros máximos e médios para o termo fonte radiativo para razões de concentração entre as espécies participantes iguais a 1,0 e 2,0.

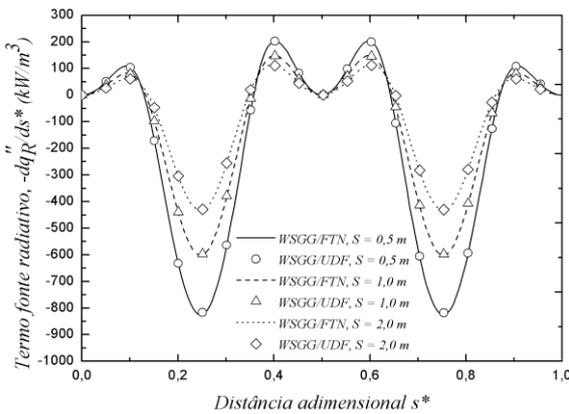
Perfil	S (m)	Razão 1,0		Razão 2,0	
		erro <sub><math>\dot{q}_R</math>,med</sub>	erro <sub><math>\dot{q}_R</math>,max</sub>	erro <sub><math>\dot{q}_R</math>,med</sub>	erro <sub><math>\dot{q}_R</math>,max</sub>
Eq.(5.1)	0,5	0,16	0,31	0,10	0,20
Eq.(5.4)	1,0	0,15	0,27	0,13	0,21
	2,0	0,18	0,38	0,18	0,46
Eq.(5.2)	0,5	0,29	0,91	0,19	0,54
Eq.(5.5)	1,0	0,35	0,76	0,23	0,57
	2,0	0,34	0,70	0,18	0,53
Eq.(5.3)	0,5	0,11	0,61	0,07	0,37
Eq.(5.6)	1,0	0,11	0,53	0,09	0,43
	2,0	0,14	0,78	0,13	0,74



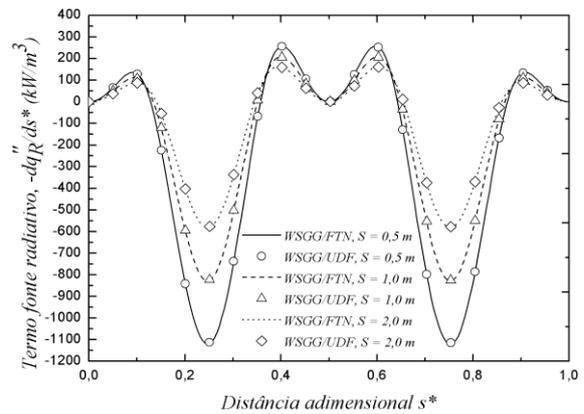
(a) Eq.(5.1) Eq.(5.4) para razão 1



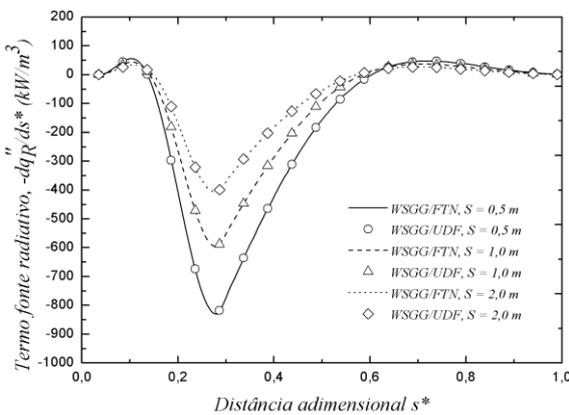
(b) Eq.(5.1) Eq.(5.4) para razão 2



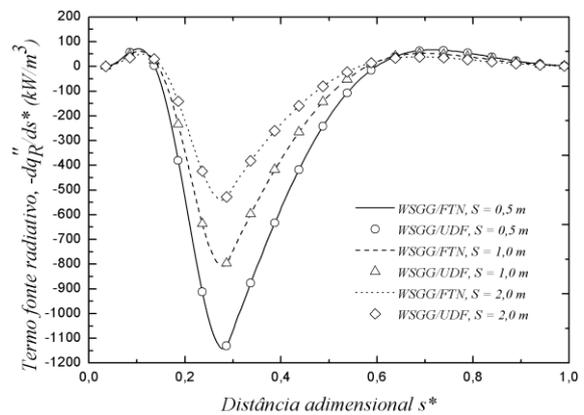
(c) Eq.(5.2) Eq.(5.5) para razão 1



(d) Eq.(5.2) Eq.(5.5) para razão 2



(e) Eq.(5.3) Eq.(5.6) para razão 1



(f) Eq.(5.3) Eq.(5.6) para razão 2

Figura 5.3 – Termo fonte para o perfil dado pelas Eq.(5.1)Eq.(5.4) para razão de pressão parcial 1,0 (a) e 2,0 (b); para o perfil dado pelas Eq.(5.2)Eq.(5.5) para razão de pressão parcial 1,0 (c) e 2,0 (d); para o perfil dado pelas Eq.(5.3)Eq.(5.6) para razão de pressão parcial igual 1,0 (e) 2,0 (f).

Os resultados na Tabela (5.3) apresentam erros inferiores a 1%, indicando que as curvas para o termo fonte radiativo obtidas com as rotinas UDF são praticamente coincidentes com as curvas calculadas com o código FORTRAN próprio. Com os resultados obtidos para o problema unidimensional, confirma-se o funcionamento correto das rotinas UDF acopladas ao Fluent. Portanto, o passo seguinte é a aplicação das rotinas para o modelo WSGG no problema multidimensional do escoamento reativo para as chamas laminares.

### 5.3 Estudo de qualidade de malha

O estudo de qualidade de malha, que tem por objetivo verificar o nível de independência da solução numérica com relação ao refinamento da malha computacional foi realizado segundo a abordagem *Grid Convergence Index* (GCI), apresentada por Roache, 1994, e atualizada por Celik et al., 2008.

O método do GCI permite avaliar o desvio percentual entre o resultado da simulação numérica com relação ao valor assintótico que seria obtido a partir de uma malha com infinitos volumes de controle (ou seja, uma malha de resolução zero). O estudo pode ser realizado para duas malhas com diferentes níveis de refinamento, entretanto é recomendado que seja realizado para três malhas.

O índice GCI para a malha mais refinada é definido como

$$GCI_{12} = \frac{F_s |\varepsilon_{12}|}{(r^p - 1)} \quad (5.7)$$

onde  $F_s$  é um fator de segurança ( $F_s = 3,0$  para comparação entre duas malhas e  $F_s = 1,25$  para comparação entre três malhas, conforme recomendado por Roache, 1994). O erro relativo  $\varepsilon_{12}$  é dado conforme

$$\varepsilon_{12} = \frac{f_2 - f_1}{f_1} \quad (5.8)$$

para qual  $f_1$  é a solução para a malha mais refinada e  $f_2$  a solução para a malha intermediária. Na equação (5.7),  $p$  é a ordem de convergência que pode ser obtida a partir de três soluções usando um fator de refinamento  $r$  constante com

$$p = \ln \left( \frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right) / \ln r \quad (5.9)$$

tendo sido adotado um valor de  $r = 1,875$ , ou seja, a cada nível de refinamento o número de volumes de controle da malha aumenta na proporção de  $r$ .

Uma vez obtidos os índices de convergência de malha  $GCI_{12}$  e  $GCI_{23}$ , a convergência da solução para a faixa assintótica é calculada como

$$\chi = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (5.10)$$

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

As malhas para o estudo foram construídas com o *software* ANSYS/ICEM sendo mais refinadas na região próxima à saída de combustível (Figura 5.4), região onde ocorrem as reações químicas, a fim de se obter uma solução mais precisa.

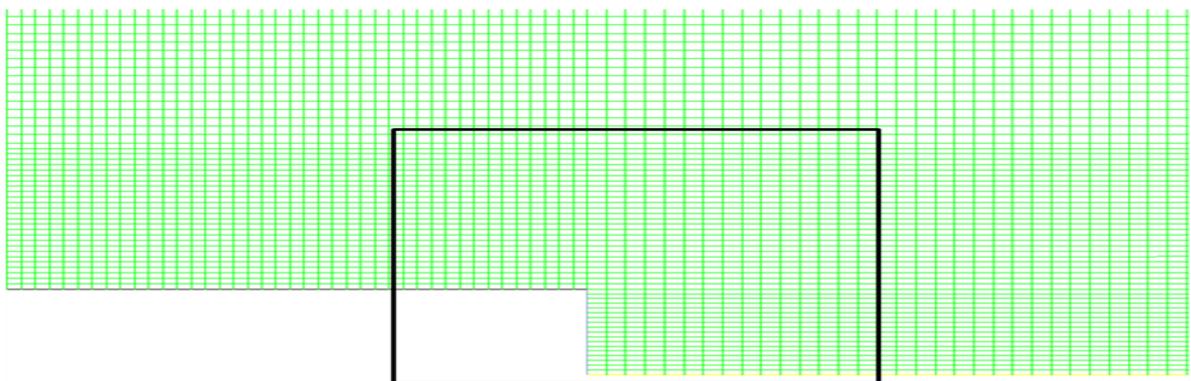


Figura 5.4 – Refino na região próxima à saída de combustível para as malhas construídas para o estudo de qualidade de malha.

As variáveis escolhidas para avaliar a qualidade da malha (identificadas por M1, M2 e M3, em ordem decrescente de refinamento) foram a temperatura máxima, as máximas frações molares de dióxido de carbono e vapor de água e o fluxo de calor radiativo máximo. Os valores obtidos com a solução computacional para a temperatura e a concentração das espécies participantes, para a chama sem diluição (chama PC0050C00 ou PC0050N00, Tabela 4.1), estão organizados na Tabela 5.4. Os valores calculados para o GCI e para  $\chi$  estão organizados na Tabela 5.5.

Tabela 5.4 – Valores numéricos para a temperatura e concentrações das espécies participantes para as três malhas adotadas.

Malha	Volumes	$T_{\max}$ (K)	$X_{\text{CO}_2, \max}$	$X_{\text{H}_2\text{O}, \max}$
M1	70875	2134,694	0,10238	0,17432
M2	37800	2135,645	0,10225	0,17378
M3	20160	2151,151	0,10191	0,17208

Tabela 5.5 – Valores calculados para o GCI e para  $\chi$  para a temperatura e para as concentrações das espécies participantes.

	$T_{\max}$	$X_{\text{CO}_2, \max}$	$X_{\text{H}_2\text{O}, \max}$
$GCI_{12}$ (%)	0,00363	0,10673	0,18095
$GCI_{23}$ (%)	0,05929	0,26812	0,57051
$\chi$	0,99955	1,00128	1,00311

Dados os baixos valores de GCI e os valores de  $\chi$  próximos de 1, considera-se que a malha M1 possui um nível adequado de refinamento.

O fluxo de calor radiativo foi avaliado para a malha M1, onde o GCI foi calculado para o número de  $\theta$  direções para a discretização angular (ao invés do número de volumes de controle, como feito para as outras variáveis de interesse) para um fator de refinamento  $r = 2$ . Os cálculos foram realizados de forma desacoplada a partir dos campos de temperatura e concentração das espécies participantes convergidos da simulação sem radiação para a malha M1. Os valores obtidos pela simulação numérica para o fluxo de calor radiativo estão

organizados na Tabela 5.6. Os valores calculados para o GCI e para  $\chi$  estão organizados na Tabela 5.7.

Tabela 5.6 – Valores numéricos para o fluxo de calor radiativo para os três níveis de discretização angular.

Direções ( $\theta$ )	$q''_{\max}$ (W/m <sup>2</sup> )
160	842,956
80	843,074
40	845,850

Tabela 5.7 – Valores calculados para o GCI e para  $\chi$  para o fluxo de calor radiativo.

	$q''_{\max}$
$GCI_{12}$ (%)	0,00077
$GCI_{23}$ (%)	0,01827
$\chi$	0,99986

Desta forma considera-se que 160 direções sejam suficientes devido aos baixos valores de GCI encontrados e ao valor de  $\chi$  próximo de 1.

## 6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos a partir da simulação numérica para as chamas descritas no Capítulo 4, estando dividido em duas partes: primeiro são discutidos resultados globais como a temperatura máxima, concentração das espécies participantes e fração radiante em função do percentual de diluição; por fim são discutidos os resultados referentes às chamas sem diluição e com diluição de 20% e 40% de  $\text{CO}_2$  e  $\text{N}_2$  para o fluxo de calor radiativo e o termo fonte radiativo, bem como uma análise da validade das correlações do modelo WSGG para as chamas estudadas. Os resultados para o modelo WSGG com as correlações geradas por Dorigon et al., 2013, serão referidos como “WSGG/Dorigon”, enquanto que os resultados para o modelo GG apresentado por Cassol et al., 2014a, serão referidos como “GG/Cassol”. Quando não foi considerada a modelagem da radiação térmica, os resultados serão referidos como “Sem radiação”.

### 6.1 Análise dos resultados globais

O uso de diluentes nos reagentes se constitui em uma alternativa simples para alterar características de chamas devido às mudanças nos parâmetros da combustão provocados pela diluição. O gás nitrogênio ( $\text{N}_2$ ) participa nas reações de formação de  $\text{NO}_x$ , entretanto para as condições estudadas, pode ser modelado como um gás inerte, ou seja, como um gás não participante das reações químicas. Entretanto sua diluição altera outras propriedades da mistura como, por exemplo, o calor específico e a concentração de combustível na zona de reação, ocasionando em um decréscimo na temperatura da chama. Como consequência, em menor escala, as concentrações das espécies participantes também são afetadas. A combinação dos efeitos da diluição sobre a temperatura e a concentração influencia diretamente na transferência radiativa, uma vez que esses são os principais parâmetros envolvidos no fenômeno.

Os dados numéricos para as máximas temperatura e fração molar das espécies participantes em função do percentual de diluição de  $\text{N}_2$  são apresentados graficamente nas Figuras 6.1 e 6.2.

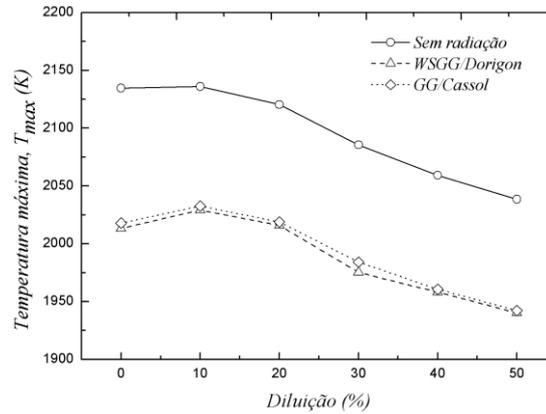
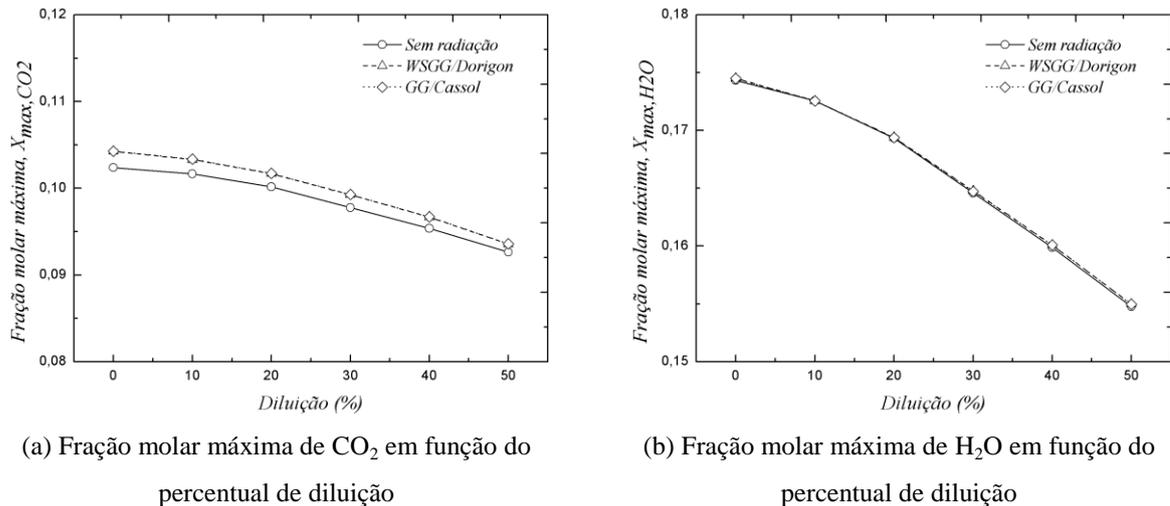


Figura 6.1 – Temperatura máxima em função do percentual de diluição para a série de chamas com diluição de  $N_2$ .



(a) Fração molar máxima de  $CO_2$  em função do percentual de diluição

(b) Fração molar máxima de  $H_2O$  em função do percentual de diluição

Figura 6.2 – Fração molar máxima de  $CO_2$  (a) e fração molar máxima de  $H_2O$  (b) em função do percentual de diluição para a série de chamas com diluição de  $N_2$ .

Como é possível observar da Figura 6.1, para todos os casos considerados (sem radiação e com os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol) a máxima temperatura no domínio computacional diminui com o percentual de diluição. O modelo GG/Cassol apresentou temperaturas ligeiramente maiores se comparado ao modelo WSGG/Dorigon. Ainda, há uma diferença em torno de 100 K entre a temperatura sem a modelagem da radiação e a obtida com a simulação acoplada, indicando a importância da inclusão da radiação térmica no modelo computacional a fim de se obter corretamente os campos de temperatura. A figura 6.2

mostra que para as concentrações das espécies participantes o efeito das perdas por radiação e do modelo espectral empregado é menos significativo, ou seja, os valores de concentração sofrem alterações muito pequenas frente à abordagem adotada para o tratamento da radiação térmica, principalmente para o  $\text{H}_2\text{O}$ . Novamente o modelo GG/Cassol apresenta concentrações levemente maiores que o modelo WSGG/Dorigon. É importante ressaltar que resultados globais referentes à estrutura da chama, como a temperatura e a concentração das espécies da mistura são sensíveis à escolha do mecanismo de cinética química adotado. Para o presente estudo foi feita a escolha pelo mecanismo *skeleton* skm-DRM19, entretanto respostas levemente diferentes seriam encontradas para um mecanismo global ou para um mecanismo detalhado. Portanto a opção pela abordagem da cinética química ainda pode ser objeto de posterior investigação.

O gás dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) é um dos principais produtos da combustão (junto com o vapor de água,  $\text{H}_2\text{O}$ ) e diferentemente do  $\text{N}_2$  participa das reações químicas, ou seja, não é um gás inerte e ainda é um dos principais gases envolvidos na troca radiativa absorvendo e emitindo energia. Portanto, a diluição dos reagentes com  $\text{CO}_2$  tem influência tanto na cinética química quanto na transferência de calor por radiação, sendo um importante agente na extinção de chamas. Além disso, a diluição com dióxido de carbono é muito eficiente na redução da formação de fuligem em chamas difusivas, importante para o presente estudo uma vez que a fuligem foi desconsiderada do modelo numérico.

Assim como para o  $\text{N}_2$ , conforme aumenta o percentual de diluição de  $\text{CO}_2$  nos reagentes, a temperatura da chama é reduzida e as concentrações das espécies químicas na mistura são afetadas. Os dados numéricos para as máximas temperatura e fração molar das espécies participantes ao longo da linha de centro em função do percentual de diluição de  $\text{CO}_2$  são apresentados graficamente nas Figuras 6.3 e 6.4.

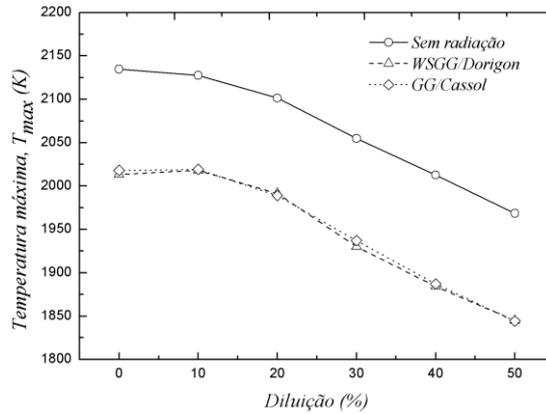
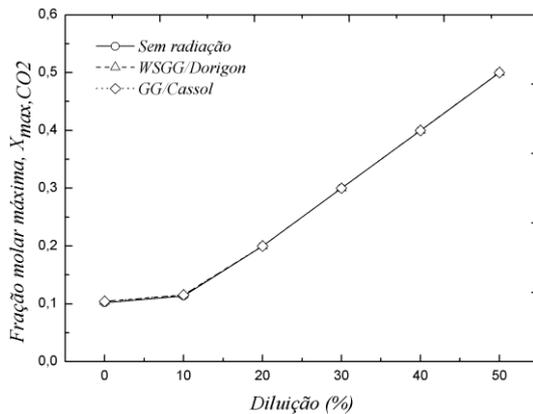
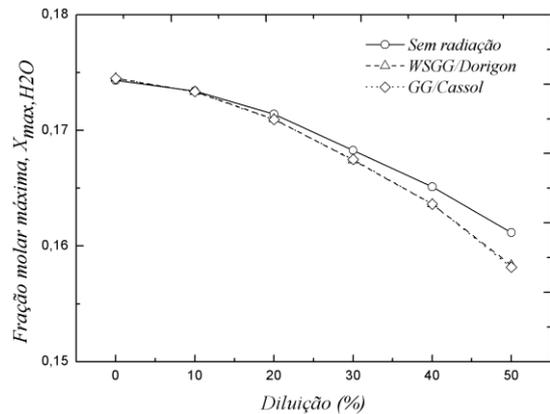


Figura 6.3 – Temperatura máxima ao longo da linha de centro versus percentual de diluição para a série de chamas com diluição de  $\text{CO}_2$ .



(a) Fração molar máxima de  $\text{CO}_2$  em função do percentual de diluição



(b) Fração molar máxima de  $\text{H}_2\text{O}$  em função do percentual de diluição

Figura 6.4 – Fração molar máxima de  $\text{CO}_2$  (a) e fração molar máxima de  $\text{H}_2\text{O}$  (b) ao longo da linha de centro versus percentual de diluição para a série de chamas com diluição de  $\text{CO}_2$ .

Como é possível observar da Figura 6.3 a temperatura diminui com a diluição para todas as abordagens para a radiação térmica. Ainda, de forma consistente com os resultados obtidos para a diluição com  $\text{N}_2$ , as temperaturas para o modelo GG/Cassol são maiores se comparadas com o modelo WSGG/Dorigon apontando uma tendência. Comparativamente com as chamas diluídas com  $\text{N}_2$  as temperaturas são sensivelmente menores, entretanto, para as concentrações das espécies participantes, conforme mostra a Figura 6.4, as concentrações

são maiores para o  $\text{CO}_2$  devido à diluição e semelhantes para o  $\text{H}_2\text{O}$  que diminui de concentração conforme aumenta o percentual de diluição.

Outro fator importante a ser comparado entre os diferentes diluentes diz respeito à distribuição espacial de  $\text{CO}_2$ . A figura 6.5 traz os perfis de concentração de  $\text{CO}_2$  para chamas sem diluição e com uma diluição de 50% de ambos os diluentes.

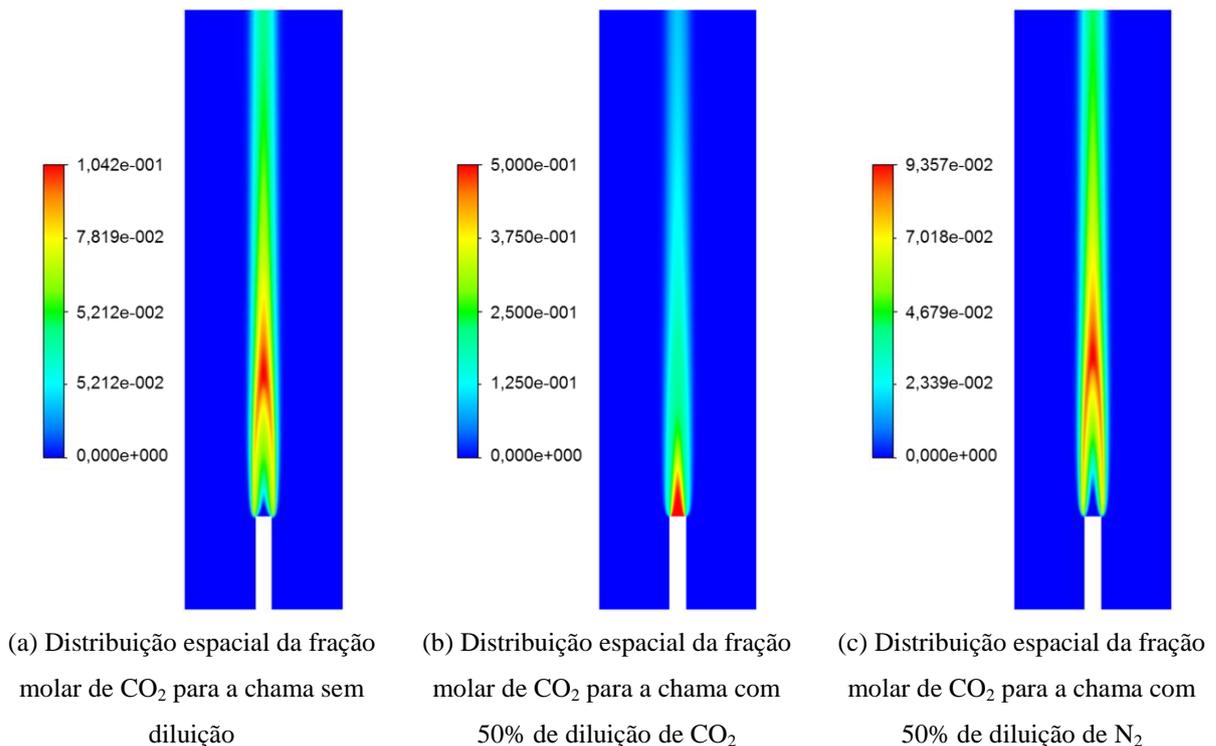


Figura 6.5 – Distribuição espacial de  $\text{CO}_2$  para a chama sem diluição (a), com diluição de 50% de  $\text{CO}_2$  (b) e com diluição de 50% de  $\text{N}_2$  (c).

Para as chamas com diluição de  $\text{N}_2$  a distribuição espacial de  $\text{CO}_2$  coincide com a distribuição para a chama sem diluição. No entanto para as chamas com diluição de  $\text{CO}_2$  a distribuição espacial muda substancialmente, se concentrando na região próxima do bocal do combustível e não apresentando mais a estrutura de *wishbone* que é vista para as outras chamas. É importante destacar que até 30% de diluição de  $\text{CO}_2$  essa estrutura é mantida e desaparece a partir de então apresentando a estrutura indicada na Figura 6.5.

A Figura 6.6 traz as distribuições espaciais de temperatura e  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$  e  $\text{O}_2$  para a chama sem diluição. Uma vez que esses campos, na sua forma, não são significativamente afetados pelos diferentes diluentes, se repetem para todas as chamas estudadas.

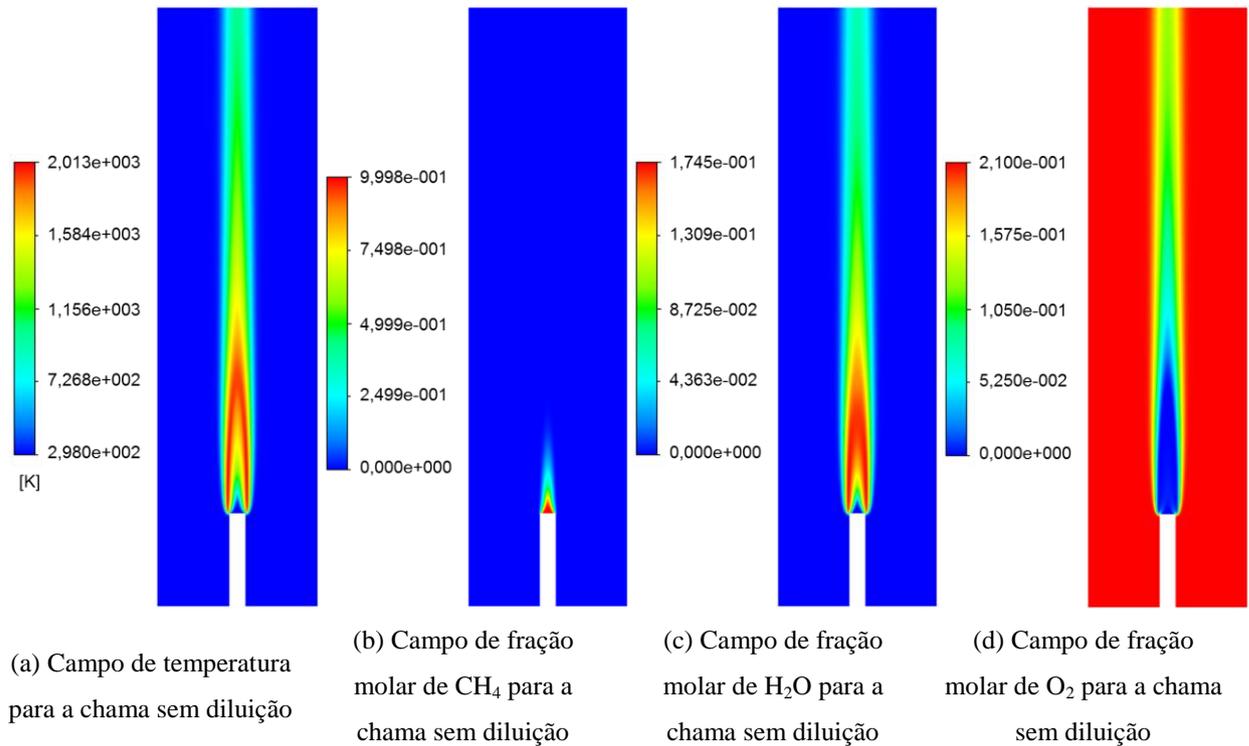


Figura 6.6 – Distribuição espacial de temperatura (a),  $\text{CH}_4$  (b),  $\text{H}_2\text{O}$  (c) e  $\text{O}_2$  (d) para a chama sem diluição.

A fração radiante, definida como a fração da energia total que é liberada pela chama e que é transferida para o meio por radiação segundo a Equação (4.1), dá indicativos importantes dos efeitos da diluição na transferência radiativa. A Figura 6.7 apresenta graficamente a fração radiante medida experimentalmente e para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol em função do percentual de diluição para os diferentes diluentes.

Diferentemente da obtenção experimental da fração radiante onde foram medidos os fluxos radiativos para diferentes posições ao longo do eixo da chama a uma determinada distância, para a simulação numérica a taxa de calor liberada pela chama por radiação para a parede lateral (*radiative transfer rate*) é obtida diretamente da integração sobre a superfície e reportada pelo código CFD ANSYS/Fluent. Alternativamente, a fração radiante poderia ser obtida de modo análogo ao experimental utilizando-se o fluxo radiativo nos mesmos pontos para os quais foram feitas as medidas experimentais. Entretanto optou-se pela primeira opção pelo fato de a integração na superfície apontar dados com mais precisão do que uma avaliação discreta de pontos ao longo da superfície.

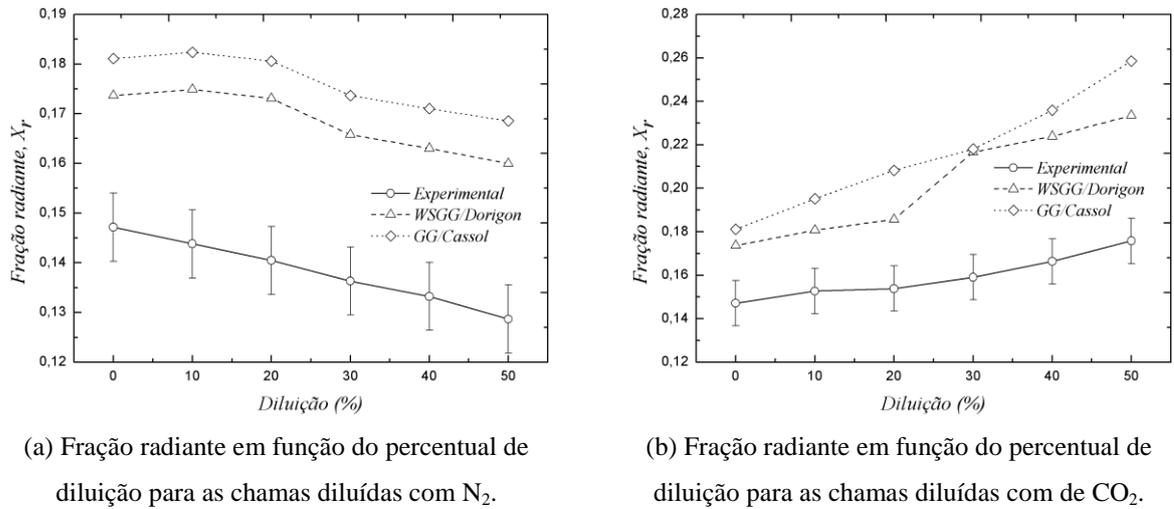


Figura 6.7 – Fração radiante em função do percentual de diluição para as chamas diluídas com  $N_2$  (a) e para as chamas diluídas com  $CO_2$  (b).

Os valores obtidos a partir da simulação numérica para a fração radiante são superiores aos valores obtidos experimentalmente para todos os casos estudados, indicando que a perda radiativa para a solução numérica é superestimada em relação ao experimento. Ainda, o modelo GG/Cassol apresentou valores superiores aos valores para o modelo WSGG/Dorigon. Conseqüentemente o fluxo de calor radiativo e o termo fonte para o modelo GG/Cassol se apresentarão superiores aos obtidos com o modelo WSGG/Dorigon. Para as chamas diluídas com  $N_2$  a fração radiante diminuiu com o aumento do percentual de diluição, enquanto que para as chamas com diluição de  $CO_2$  o comportamento apresentado foi o oposto. Uma vez que as temperaturas reduzem com a diluição para ambos os diluentes, os resultados para a fração radiante apontam para a predominância da composição do meio nas trocas radiativas frente à temperatura.

Embora não se tenham disponíveis dados para o levantamento de chama, há indicativos na literatura das influências da diluição dos reagentes e das perdas radiativas no levantamento. Para as simulações realizadas sem o acoplamento da radiação térmica (ou seja, sem perdas de calor) notou-se que independentemente do nível de diluição a chama permanece ancorada ao queimador e que, posteriormente, quando apreciadas as perdas radiativas no modelo, as chamas se apresentavam com levantamento. Ainda, as chamas com maior índice de diluição foram as que o efeito do levantamento mostrou-se mais intenso.

Outro fator importante que influencia no levantamento de chama é a perda de calor da base da chama para o tubo do queimador que é modelado como uma superfície adiabática, portanto o efeito do pré-aquecimento dos reagentes é negligenciado. A Figura 6.8 apresenta, para as chamas com 40% de diluição para ambos os diluentes, o campo de temperatura na região próxima à saída de combustível sem e com as perdas radiativas para evidenciar o efeito da modelagem da radiação térmica e da diluição no levantamento de chama.

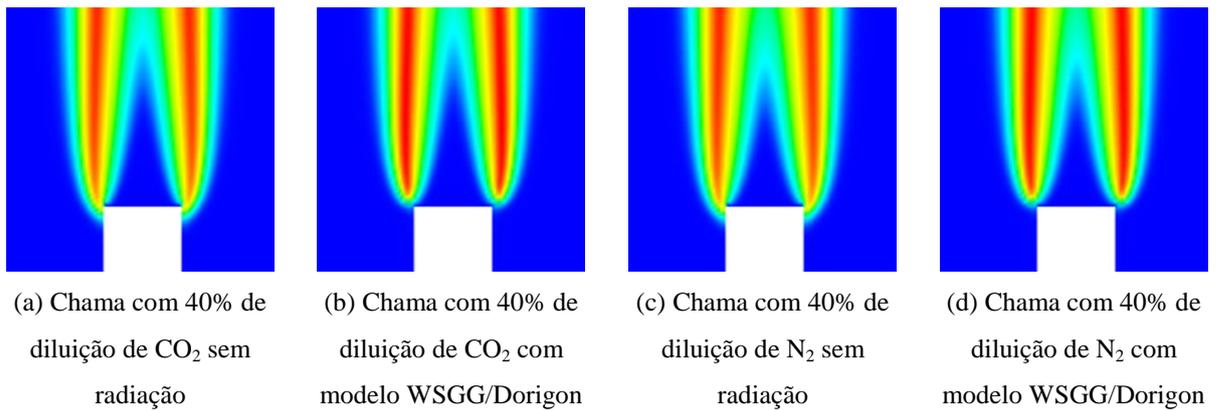


Figura 6.8 – Campo de temperatura próximo à saída de combustível para as chamas com 40% de diluição de  $\text{CO}_2$  sem as perdas radiativas (a) e com as perdas radiativas (b); e para a chama com 40% de diluição de  $\text{N}_2$  sem as perdas radiativas (c) e com as perdas radiativas (d).

O levantamento de chama possui influência direta sobre o comprimento de chama visível, para o qual Machado, 2015, obteve medidas experimentais. Uma possibilidade de comparação entre a solução numérica e as medidas seria delimitar a chama pelo perfil do radical CH, que emite radiação preferencialmente na região azul do espectro visível, para determinar o comprimento de chama para a chama numérica. Entretanto, dada a dificuldade de se estabelecer um critério adequado para a comparação entre experimento e os dados da simulação, uma vez que as medidas foram realizadas baseadas no comprimento visível a partir de imagens obtidas por uma câmera digital, optou-se pela não apreciação para esse aspecto das chamas.

## 6.2 Análise dos resultados para a chama sem diluição

A chama sem diluição é identificada com a TAG PC0050N00 ou com a TAG PC0050C00, conforme a Tabela 4.1 e correspondem, portanto, à mesma chama. A Figura 6.9 apresenta graficamente o fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para as medidas experimentais obtidas por Machado, 2015 e para os dados da simulação com o Fluent com o acoplamento das rotinas UDF para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol. Como é possível observar, qualitativamente as curvas obtidas numericamente para o fluxo de calor radiativo seguem a mesma tendência dos dados experimentais. Nota-se que há uma maior concordância entre os dados experimentais e numéricos principalmente na região dos maiores fluxos e que, para a região da pluma aquecida ascendente há uma maior divergência entre a solução numérica e as medidas experimentais. A parte superior do domínio computacional apresenta para a radiação uma condição de contorno de corpo negro externo a uma temperatura constante (298 K), que pode estar provocando um aumento no fluxo radiativo devido à sua proximidade. Alternativamente se poderia alongar o domínio a fim de minimizar essa influência, todavia com um ganho de tempo computacional e uma dificuldade adicional na convergência da solução numérica devido ao efeito do empuxo.

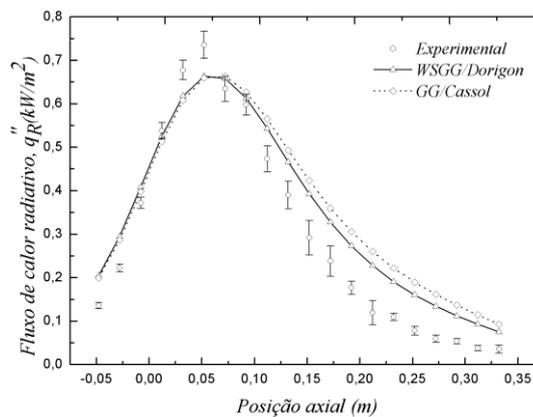


Figura 6.9 – Gráfico do fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama.

Para fins de comparação, o desvio entre a solução numérica e as medidas experimentais para o fluxo de calor radiativo foi calculado conforme

$$desv_{q_R''}(x) = \frac{|q_{R,num}'' - q_{R,exp}''|}{\max |q_{R,exp}''|} (100\%) \quad (6.1)$$

onde  $q_{R,num}''$  e  $q_{R,exp}''$  representam, respectivamente, os fluxos de calor obtidos a partir da solução numérica e da abordagem experimental. O desvio médio para cada chama foi calculado como a média aritmética dos desvios calculados ponto a ponto conforme a Eq. (6.1). As tabelas com os desvios ponto a ponto e com o desvio médio para cada modelo para esta (e todas as chamadas simuladas) se encontram no Apêndice A.

Para o modelo WSGG/Dorigon o desvio médio entre a solução numérica e os dados experimentais para o fluxo de calor radiativo ao longo do eixo da chama ficou em 8,80%. Os menores desvios se concentraram na região próxima dos maiores fluxos, onde há maior concordância entre as curvas. O desvio máximo foi de 14,79% estando em um ponto da pluma aquecida ( $x = 0,212 \text{ m}$ ), em conformidade com a tendência explicitada pelo gráfico. Para o modelo GG/Cassol o desvio médio entre os dados experimentais e a solução numérica ficou em 11,17%. Novamente os menores desvios foram encontrados na região dos maiores fluxos e o desvio máximo, de 19,16%, foi encontrado na região da pluma aquecida para  $x = 0,121 \text{ m}$ . Como esperado, o modelo WSGG/Dorigon apresentou resultados sensivelmente mais precisos que o modelo GG/Cassol, mesmo com uma abordagem mais detalhada do coeficiente de absorção para o segundo em relação ao modelo GG tradicional.

O termo fonte radiativo, calculado como o negativo do divergente do fluxo radiativo, aponta o balanço entre a energia que é emitida e a energia que é absorvida pelo meio participante. Valores negativos para o termo fonte indicam que naquele ponto o meio emite mais radiação que absorve e valores positivos indicam a predominância da absorção sobre a emissão. A Figura 6.10 mostra o termo fonte radiativo para diferentes linhas axiais e radiais para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol.

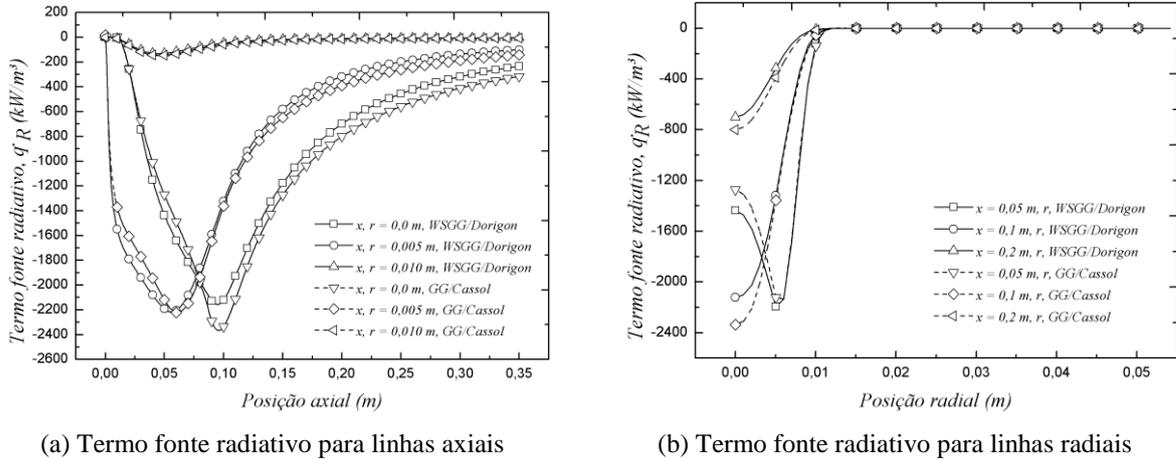


Figura 6.10 – Termo fonte radiativo para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b) ao longo do domínio.

A Figura 6.11 apresenta, para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol, os perfis de temperatura e concentração das espécies participantes para as linhas axiais e radiais em que o termo fonte radiativo foi obtido.

Como indicado pela fração radiante e pelos valores do fluxo de calor radiativo, o termo fonte para o modelo GG/Cassol mostra uma predominância da emissão do meio sobre a absorção para toda a chama, sendo mais acentuada em relação ao modelo WSGG/Dorigon. É importante notar que radialmente para ambos os modelos o termo fonte se aproxima de zero onde não há mais gases participantes (vide linhas radiais), um indicativo do correto funcionamento das rotinas UDF acopladas ao código CFD. Ainda, para a Figura 6.11, nota-se que os perfis de temperatura e concentração das espécies participantes são praticamente coincidentes para as linhas onde o termo fonte radiativo foi apreciado indicando, portanto, que as diferenças encontradas são devido à forma como o modelo espectral trata o coeficiente de absorção.

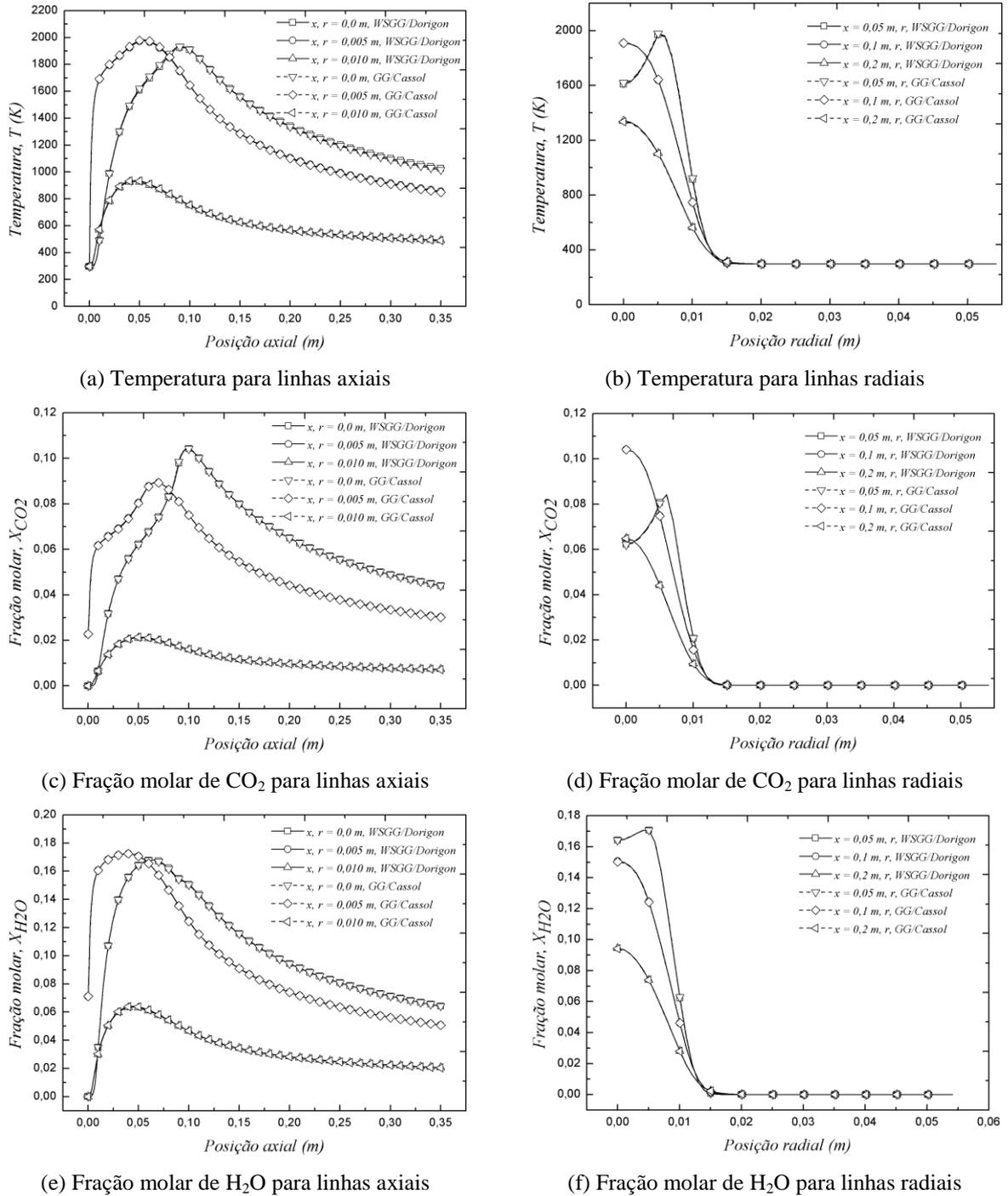


Figura 6.11 – Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de  $\text{CO}_2$  para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de  $\text{H}_2\text{O}$  para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio.

A partir das figuras para as concentrações das espécies participantes ao longo das linhas axiais e radiais é possível notar o comportamento não uniforme da concentração e, por

consequente, que a razão de concentração não se mantém constante como prevêem as correlações obtidas por Dorigon et al., 2013, onde foram consideradas razões constantes de 1,0 e 2,0 para o meio. A Figura 6.12 traz as razões de concentração das espécies participantes para as linhas onde foi obtido o termo fonte radiativo para o modelo WSGG/Dorigon. A linha vermelha indica o valor da razão para o qual as correlações são válidas, neste caso, igual a 2,0.

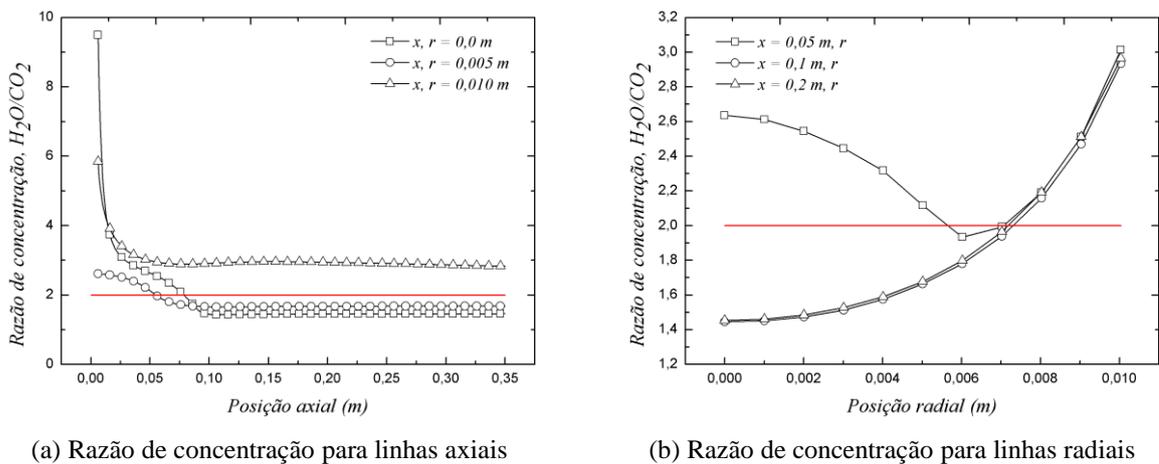


Figura 6.12 – Razão de concentração das espécies participantes para as linhas axiais (a) e radiais (b) em que o termo fonte radiativo foi obtido para o modelo WSGG/Dorigon.

Como é possível observar na Figura 6.12, a razão de concentração das espécies participantes ao longo do domínio apresenta um desvio com relação ao valor para o qual as correlações são válidas, principalmente para os perfis radiais. Para os perfis axiais as maiores discrepâncias aparecem na região próxima à entrada de combustível e se estabilizam razoavelmente próximas da razão adequada ao longo do domínio. Na média, entretanto, tanto os valores axiais quanto os valores radiais para a razão de concentração ficaram próximos de 2,0. Para os perfis radiais as razões de concentração foram calculadas até o valor de  $r = 0,01$  m (acima desse valor as concentrações se aproximam de zero). A tabela 6.1 apresenta as médias das razões de concentração das espécies participantes calculadas para as linhas axiais e radiais ao longo do domínio.

Tabela 6.1 – Médias das razões de concentração entre as espécies participantes para o modelo WSGG/Dorigon para linhas axiais e radiais ao longo do domínio.

Linha	Média
x, r = 0,000 m	2,19
x, r = 0,005 m	1,81
x, r = 0,010 m	3,16
x = 0,05 m, r	2,39
x = 0,100 m, r	1,86
x = 0,200 m, r	1,87

Onde a razão de concentração é inferior àquela para a qual as correlações foram geradas, o modelo “entende” que há mais vapor de água no domínio e a absorção de radiação é superestimada enquanto que onde a razão é inferior, o modelo subestima a absorção por “entender” que há menos vapor de água no domínio. Essa variação da razão de concentração se constitui, portanto, em um importante fator de erro na solução numérica e evidencia uma limitação do modelo WSGG em geral. Uma alternativa para superar essa dificuldade é a aplicação do modelo WSGG da superposição apresentado por Cassol et al., 2014b, onde a formulação leva em conta essa variação nas concentrações ao longo do domínio. Todavia para misturas de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O são necessários 25 gases cinza para a modelagem da radiação o que torna a simulação detalhada de chama inviável do ponto de vista computacional. Dado que, de forma global, as concentrações na média ficaram próximas da validade das correlações para o WSGG e a boa concordância encontrada para o fluxo radiativo, o modelo WSGG/Dorigon se comporta bem e pode ainda assim ser aplicado na simulação detalhada de chamas laminares.

### 6.3 Análise dos resultados para as chamas com diluição de N<sub>2</sub>

Como discutido na Seção 6.1, o N<sub>2</sub> como diluente atua na chama reduzindo sensivelmente a temperatura da chama e a concentração das espécies participantes. Como principal fator de impacto na transferência radiativa a redução da temperatura indica para uma redução do fluxo radiativo com o aumento da diluição. Ainda, os valores decrescentes da fração radiante com a diluição apontam novamente para a redução do fluxo de calor radiativo. A Figura 6.13 traz o máximo fluxo radiativo em função da diluição para todas as chamas da

série de chamas diluídas com nitrogênio. Conforme esperado, o fluxo de calor reduz com a diluição para ambos os modelos espectrais sendo maiores para o modelo GG/Cassol em relação ao modelo WSGG/Dorigon, corroborando as expectativas da fração radiante onde essa tendência foi apontada devido aos valores superiores apresentados pelo modelo GG/Cassol. Ainda pode-se notar que somente para a chama sem diluição os dados da simulação numérica não estão dentro de intervalo da incerteza experimental. A chama sem diluição é a que tem maior concentração de fuligem dentre todas as chamas estudadas e este fator, negligenciado no modelo numérico, pode ser um dos fatores influenciando na discrepância entre os valores encontrados.

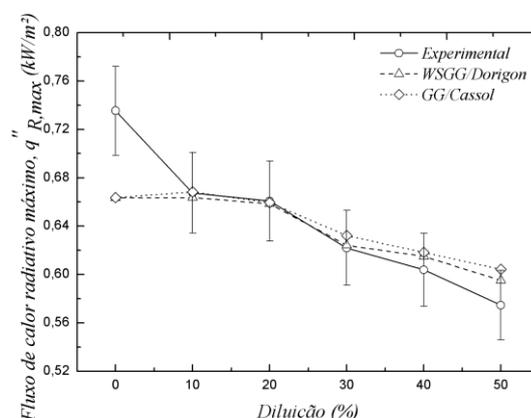
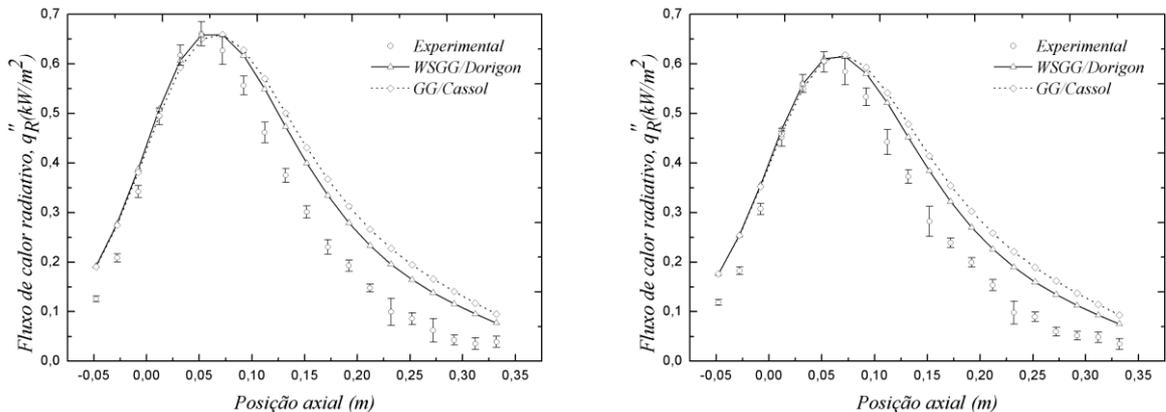


Figura 6.13 – Fluxo de calor radiativo máximo em função do percentual de diluição para a série de chamas diluídas com  $N_2$ .

O fluxo de calor obtido a partir das simulações numéricas para ambos os modelos espectrais é apresentado na Figura 6.14 para as chamas com 20% e 40% de diluição (identificadas pelas TAGs PC0050N20 e PC0050N40, respectivamente). Qualitativamente as curvas seguem a mesma tendência dos dados experimentais, apresentando maiores discrepâncias para a região da pluma aquecida. Também se pode notar que os picos para a solução numérica ficaram deslocados em relação aos picos experimentais, indicando para um maior comprimento de chama para as chamas numéricas ou um levantamento superestimado. O modelo numérico não conta, por exemplo, com o pré-aquecimento dos reagentes uma vez que a parede lateral do duto injetor de combustível é modelada como parede adiabática. O material do queimador (latão) recebe energia da base da chama que é transferida para o

combustível, decorrendo em um menor levantamento de chama para os experimentos. Uma possibilidade para contornar essa dificuldade seria impor uma temperatura maior para os reagentes, entretanto não seria uma modelagem realística e preferiu-se por manter a temperatura ambiente de 298 K. Ainda, o pré-aquecimento dos reagentes pode não ser o fator predominante na diferença entre os picos do fluxo radiativo. Um estudo do levantamento de chama e da temperatura dos reagentes é necessário para estabelecer uma relação entre os efeitos.



(a) Fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para a chama PC0050N20

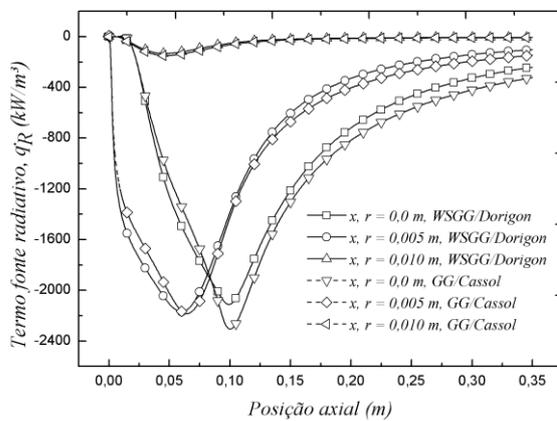
(b) Fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para a chama PC0050N40

Figura 6.14 – Gráfico do fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para as chamas PC0050N20 (a) e PC0050N40 (b).

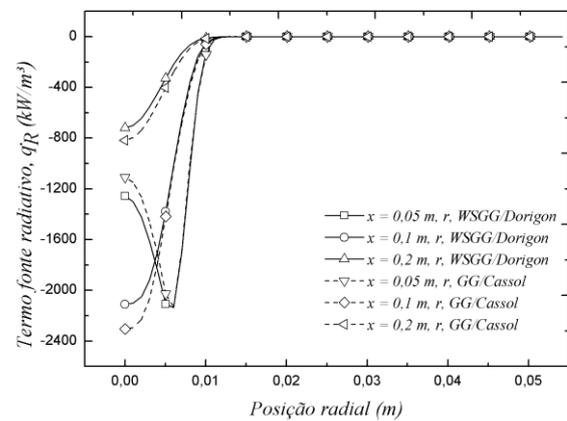
Para a chama com 20% de diluição o desvio médio ficou em 9,71% e o desvio máximo foi de 15,79% em  $x = 0,172 \text{ m}$ , na região da pluma aquecida para o modelo WSGG/Dorigon. Os menores desvios ficaram na região dos maiores fluxos. Para o modelo GG/Cassol o desvio médio ficou em 12,31% enquanto que o desvio máximo foi de 20,76% em  $x = 0,172 \text{ m}$ . Os fluxos para ambos os modelos ficaram muito próximos e as maiores discrepâncias aparecem na região da pluma aquecida. Para a chama com 40% de diluição o desvio médio ficou em 9,51% e o desvio máximo foi de 16,87% em  $x = 0,152 \text{ m}$  para o modelo WSGG/Dorigon. Para o modelo GG/Cassol o desvio médio foi de 12,29% enquanto o desvio máximo foi de 21,92% em  $x = 0,152 \text{ m}$ . As maiores discrepâncias entre os modelos apareceram, novamente, na região da pluma aquecida, região onde os dados numéricos apresentam maior discordância com os dados experimentais para todas as chamas simuladas.

Os desvios para a região inferior à base da chama são principalmente afetados pela região do comprimento de chama ( $0\text{ m} < x < 0,1\text{ m}$ , aproximadamente), onde há uma boa concordância dos dados numéricos com os dados experimentais. Na região do comprimento de chama os desvios são afetados pela região pós-chama (pluma aquecida), onde há uma menor concordância entre os dados numéricos e experimentais. A região da pluma aquecida sofre tanto a influência da região do comprimento de chama quanto da condição de contorno superior do domínio computacional e é onde aparecem as maiores discrepâncias entre a solução numérica e os dados do experimento.

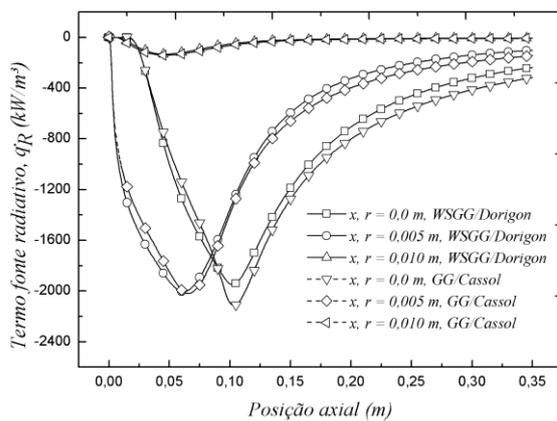
A Figura 6.15 apresenta o termo fonte radiativo para diversas linhas axiais e radiais ao longo do domínio para ambas as chamas para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol.



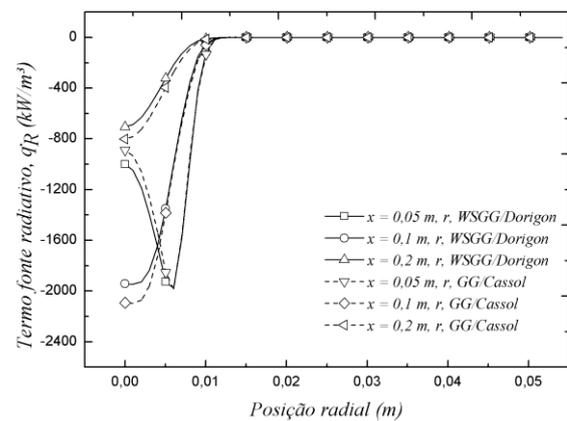
(a) Chama PC0050N20



(b) Chama PC0050N20



(c) Chama PC0050N40



(d) Chama PC0050N40

Figura 6.15 – Termo fonte radiativo para a chama PC0050N20 para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); e para a chama PC0050N40 para linhas axiais (c) e linhas radiais (d) ao longo do domínio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol.

Como esperado, devido aos valores de fluxo radiativo superiores, o termo fonte radiativo para ambas as chamas para o modelo GG/Cassol apresenta uma maior predominância da emissão em relação à absorção se comparada com o modelo WSGG/Dorigon. Ou seja, em termos absolutos, os valores do termo fonte para o modelo GG/Cassol são superiores aos obtidos pelo modelo WSGG/Dorigon. A Figura 6.16 apresenta, para a chama PC0050N20, os perfis de temperatura e concentração de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  para as linhas axiais e radiais ao longo do domínio para as quais foi obtido o termo fonte radiativo para ambos os modelos espectrais. A Figura 6.17 apresenta para a chama PC0050N40 os perfis de temperatura e concentração de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  para as linhas axiais e radiais ao longo do domínio para as quais foi obtido o termo fonte radiativo para ambos os modelos espectrais.

As Figuras 6.16 e 6.17 mostram que, assim como para a chama sem diluição, os perfis de temperatura e concentração para ambos os modelos são praticamente coincidentes e as diferenças nos valores obtidos para o termo fonte derivam unicamente da formulação dos modelos espectrais. Ainda, a variação das concentrações das espécies participantes aparece novamente e, conseqüentemente, a razão de concentração não se mantém constante, desrespeitando a validade das correlações. A Figura 6.18 apresenta a razão de concentração para linhas radiais e axiais para ambas as chamas para o modelo WSGG/Dorigon.

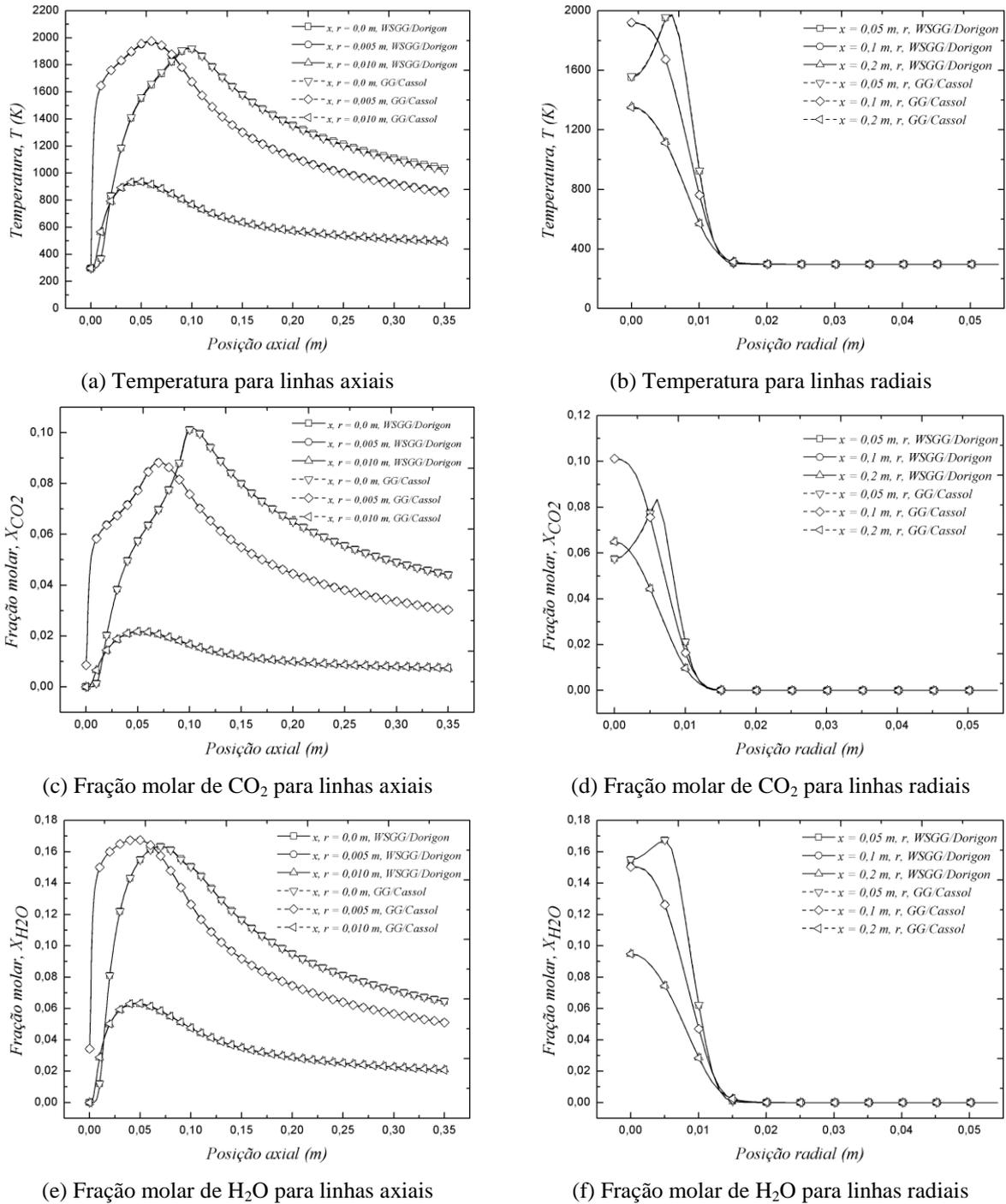


Figura 6.16 – Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e radiais (b); perfis fração molar de  $\text{CO}_2$  para linhas axiais (c) e radiais (d); perfis de fração molar de  $\text{H}_2\text{O}$  para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050N20.

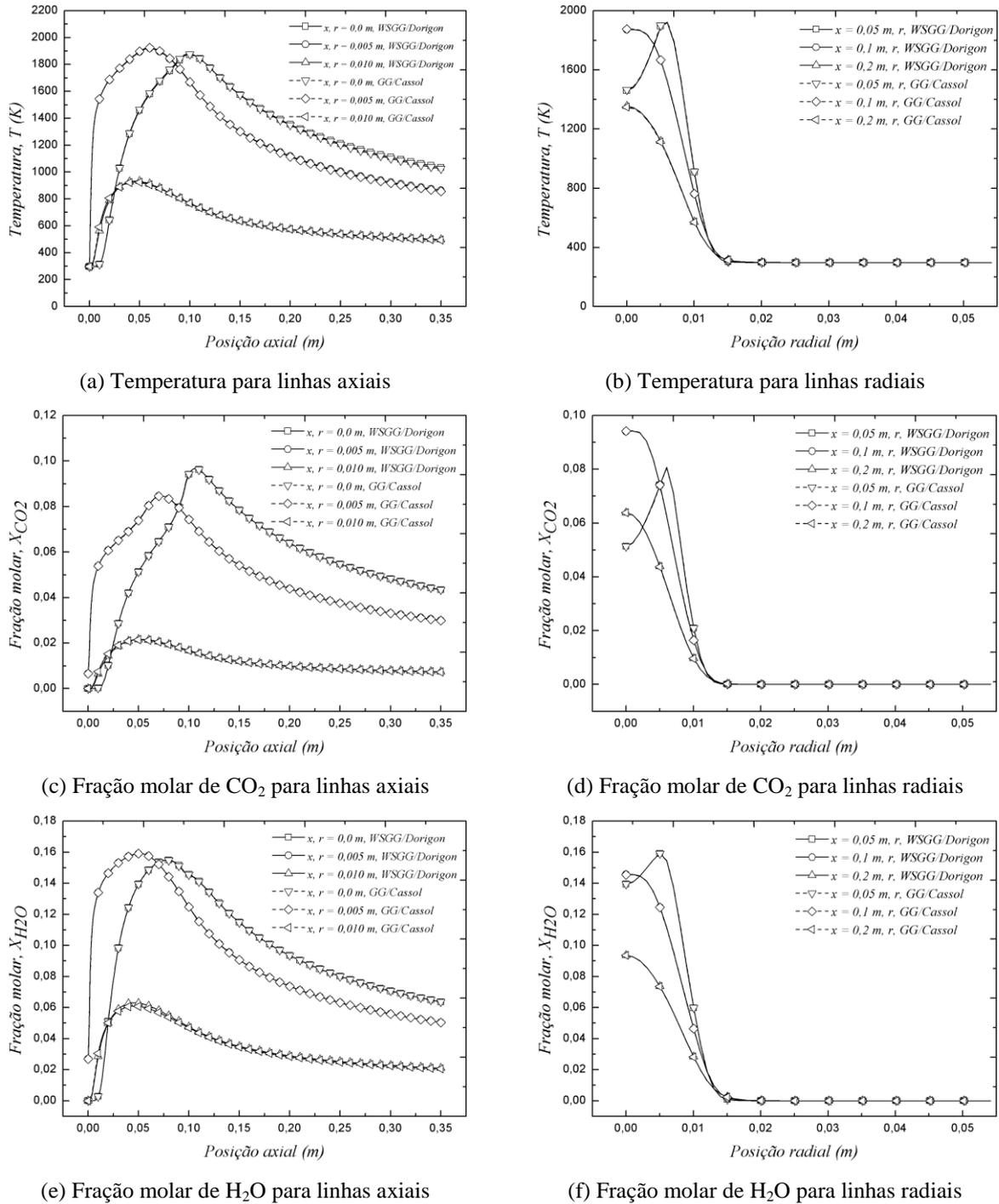
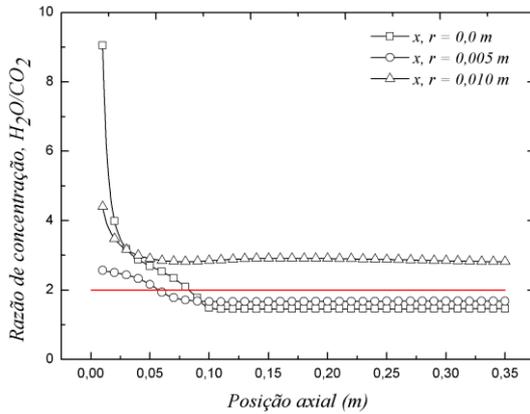
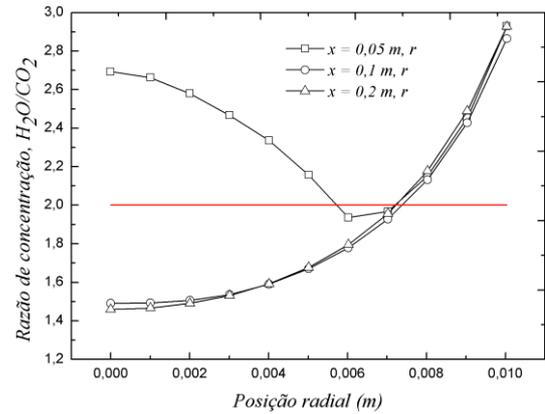


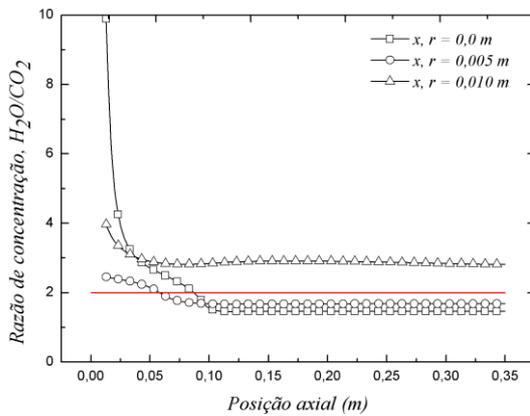
Figura 6.17 – Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de  $\text{CO}_2$  para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de  $\text{H}_2\text{O}$  para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050N40.



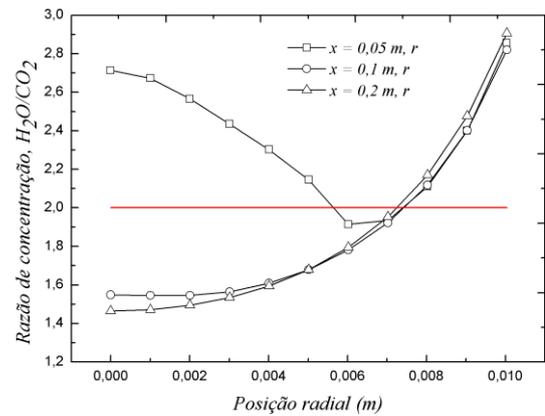
(a) Razão de concentração para linhas axiais para a chama PC0050N20



(b) Razão de concentração para linhas radiais para a chama PC0050N20



(c) Razão de concentração para linhas axiais para a chama PC0050N40



(d) Razão de concentração para linhas radiais para a chama PC0050N40

Figura 6.18 – Razão de concentração para a chama PC0050N20 para linhas axiais (a) e radiais (b) ao longo do domínio; e razão de concentração para a chama PC0050N40 para linhas axiais (c) e radiais (d) ao longo do domínio.

Os perfis axiais, a despeito da região próxima da entrada de combustível, apresentam razões de concentração bastante próximas da proporção adequada às correlações do modelo WSGG, entretanto radialmente há um maior desvio e a proporção não é respeitada. A Tabela 6.2 apresenta as médias das razões de concentração das espécies participantes calculadas para as linhas axiais e radiais ao longo do domínio para ambas as chamas.

Tabela 6.2 – Razão de concentração entre as espécies participantes para o modelo WSGG/Dorigon para linhas axiais e radiais ao longo do domínio para as chamas PC0050N20 e PC0050N40.

Chama	Linha	Média
PC0050N20	x, r = 0,000 m	2,72
	x, r = 0,005 m	1,81
	x, r = 0,010 m	3,14
	x = 0,050 m, r	2,39
	x = 0,100 m, r	1,86
	x = 0,200 m, r	1,87
PC0050N40	x, r = 0,000 m	3,60
	x, r = 0,005 m	1,81
	x, r = 0,010 m	3,14
	x = 0,050 m, r	2,36
	x = 0,100 m, r	1,86
	x = 0,200 m, r	1,87

Uma vez que o  $N_2$  é um gás inerte e não participa das reações químicas, a sua adição aos reagentes não provoca alterações significativas nos perfis de concentração ao longo do domínio. Portanto, para todos os níveis de diluição e exemplificado aqui pela chama com 40% de diluição, a razão de concentração se mantém, como para a chama sem diluição, em média próxima de 2,0 para linhas ao longo do domínio e o comportamento irregular também aparece. Foram utilizadas, por esse motivo, as correlações para o modelo WSGG/Dorigon para razão de concentração 2,0 para toda a série de chamas diluídas com nitrogênio.

#### 6.4 Análise dos resultados para as chamas com diluição de $CO_2$

Diferentemente do  $N_2$ , o dióxido de carbono não é um gás inerte e participa das reações químicas e é um dos principais gases participantes nas trocas radiativas. Ainda, conforme discutido na Seção 6.1, as temperaturas para as chamas diluídas com  $CO_2$  são menores para um mesmo percentual de diluição quando comparadas com o nitrogênio. Todavia as concentrações das espécies participantes, principalmente do  $CO_2$ , são superiores e há do ponto de vista das trocas radiativas, um contraponto entre os dois efeitos. Ainda, a

adição de  $\text{CO}_2$  altera a concentração do meio e a tendência, para a razão de concentração das espécies participantes, é se aproximar de 1,0. Nesse caso, precisa-se de uma maior atenção para a correta utilização das correlações para o modelo espectral WSGG/Dorigon.

A Figura 6.19 apresenta o máximo fluxo de calor radiativo em função do percentual de diluição para as medidas experimentais e para ambos os modelos espectrais. Como pode ser observado, para 10% e 20% de diluição o fluxo de calor radiativo máximo diminui para as medidas experimentais, entretanto a partir de 30% o fluxo máximo aumenta. Ou seja, apesar do decréscimo na temperatura, o aumento da concentração das espécies participantes, principalmente de  $\text{CO}_2$ , se torna predominante nas trocas radiativas. Ainda, para os modelos espectrais o fluxo aumentou com a diluição. A partir de 30% de diluição para o modelo WSGG/Dorigon o máximo fluxo radiativo dá um salto. Para esse ponto, foram aplicadas as correlações para razão de concentração igual a 1,0. De fato é difícil estabelecer um critério para o uso das correlações uma vez que, para as chamas diluídas com  $\text{CO}_2$  a razão de concentração apresenta ainda mais desvios.

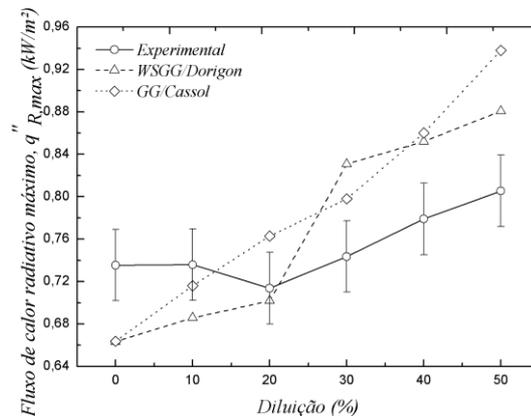
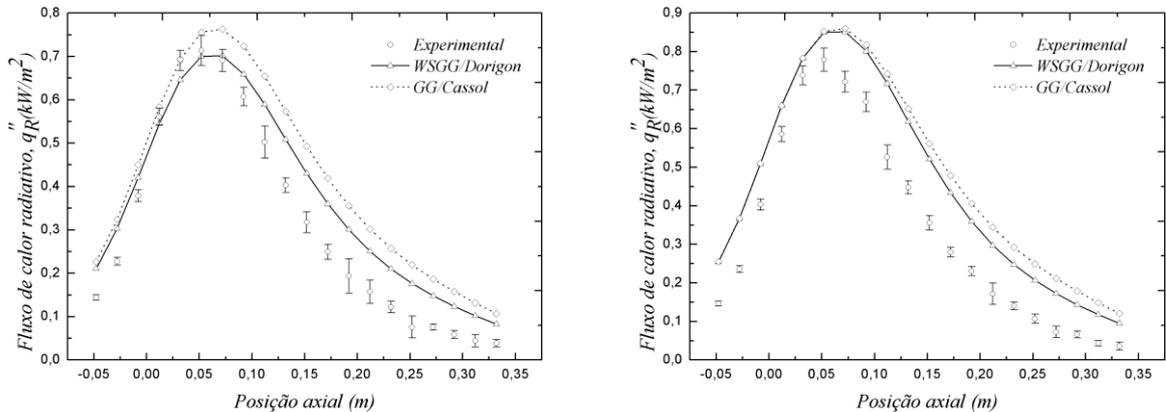


Figura 6.19 – Máximo fluxo radiativo em função do percentual de diluição para a série de chamas diluídas com  $\text{CO}_2$ .

A Figura 6.20 traz as distribuições do fluxo de calor radiativo ao longo do eixo da chama para as chamas com 20% e 40% de diluição (PC0050C20 e PC0050C40, respectivamente) para ambos os modelos espectrais e para as medidas experimentais. Qualitativamente há boa concordância entre as curvas. Para a chama PC0050C40 ambos os modelos espectrais apresentaram discrepâncias maiores com relação aos dados experimentais.

Para a chama PC0050C20 há boa concordância principalmente na região dos máximos fluxos e, para ambas as chamas, as maiores discrepâncias aparecem na região da pluma aquecida.



(a) Fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para a chama PC0050C20

(b) Fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para a chama PC0050C40

Figura 6.20 – Fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama para as chamas PC0050C20 (a) e PC0050C40 (b).

O desvio médio para a chama PC0050C20 para o modelo WSGG/Dorigon foi de 9,56% enquanto que o desvio máximo ficou em 15,83% para  $x = 0,152 \text{ m}$ . Para o modelo GG/Cassol o desvio médio foi de 14,88% enquanto que o desvio máximo ficou em 24,48% para  $x = 0,152 \text{ m}$ . O desvio médio para a chama PC0050C40 para o modelo WSGG/Dorigon foi de 14,44% enquanto que o desvio máximo ficou em 24,47% para  $x = 0,112 \text{ m}$ . Para o modelo GG/Cassol o desvio médio foi de 17,53% enquanto que o desvio máximo ficou em 27,70% para  $x = 0,112 \text{ m}$ . Comparativamente com os resultados obtidos para as chamas com diluição de  $\text{N}_2$ , apareceram maiores discrepâncias principalmente na região da pluma aquecida. De fato o  $\text{CO}_2$  como diluente afeta mais aspectos da chama do que o inerte  $\text{N}_2$ , impactando na precisão da solução numérica.

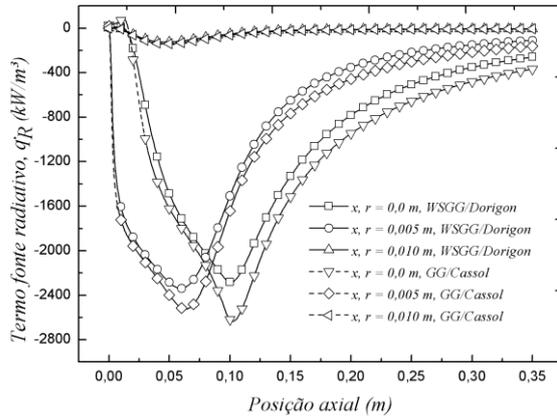
Fica evidente, para todos os gráficos apresentados de fluxo de calor radiativo, que a solução numérica prevê um fluxo de calor maior quando comparado com os dados experimentais. Para as chamas com diluição de  $\text{CO}_2$ , principalmente, é interessante incluir na abordagem da radiação térmica a espécie  $\text{CO}$  (monóxido de carbono) uma vez que com a diluição sua concentração na chama deve aumentar. Outras espécies, como o  $\text{CH}_4$ , também podem ser incluídas na análise da transferência radiativa. Outro aspecto importante para a

diferença nos resultados numéricos e experimentais diz respeito ao ângulo de abertura do sensor que é de  $150^\circ$ , enquanto que a solução numérica leva em conta todas as direções, ou seja,  $180^\circ$ .

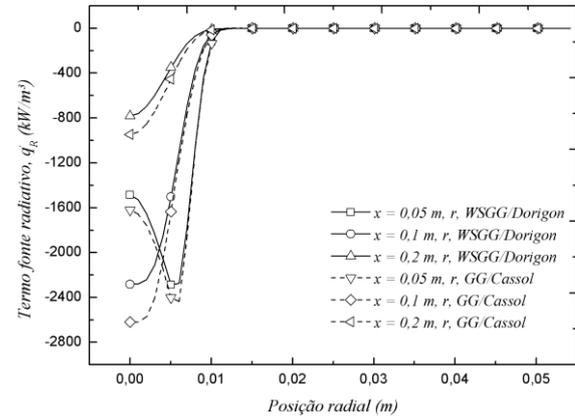
A Figura 6.21 apresenta o termo fonte radiativo para ambas as chamas para linhas axiais e radiais ao longo do domínio e para ambos os modelos espectrais. Comparativamente com as chamas com diluição de nitrogênio, o termo fonte radiativo aponta uma liberação de calor por radiação mais intensa para as chamas com diluição de dióxido de carbono. Esse resultado é interessante uma vez que mostra uma predominância da concentração das espécies participantes nas trocas radiativas para as chamas diluídas com  $\text{CO}_2$ , para as quais as temperaturas são sensivelmente menores. A fração radiante para as chamas com diluição de  $\text{CO}_2$  foram bem maiores a partir de 30% de diluição, resultado esse corroborado pelos máximos fluxos radiativos e pelo termo fonte, em termos absolutos, mais intensos, principalmente como visto para a chama PC0050C40.

Os gráficos para o termo fonte para todas as chamas apresentadas apontaram para a predominância da emissão do meio, sendo o termo fonte negativo em quase todo o domínio, um forte indicativo de que a aproximação para meios opticamente finos é válida.

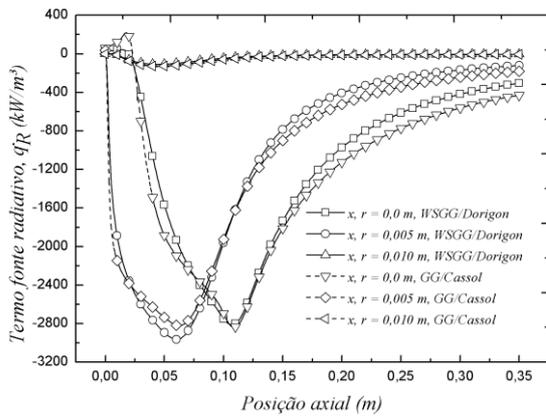
A questão da razão de concentração das espécies participantes para essa série de chamas é ainda mais crítica uma vez que, com o aumento do percentual de diluição, a tendência é que a razão gradativamente se afaste, em termos globais, de 2,0 e se aproxime da proporção unitária. Um estudo da razão de concentração das espécies participantes foi realizada para todas as chamas da série e, a partir de 30% de diluição se encontrou a necessidade de alterar as correlações, uma vez que as razões passaram a figurar próximas de 1,0 em média. A partir desse ponto, o erro médio que estava em torno de 10% para todas as chamas (independente do diluente) passou para 15% e, com o aumento da diluição começou a diminuir gradativamente, chegando a 13,99% para a chama PC0050C50 para o modelo WSGG/Dorigon.



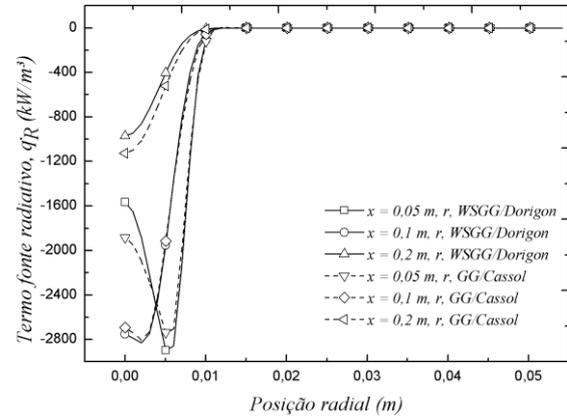
(a) Chama PC0050C20



(b) Chama PC0050C20



(c) Chama PC0050C40



(d) Chama PC0050C40

Figura 6.21 – Termo fonte radiativo para a chama PC0050C20 para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); e para a chama PC0050C40 para linhas axiais (c) e linhas radiais (d) ao longo do domínio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol.

A Figura 6.22 apresenta os perfis de temperatura e concentração das espécies participante ao longo das linhas axiais e radiais as quais foi obtido o termo fonte radiativo para a chama PC0050C20. A Figura 6.23 apresenta os perfis de temperatura e concentração das espécies participantes ao longo das linhas axiais e radiais as quais foi obtido o termo fonte radiativo para a chama PC0050C40.

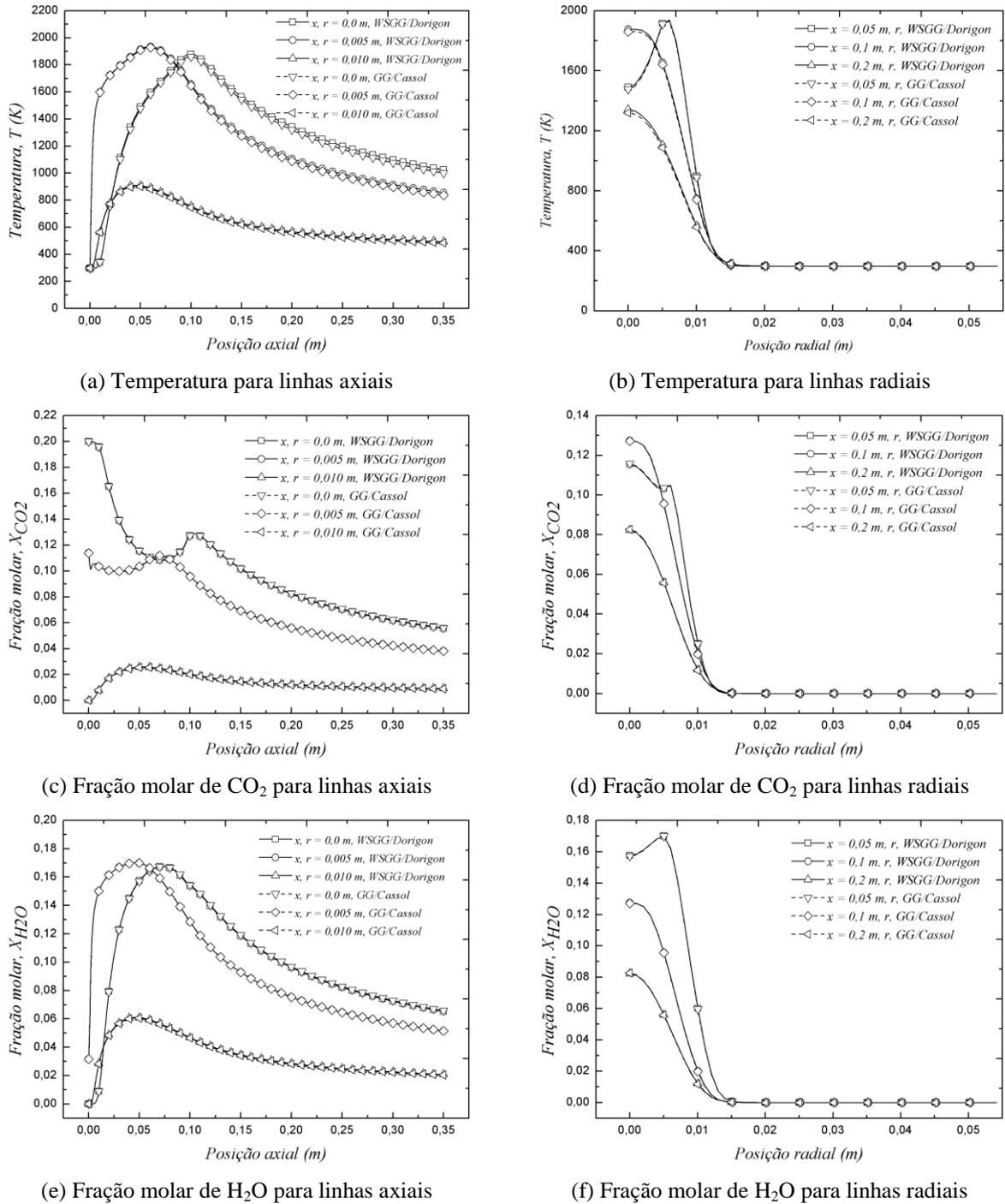


Figura 6.22 – Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de  $\text{CO}_2$  para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de  $\text{H}_2\text{O}$  para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050C20.

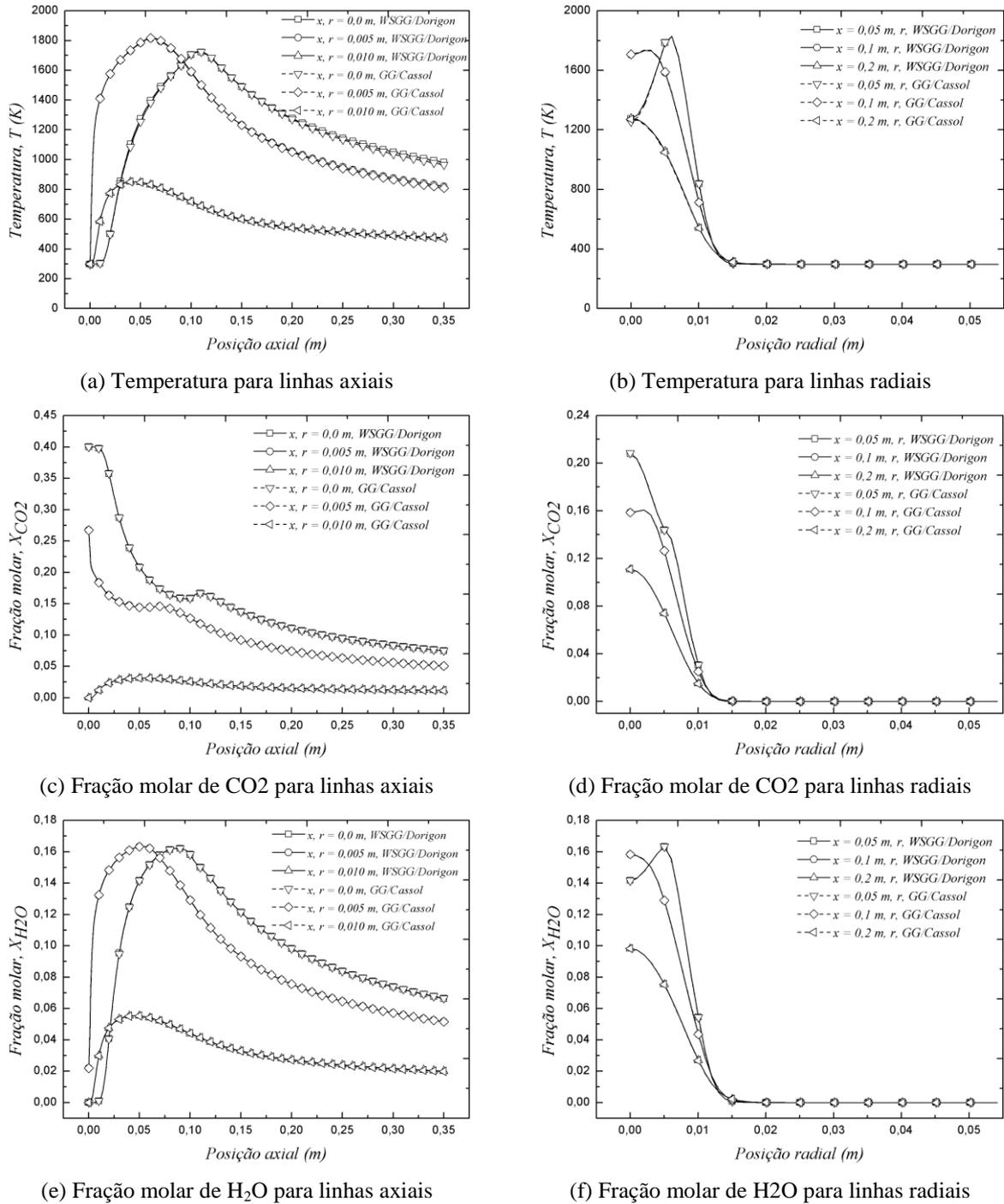
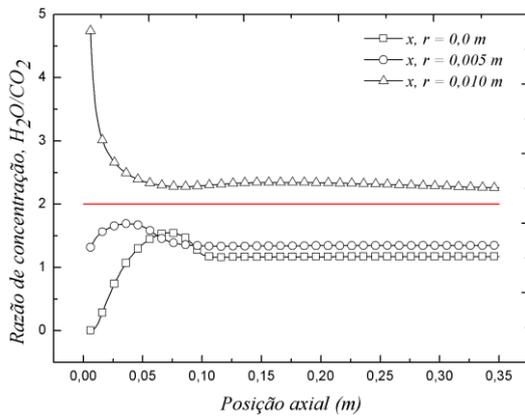
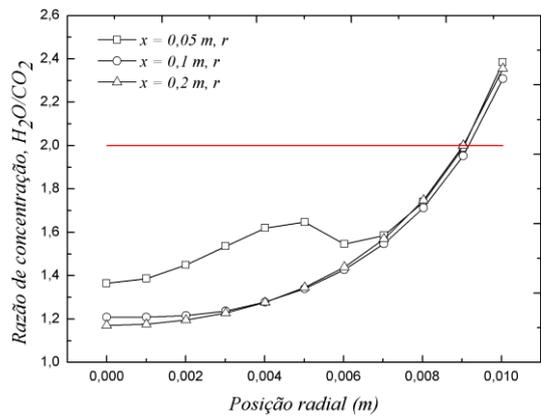


Figura 6.23 – Temperatura do meio para os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol para linhas axiais (a) e linhas radiais (b); perfis fração molar de CO<sub>2</sub> para linhas axiais (c) e linhas radiais (d); perfis de fração molar de H<sub>2</sub>O para linhas axiais (e) e radiais (f) ao longo do domínio para a chama PC0050C40.

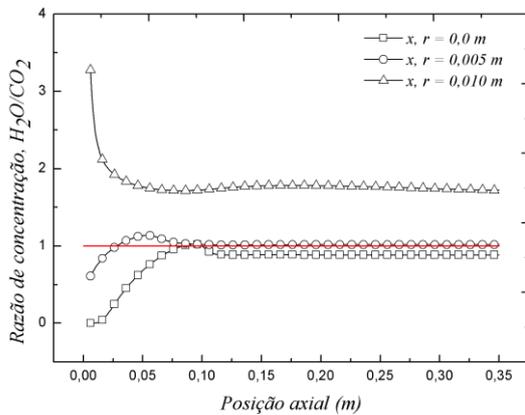
Assim como para os casos estudados anteriormente, apesar de os perfis de  $\text{CO}_2$  serem substancialmente diferentes axialmente devido à diluição, ambos os modelos espectrais prevêm perfis muito semelhantes, apontando para a independência dos modelos espectrais para resultados globais da chama como a temperatura e concentração das espécies participantes. A Figura 6.24 apresenta para as chamas com 20% e 40% de diluição, as razões de concentração para as linhas axiais e radiais as quais o termo fonte radiativo foi apreciado.



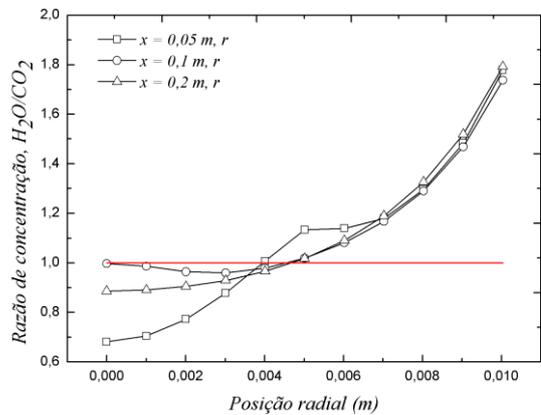
(a) Razão de concentração para linhas axiais para a chama PC0050C20



(b) Razão de concentração para linhas radiais para a chama PC0050C20



(a) Razão de concentração para linhas axiais para a chama PC0050C40



(b) Razão de concentração para linhas radiais para a chama PC0050C40

Figura 6.24 - Razão de concentração para a chama PC0050C20 para linhas axiais (a) e radiais (b) ao longo do domínio; e razão de concentração para a chama PC0050C40 para linhas axiais (c) e radiais (d) ao longo do domínio.

Como se pode observar para a chama com 40% de diluição a razão de concentração está, globalmente, mais próxima de 1,0 e, para a chama com 20% de diluição em torno de 2,0. O comportamento irregular ao longo do domínio se repete como em todas as chamas simuladas principalmente para os perfis radiais. Axialmente o comportamento da razão de concentração é estável e muito próximo da proporção adequada às correlações tanto para razão 2 quanto para razão 1,0. A Tabela 6.3 apresenta, respectivamente, para as chamas PC0050C20 e PC0050C40, as médias das razões de concentração das espécies participantes calculadas para as linhas axiais e radiais ao longo do domínio.

Tabela 6.3 – Razões de concentração entre as espécies participantes para o modelo WSGG/Dorigon para linhas axiais e radiais ao longo do domínio.

Chama	Linha	Média
PC0050C20	x, r = 0,000 m	1,14
	x, r = 0,005 m	1,38
	x, r = 0,010 m	2,53
	x = 0,050 m, r	1,66
	x = 0,100 m, r	1,49
	x = 0,200 m, r	1,50
PC0050C40	x, r = 0,000 m	0,80
	x, r = 0,005 m	1,01
	x, r = 0,010 m	1,89
	x = 0,050 m, r	1,09
	x = 0,100 m, r	1,15
	x = 0,200 m, r	1,14

Como se pode observar da Tabela 6.4, as médias para as chamas variam bastante. Para a chama com 20% de diluição as médias variam bastante entre 1,0 e 2,0 e para os perfis radiais ficam num patamar intermediário. Já para a chama com 40% de diluição, a exceção de uma das linhas axial, as médias ficam bastante próximas de 1,0. Para essa série de chamas os resultados para o fluxo radiativo e fração radiante apresentaram maiores discrepâncias principalmente devido ao fato de o CO<sub>2</sub> utilizado como diluente participa das trocas radiativas

## 7 CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou um estudo sobre a transferência radiativa em chamas difusivas laminares de metano com diluição de dióxido de carbono e nitrogênio na corrente de combustível, onde foram realizadas comparações com dados obtidos experimentalmente. Para tanto foram desenvolvidas rotinas UDF que acopladas ao código CFD comercial ANSYS/Fluent permitem a implementação dos modelos WSGG com as correlações obtidas por Dorigon et al., 2013, e GG com as correlações obtidas por Cassol et al., 2014, para o tratamento das propriedades espectrais do meio participante.

As rotinas UDF desenvolvidas foram validadas comparando a solução para o WSGG obtida com o Fluent com a solução obtida a partir de um código FORTRAN próprio para o sistema unidimensional de superfícies negras e infinitas preenchidas por um meio não-isotérmico e não-homogêneo. Foram comparados os fluxos de calor radiativo nas superfícies e os termos fonte radiativo ao longo do domínio para três distintos perfis de temperatura e concentração das espécies participantes, bem como razões de concentração. Uma vez que os erros encontrados para as rotinas UDF em comparação com a solução obtida com o código FORTRAN foram menores que 1% para todos os aspectos investigados, ficou demonstrado o correto funcionamento do acoplamento das rotinas de usuário com o código CFD Fluent.

As rotinas de usuário foram aplicadas então na simulação acoplada do escoamento reativo e processos de transferência de calor para a série de chamas de potência constante para a qual foram obtidos dados de comprimento de chama visível, fração radiante e fluxo de calor radiativo por Machado, 2015.

Para resultados globais como a temperatura para ambos os diluentes, com o aumento do percentual de diluição foi observado um decréscimo da temperatura da chama, sendo que, para o  $\text{CO}_2$ , esse efeito mostrou-se sensivelmente mais acentuado. As concentrações das espécies participantes ( $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$ ) também foram afetados pela diluição, principalmente para o  $\text{CO}_2$  onde sua adição na corrente de combustível acarretou em um aumento considerável da concentração de dióxido de carbono na chama e, a partir de 30% de diluição, alterando inclusive sua distribuição espacial no domínio. Ainda os efeitos da diluição se mostraram impactantes na fração radiante, principalmente para as chamas diluídas com  $\text{CO}_2$  para as maiores diluições.

O fluxo de calor radiativo paralelamente ao eixo da chama mostrou boa concordância tanto qualitativa quanto quantitativamente com os dados experimentais com os desvios médios ficando em torno de 10% para todas as chamas, exceto para as chamas com 30%, 40% e 50% de diluição de  $\text{CO}_2$  onde o desvio médio ficou em torno de 15%. Para esses níveis de diluição as correlações para o modelo WSGG/Dorigon transicionam de uma razão global de 2,0 para uma razão global de 1,0. De fato essas razões quase em nenhum ponto do domínio assumem esses valores, uma vez que as concentrações das espécies participantes variam bastante ao longo da chama. Entretanto, na média, para linhas axiais e radiais ao longo do domínio esses valores encontram-se próximos dos valores para os quais as correlações são válidas. A variação da razão de concentração ao longo do domínio se constitui em uma importante fonte de erro para o modelo WSGG em geral dado que sua formulação não leva em conta esse aspecto de uma chama real. Entretanto os resultados para o fluxo radiativo ao longo do domínio apresentaram resultados satisfatórios.

O modelo GG/Cassol apresentou resultados semelhantes ao WSGG/Dorigon para aspectos da chama como temperatura e concentração das espécies participantes, porém, no que diz respeito à transferência radiativa, apresentou resultados sensivelmente menos precisos (principalmente para a fração radiante e para o fluxo de calor radiativo na região da pluma aquecida da chama).

O termo fonte radiativo também foi representado graficamente somente para fins de comparação, uma vez que não se pode avaliar a precisão pela falta de uma solução *benchmark* disponível (como, por exemplo, a solução LBL). Entretanto os resultados obtidos apontam para uma predominância da emissão na região da chama uma vez que foram encontrados, em suma, valores negativos para o termo fonte. Ainda, para as chamas com diluição de  $\text{CO}_2$  a emissão de radiação pelo meio se mostrou mais intensa se comparada com a emissão de radiação pelas chamas com diluição de  $\text{N}_2$ , apontando para um predomínio da concentração das espécies participantes sobre a temperatura na transferência radiativa para as chamas estudadas. Novamente essa tendência pôde ser observada para a fração radiante e para os fluxos radiativos onde os valores obtidos para as chamas diluídas com  $\text{CO}_2$  foram maiores em comparação às chamas diluídas com  $\text{N}_2$ .

Todas as chamas simuladas, independentemente do diluente utilizado, são chamas opticamente finas (*optically thin*) e, portanto, conforme indicam trabalhos da literatura, a escolha do modelo espectral não possui tanto efeito sobre resultados globais da chama. De

fato para temperatura e concentração das espécies químicas os resultados concordam muito bem e há pouca diferença entre os modelos. Entretanto para a radiação, seja para a fração radiante, fluxo de calor ou termo fonte radiativo, o modelo espectral adotado produz resultados sensivelmente diferentes. Para a determinação da estrutura da chama, portanto, a influência do modelo espectral mostrou-se menor se comparada com a transferência radiativa, onde o modelo espectral apresentou maior impacto nos resultados.

## 7.1 Propostas de continuidade

Com o desenvolvimento e validação das rotinas UDF acopladas ao código CFD comercial ANSYS/Fluent abrem-se diversas possibilidades de trabalhos futuros. Ainda referente às simulações realizadas para este trabalho, a extensão do domínio computacional a fim de reduzir a discrepância entre os fluxos radiativos para a região da pluma aquecida é uma das possibilidades. Ainda podem-se realizar investigações relativas ao impacto do mecanismo de cinética química adotado na transferência radiativa.

Como discutido, as razões de concentração possuem uma grande variação dentro do domínio e a aplicação de um modelo que leve em conta essa variação é uma alternativa para melhorar ainda mais o modelo numérico. Nesse sentido, o modelo WSGG da superposição apresentado por Cassol et al., 2014, se apresenta como uma excelente alternativa. Uma dificuldade dessa abordagem é o aumento considerável do tempo computacional uma vez que para uma mistura de  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  são necessários 25 gases cinza. Entretanto o modelo apresenta boa versatilidade para implementar mais espécies participantes nas trocas radiativas (como o  $\text{CO}$  e o  $\text{CH}_4$ ). A aplicação do modelo WSGG da superposição em simulações acopladas do escoamento reativo e da radiação térmica pode não ser factível para uma simulação detalhada com as equações de transporte, entretanto com uma técnica de redução da integração da cinética química como o *flamelet* pode ser uma alternativa viável. Outra possibilidade é utilizar os campos convergidos da simulação detalhada com o WSGG para razões constantes e resolver a radiação de forma desacoplada para o modelo WSGG da superposição. A fim de exemplificar essa abordagem, a Figura 7.1 apresenta os gráficos para o fluxo de calor radiativo para as chamas PC0050N50 e PC0050C50 obtidos com o modelo WSGG da superposição (juntamente com os modelos WSGG/Dorigon e GG/Cassol). Vale ressaltar que ainda se tratam de resultados preliminares.

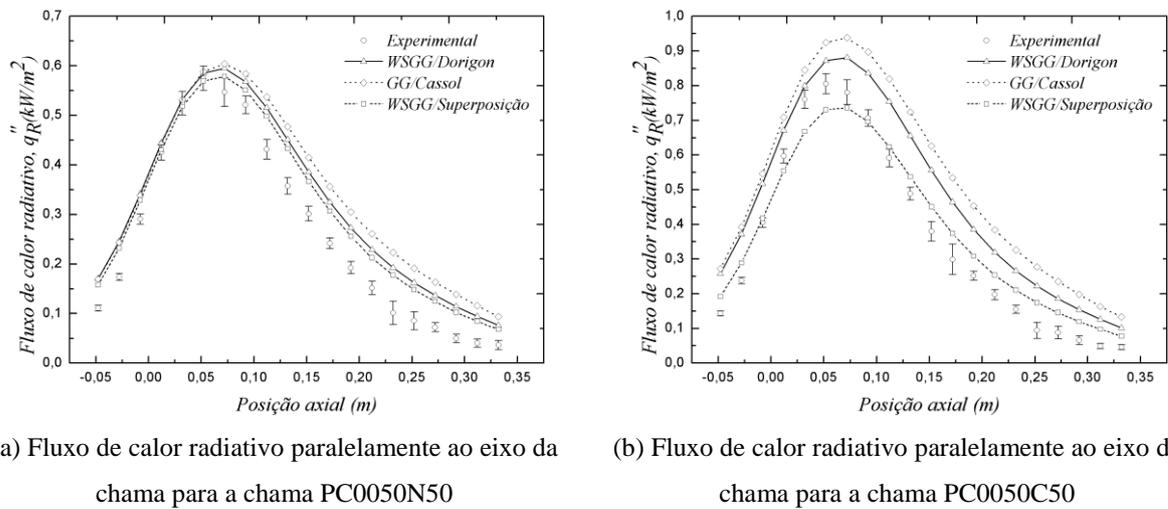


Figura 7.1 – Fluxo de calor radiativo para as chamas PC0050N50 (a) e PC0050C50 (b) para o modelo WSGG da superposição.

Os desvios médios ficaram em 8,15% para a chama com 50% de diluição de  $N_2$  e 6,47% para a chama com 50% de diluição de  $CO_2$  apontando para uma maior precisão para o modelo da superposição.

A inclusão da formação de fuligem na simulação de chama e na transferência radiativa também é uma possibilidade de continuidade para o presente trabalho para todos os modelos espectrais implementados.

Finalmente a extensão do estudo da transferência radiativa para chamas turbulentas também se constitui em uma possibilidade de prosseguimento da pesquisa.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aboje, A.A.; Erete, J.I.; Hughes, K.J.; Ma, L.; Pourkashanian, M.; Williams, A. An investigation of methane and propane vertical flares, **Journal of Energy Institute**, v.29, p. 793-806, 2015.

ANSYS. Fluent 17.0 – Theory Guide, **Ansys Inc.**, 2016.

ANSYS. Fluent 17.0 – Customer Guide, **Ansys Inc.**, 2016.

Bennett, B.A.V.; McEnally, C.S.; Pfefferle, L.D.; Smooke, M.D. Computational and experimental study of axisymmetric coflow partially premixed methane/air flames, **Combustion and Flame**, v. 123, p. 522-546, 2000.

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**, v. 66, p. 489-502, 1998.

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

Bordbar, M.H.; Węcel, G.; Hyppänen, T. A line by line based weighted sum of gray gases model for inhomogeneous CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O mixture in oxy-fired combustion, v. 161, p. 2435-2445, 2014.

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

Cassol, F.; Brittes, R.; Centeno, F.R.; Silva, C.V.; França, F.H.R.. Evaluation of the gray gas model to compute radiative transfer in non-isothermal, non-homogeneous participating medium containing CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and soot, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 37, p. 163-172, 2014a.

Cassol, F.; Brittes, R.; França, F.H.R.; Ezekoye, O.A. Application of the weighted-sum-of-gray-gases model for media composed of arbitrary concentrations of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> and soot, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 79, p. 796-806, 2014b.

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

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

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

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

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

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

Claramunt, K.; Cònsul, R.; Pérez-Segarra, C.D.; Oliva, A. Multidimensional mathematical modeling and numerical investigation of co-flow partially premixed methane/air laminar flames, **Combustion and Flame**, v. 137, p. 444-457, 2004.

Clements, A.G.; Porter, R.; Pranzitelli, A.; Pourkashanian, M. Evaluation of FSK models for radiative heat transfer under oxyfuel conditions, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 151, p. 67-75, 2015.

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

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

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

Demarco, R.; Nmira, F.; Consalvi, J.L. Influence of thermal radiation on soot production in laminar axisymmetric diffusion flames, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 120, p. 52-69, 2013.

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 H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> mixtures, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 64, p. 863-873, 2013.

Empresa de pesquisa energética (Brasil). **Balanco Energético Nacional 2016: ano base 2015**, Rio de Janeiro, 2016.

Erete, J.I.; Hughes, K.J.; Ma, L.; Fairweather, M.; Pourkashanian, M.; Williams, A. Effect of CO<sub>2</sub> dilution on the structure and emissions from turbulent, non-premixed methane-air jet flames, **Journal of the Energy Institute**, 2016, <http://dx.doi.org/10.1016/j.joei.2016.02.004>.

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

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

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

Guo, J.; Li, X.; Huang, X.; Liu, Z.; Zheng, C. A full spectrum *k*-distribution based weighted-sum-of-gray-gases model for ocy-fuel combustion, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 90, p. 218-226, 2015.

Guo, H.; Min, J.; Galizzi, C.; Escudié, D.; Baillot, F. A numerical study on the effects of CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub>/Ar addition to air on liftoff of a laminar CH<sub>4</sub>/air diffusion flame, **Combustion Science and Technology**, v. 182, p. 1549-1563, 2010.

Hernández, I.; Lecocq, G.; Poitou, D.; Riber, E.; Cuenot, B. Computations of soot formation in ethylene/air counterflow diffusion flames and its interaction with radiation, **Comptes Rendus Mecanique**, v. 341, p. 238-246, 2013.

Hirschfelder, J.; Curtiss, C.; Bird, R. **Molecular theory of gases and liquids**, v. 26, Wiley New York, 1954.

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

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

Hu, Y.; Yan, J. Numerical simulation of radiation intensity of oxy-coal combustion with flue gas recirculation, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 17, p. 473, 480, 2013.

Incropera F.P.; DeWitt, D.P. **Fundamental of heat and mass transfer**, 6<sup>th</sup> edition, John Wiley & Sons, New York, 2008.

Johansson, R.; Leckner, B.; Andersson, K.; Johnsson, F. Account for variation in the H<sub>2</sub>O to CO<sub>2</sub> molar ratio when modeling gaseous radiative heat transfer with the weighted-sum-of-gray-gases model, **Combustion and Flame**, v. 158, p. 893-901, 2011.

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

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

Kim, T.; Kim, Y. Interactive transient flamelet modeling for soot formation and oxidation processes in laminar non-premixed jet flames, **Combustion and Flame**, v. 162, p. 1660-1678, 2015.

Kim, T.H.; Park, J.W.; Park, H.Y.; Park, J.; Park, J.H.; In, G.L. Chemical and radiation effects on flame extinction and NO<sub>x</sub> formation in oxy-methane combustion diluted with CO<sub>2</sub>, **Fuel**, v. 177, p. 235-243, 2016.

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**, v. 138, p. 136-154, 2004.

Liu, F.; Karatas, A.E.; Gülder, O.L.; Gu, M. Numerical and experimental study of the influence of CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> dilution on soot formation in laminar coflow C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/air diffusion flames at pressures between 5 and 20 atm, **Combustion and Flame**, v. 162, p. 2231-2247, 2015.

Liu, F.; Smallwood, G.J.; Kong, W. The importance of thermal radiation transfer in laminar diffusion flames at normal and microgravity, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 1121, p. 1241-1249, 2011.

Ma, B.; Cao, S.; Giassi, D.; Stocker, D.P.; Takahashi, F.; Bennett, B.A.V.; Smooke, M.D.; Marshall, B.L. An experimental and computational study of soot formation in a coflow jet flame under microgravity and normal gravity, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 35, p. 839-846, 2015.

Machado, I.M. **Caracterização experimental da radiação térmica emitida por chamas não pré misturadas de metano diluídas com CO<sub>2</sub>**, Dissertação de mestrado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2015.

McEnally, C.S.; Pfefferle, L.D.; Schaffer, A.M.; Long, M.B.; Mohammed, R.K.; Smooke, M.D. Characterization of a coflowing methane/air non-premixed flame with computer modeling, Rayleigh-Raman imaging, and on-line mass spectrometry, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 28, p. 2063-2070, 2000.

MEDTHERM CORPORATION. Heat flux transducers and infrared radiometers for the direct measurement of heat transfer rates. **MEDTHERM 64 series**, Huntsville, p. 5, ago. 2003. Disponível em: <Contato direto>. Acesso em: 28 out. 2016.

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**, v. 123, p. 326-343, 2000.

Messig, D.; Hunger, F.; Keller, J.; Hasse, C. Evaluation of radiation modeling approaches for non-premixed flamelets considering a laminar methane air flame, **Combustion and Flame**, v. 160, p. 251-264, 2013.

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

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

Pal, G.; Gupta, A.; Modest, M.F.; Haworth, D.C. Comparison of accuracy and computational expense of radiation models in simulation of non-premixed turbulent jet flames, **Combustion and Flame**, v. 162, p. 2487-2495, 2015.

Patankar, S. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Mc Graw-Hill Book Company, 1980.

Porter, R.; Liu, F.; Pourkashanian, M.; Williams, A.; Smith, D. Evaluation of solution methods for radiative heat transfer in gaseous oxy-fuel combustion environments, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 2084-2094, 2010.

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**, v. 157, p. 1446-1455, 2010.

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

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Barber, R.J.; Dothe, H.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Perevalov, V.I.; Tashkun, S.A.; Tennyson, J. HITEMP, the High-Temperature Molecular Spectroscopic Database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 2139-2150, 2010.

Ruan, J.; Kobayashi, H.; Niioka, T.; Ju, Y. Combined effects of nongray radiation and pressure on premixed CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> flames, **Combustion and Flame**, v. 124, p. 225-230, 2001.

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

Schneider, Ch.; Dreizler, A.; Janicka, J.; Hassel, E.P. Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames, **Combustion and Flame**, v. 135, p. 185-190, 2003.

Siegel, R.; Howell, J.R. **Thermal Radiation Heat Transfer**. 4<sup>th</sup> edition, Taylor & Francis, New York – London, 2002.

Sivathanu, Y.R.; Gore, J.P. Effects of gas-band radiation on soot kinetics in laminar methane/air diffusion flames, **Combustion and Flame**, v. 110, p. 256-263, 1997.

Sivathanu, Y. R.; Gore, J. P. Total radiative heat loss in jet flames from single point radiative flux measurements, **Combustion and Flame**, v. 94, n. 3, p. 265–270, 1993.

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

Yin, C.; Johansen, L.C.R.; Rosendhal, L.A.; Kær, S.K. New weighted sum of gray gases model applicable to computational fluid dynamics (CFD) modeling of oxy-fuel combustion: Derivation, validation, and implementation, **Energy Fuels**, v. 24, p. 6275-6282, 2010.

Zhang, C.; Hu, G.; Liao, S.; Cheng, Q.; Xiang, C.; Yuan, C. Comparative study on the effects of nitrogen and carbon dioxide on methane/air flames, **Energy**, v. 106, p. 431-442, 2016.

Zhang, D.; Fang, J.; Guan, J.; Wang, J.; Zeng, Y.; Wang, J.; Zhang, Y. Laminar jet methane/air diffusion flame shapes and radiation of low air velocity coflow in microgravity, **Fuel**, v. 130, p. 25-33, 2014.

**APÊNDICE A** – Tabelas com os fluxos radiativos para as chamas da série de chamas de potência constante

Tabela A.1 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N00 (ou PC0050C00).

PC0050N00 ou PC0050C50					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,135938	0,204832	9,36713	0,199508	8,64326
-0,028	0,222321	0,295103	9,89573	0,287016	8,79619
-0,008	0,372268	0,408848	4,97362	0,397900	3,48509
0,012	0,538149	0,525671	1,69654	0,513553	3,34415
0,032	0,677551	0,617730	8,13358	0,607889	9,47160
0,052	0,735488	0,663459	9,79333	0,659958	10,2693
0,072	0,634679	0,658272	3,20774	0,663679	3,94289
0,092	0,598205	0,612588	1,95558	0,627067	3,92421
0,112	0,473468	0,543397	9,50788	0,565307	12,4869
0,132	0,390042	0,466576	10,4059	0,493703	14,0942
0,152	0,291730	0,393001	13,7693	0,423353	17,8961
0,172	0,238113	0,328067	12,2305	0,360095	16,5851
0,192	0,176993	0,273266	13,0897	0,305795	17,5125
0,212	0,119175	0,228011	14,7978	0,260147	19,1672
0,232	0,109482	0,190882	11,0675	0,221931	15,2891
0,252	0,078180	0,160262	11,1602	0,189668	15,1584
0,272	0,059706	0,134621	10,1857	0,161891	13,8934
0,292	0,053924	0,112577	7,97477	0,137217	11,3249
0,312	0,037777	0,092966	7,50376	0,114449	10,4246
0,332	0,035831	0,075047	5,33197	0,092873	7,75568
		Média	8,80242	Média	11,1732

Tabela A.2 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N10.

PC0050N10					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,137904	0,199862	9,28108	0,194763	8,51731
-0,028	0,220235	0,287614	10,0932	0,279879	8,93449
-0,008	0,354540	0,399447	6,72688	0,388963	5,15636
0,012	0,528447	0,516863	1,73521	0,505167	3,48730
0,032	0,641798	0,612863	4,33442	0,603262	5,77262
0,052	0,667573	0,663708	0,57901	0,660162	1,11013
0,072	0,650463	0,663184	1,90560	0,668323	2,67536
0,092	0,578937	0,620793	6,26994	0,634907	8,38414
0,112	0,447851	0,553221	15,7840	0,574789	19,0149
0,132	0,363107	0,476635	17,0061	0,503500	21,0304
0,152	0,300176	0,402425	15,3166	0,432617	19,8392
0,172	0,227333	0,336463	16,3472	0,368433	21,1361
0,192	0,177445	0,280544	15,4439	0,313114	20,3228
0,212	0,148132	0,234232	12,8975	0,266496	17,7306
0,232	0,113975	0,196167	12,3120	0,227415	16,9929
0,252	0,092772	0,164733	10,7795	0,194388	15,2217
0,272	0,064022	0,138389	11,1399	0,165937	15,2665
0,292	0,048722	0,115728	10,0373	0,140655	13,7712
0,312	0,040663	0,095554	8,22245	0,117307	11,4811
0,332	0,038606	0,077121	5,76940	0,095184	8,47518
		Média	9,59907	Média	12,2160

Tabela A.3 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N20.

PC0050N20					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,125788	0,192417	10,0820	0,191007	9,86876
-0,028	0,208729	0,277490	10,4047	0,274459	9,94606
-0,008	0,342347	0,387763	6,87229	0,381515	5,92686
0,012	0,494237	0,509095	2,24827	0,495819	0,23940
0,032	0,617594	0,606877	1,62160	0,592785	3,75395
0,052	0,660864	0,658472	0,36198	0,649849	1,66673
0,072	0,626714	0,658451	4,80228	0,659443	4,95235
0,092	0,556520	0,616549	9,08344	0,628181	10,8435
0,112	0,461588	0,549401	13,2876	0,570243	16,4413
0,132	0,375196	0,473461	14,8692	0,500702	18,9911
0,152	0,301200	0,400002	14,9504	0,431022	19,6443
0,172	0,230351	0,334720	15,7928	0,367594	20,7672
0,192	0,192712	0,279342	13,1086	0,312730	18,1608
0,212	0,147856	0,233433	12,9493	0,266377	17,9344
0,232	0,099708	0,195654	14,5182	0,227449	19,3293
0,252	0,085916	0,164432	11,8809	0,194504	16,4313
0,272	0,062287	0,138243	11,4934	0,166093	15,7076
0,292	0,042894	0,115697	11,0163	0,140819	14,8177
0,312	0,035350	0,095605	9,11756	0,117461	12,4247
0,332	0,039120	0,077169	5,75752	0,095306	8,50185
		Média	9,71092	Média	12,3175

Tabela A.4 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N30.

PC0050N30					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,121722	0,188710	10,7700	0,182675	9,79973
-0,028	0,197339	0,271710	11,9571	0,262477	10,4726
-0,008	0,318885	0,376983	9,34072	0,364903	7,39855
0,012	0,472942	0,486716	2,21447	0,474316	0,22085
0,032	0,588182	0,575713	2,00475	0,567281	3,36041
0,052	0,621985	0,623383	0,22482	0,622344	0,05777
0,072	0,596352	0,624176	4,47337	0,632266	5,77405
0,092	0,541507	0,586256	7,19457	0,603207	9,91988
0,112	0,456847	0,524445	10,8681	0,548515	14,7380
0,132	0,363323	0,453465	14,4927	0,482461	19,1545
0,152	0,284606	0,384028	15,9846	0,415985	21,1225
0,172	0,239839	0,321867	13,1881	0,355259	18,5567
0,192	0,192404	0,268895	12,2978	0,302581	17,7137
0,212	0,142206	0,224856	13,2881	0,257973	18,6125
0,232	0,123292	0,188549	10,4917	0,220437	15,6185
0,252	0,089222	0,158499	11,1380	0,188621	15,9809
0,272	0,063810	0,133260	11,1658	0,161144	15,6489
0,292	0,048887	0,111503	10,0672	0,136670	14,1134
0,312	0,040229	0,092104	8,34023	0,114026	11,8648
0,332	0,035466	0,074336	6,24940	0,092526	9,17382
		Média	9,28757	Média	11,9651

Tabela A.5 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N40.

PC0050N40					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,118582	0,176331	9,56353	0,176461	9,58506
-0,028	0,182331	0,254168	11,8968	0,253480	11,7828
-0,008	0,307257	0,355378	7,96915	0,352536	7,49850
0,012	0,451959	0,467471	2,56882	0,458896	1,14874
0,032	0,560650	0,559421	0,20360	0,550205	1,72983
0,052	0,603841	0,610577	1,11552	0,605800	0,32442
0,072	0,584272	0,615083	5,10249	0,618322	5,63889
0,092	0,533419	0,580550	7,80517	0,592997	9,86648
0,112	0,442248	0,521251	13,0833	0,542022	16,5232
0,132	0,372622	0,452083	13,1593	0,478903	17,6009
0,152	0,281979	0,383890	16,8772	0,414394	21,9289
0,172	0,239115	0,322496	13,8084	0,354847	19,1659
0,192	0,199543	0,269942	11,6585	0,302823	17,1038
0,212	0,153302	0,226093	12,0546	0,258552	17,4300
0,232	0,098027	0,189837	15,2043	0,221169	20,3931
0,252	0,089737	0,159761	11,5965	0,189402	16,5052
0,272	0,059568	0,134457	12,4020	0,161909	16,9483
0,292	0,051650	0,112611	10,0955	0,137374	14,1964
0,312	0,048432	0,093091	7,39568	0,114638	10,9641
0,332	0,034738	0,075137	6,69034	0,093018	9,65153
		Média	9,51254	Média	12,2993

Tabela A.6 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050N50.

PC0050N50					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,110844	0,170737	10,4227	0,169514	10,2099
-0,028	0,173987	0,245432	12,4331	0,243388	12,0774
-0,008	0,290498	0,341449	8,86663	0,338662	8,38156
0,012	0,425042	0,444483	3,38319	0,441794	2,91521
0,032	0,524305	0,532490	1,42439	0,531653	1,27872
0,052	0,574637	0,585079	1,81719	0,588360	2,38814
0,072	0,546809	0,595101	8,40398	0,604331	10,0102
0,092	0,521219	0,567840	8,11319	0,583659	10,8661
0,112	0,431453	0,515352	14,6004	0,537143	18,3926
0,132	0,357297	0,450968	16,3009	0,477368	20,8951
0,152	0,301191	0,385417	14,6573	0,414914	19,7905
0,172	0,241636	0,325173	14,5374	0,356428	19,9765
0,192	0,192219	0,272931	14,0457	0,304847	19,5998
0,212	0,151870	0,228983	13,4194	0,260682	18,9357
0,232	0,101285	0,192458	15,8663	0,223233	21,2218
0,252	0,085506	0,162050	13,3205	0,191318	18,4137
0,272	0,072125	0,136398	11,1850	0,163635	15,9249
0,292	0,049583	0,114204	11,2455	0,138886	15,5406
0,312	0,040280	0,094349	9,40919	0,115916	13,1624
0,332	0,036365	0,076116	6,91757	0,094043	10,0373
		Média	10,5185	Média	13,5009

Tabela A.7 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C10.

PC0050C10					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,140182	0,206868	9,06146	0,210849	9,60247
-0,028	0,226151	0,297679	9,71950	0,303053	10,4497
-0,008	0,376852	0,413318	4,95510	0,420871	5,98140
0,012	0,557377	0,534579	3,09785	0,545603	1,59989
0,032	0,684515	0,633544	6,92608	0,649826	4,71362
0,052	0,735924	0,685842	6,80537	0,709058	3,65066
0,072	0,690487	0,685233	0,71390	0,715969	3,46261
0,092	0,599971	0,641534	5,64780	0,678811	10,7131
0,112	0,498056	0,571837	10,0257	0,613617	15,7029
0,132	0,400140	0,492728	12,5811	0,536848	18,5764
0,152	0,304883	0,415970	15,0949	0,460733	21,1774
0,172	0,249189	0,347686	13,3840	0,391914	19,3939
0,192	0,205255	0,289782	11,4859	0,332670	17,3136
0,212	0,148967	0,241832	12,6189	0,282798	18,1855
0,232	0,105674	0,202438	13,1487	0,241041	18,3942
0,252	0,082667	0,169925	11,8570	0,205799	16,7317
0,272	0,070520	0,142697	9,80766	0,175494	14,2643
0,292	0,051220	0,119292	9,24990	0,148619	13,2349
0,312	0,040861	0,098472	7,82838	0,123858	11,2779
0,332	0,035210	0,079464	6,01344	0,100453	8,86549
		Média	9,00113	Média	12,1646

Tabela A.8 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C20.

PC0050C20					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,144277	0,210685	9,30461	0,225679	11,4055
-0,028	0,227423	0,303151	10,6105	0,324475	13,5983
-0,008	0,378872	0,420955	5,89638	0,450475	10,0325
0,012	0,561051	0,544712	2,28931	0,583361	3,12589
0,032	0,690240	0,646159	6,17629	0,693721	0,48784
0,052	0,713712	0,700682	1,82563	0,755922	5,91420
0,072	0,690396	0,701838	1,60326	0,762866	10,1540
0,092	0,607337	0,659111	7,25422	0,723556	16,2838
0,112	0,502324	0,589317	12,1888	0,654689	21,3482
0,132	0,403311	0,509096	14,8218	0,573328	23,8215
0,152	0,317538	0,430576	15,8381	0,492320	24,4892
0,172	0,249323	0,360305	15,5500	0,418820	23,7487
0,192	0,193932	0,300489	14,9300	0,355395	22,6230
0,212	0,157121	0,250841	13,1314	0,301934	20,2901
0,232	0,122125	0,209998	12,3121	0,257150	18,9186
0,252	0,075884	0,176267	14,0649	0,219362	20,1031
0,272	0,075833	0,148009	10,1129	0,186894	15,5611
0,292	0,058577	0,123717	9,12689	0,158140	13,9499
0,312	0,044224	0,102108	8,11035	0,131697	12,2561
0,332	0,038456	0,082378	6,15399	0,106750	9,56880
		Média	9,56507	Média	14,8840

Tabela A.9 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C30.

PC0050C30					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,143291	0,251002	14,4858	0,237533	12,6744
-0,028	0,227296	0,361572	18,0585	0,341719	15,3885
-0,008	0,389113	0,502193	15,2078	0,474335	11,4613
0,012	0,576690	0,649228	9,75547	0,613584	4,96180
0,032	0,709216	0,768520	7,97560	0,728264	2,56168
0,052	0,743564	0,830898	11,7453	0,791899	6,50042
0,072	0,719820	0,829341	14,7292	0,797921	10,5036
0,092	0,638966	0,775643	18,3813	0,756279	15,7771
0,112	0,516698	0,690016	23,3091	0,684323	22,5434
0,132	0,429159	0,592384	21,9517	0,599481	22,9061
0,152	0,327725	0,497362	22,8140	0,514893	25,1717
0,172	0,271593	0,412867	18,9996	0,437981	22,3771
0,192	0,204756	0,341508	18,3914	0,371492	22,4239
0,212	0,157854	0,282813	16,8055	0,315384	21,1858
0,232	0,101897	0,235002	17,9009	0,268363	22,3876
0,252	0,098029	0,195925	13,1658	0,228700	17,5736
0,272	0,071918	0,163550	12,3233	0,194652	16,5062
0,292	0,053193	0,136046	11,1427	0,164547	14,9757
0,312	0,043026	0,111888	9,26111	0,136921	12,6277
0,332	0,039282	0,090096	6,83384	0,110915	9,63368
		Média	15,1619	Média	15,5071

Tabela A.10 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C40.

PC0050C40					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,146344	0,254649	13,9018	0,254978	13,9440
-0,028	0,235568	0,366886	16,8556	0,367099	16,8829
-0,008	0,403487	0,509893	13,6580	0,509854	13,6529
0,012	0,586056	0,660105	9,50474	0,659778	9,46277
0,032	0,738712	0,783138	5,70236	0,783256	5,71751
0,052	0,779077	0,849598	9,05187	0,852235	9,39034
0,072	0,721738	0,852047	16,7261	0,860142	17,7652
0,092	0,669673	0,801439	16,9130	0,817534	18,9790
0,112	0,526438	0,717128	24,4764	0,742255	27,7016
0,132	0,447729	0,618784	21,9562	0,652257	26,2527
0,152	0,355939	0,521508	21,2520	0,561463	26,3805
0,172	0,279685	0,434013	19,8091	0,478139	25,4730
0,192	0,230556	0,359555	16,5580	0,405644	22,4738
0,212	0,171691	0,298021	16,2153	0,344228	22,1463
0,232	0,140469	0,247752	13,7705	0,292659	19,5346
0,252	0,107074	0,206598	12,7745	0,249138	18,2348
0,272	0,072675	0,172467	12,8090	0,211801	17,8578
0,292	0,066124	0,143451	9,92545	0,178837	14,4675
0,312	0,043420	0,117954	9,56697	0,148654	13,5075
0,332	0,036025	0,094938	7,56196	0,120307	10,8182
		Média	14,4494	Média	17,5321

Tabela A.11 – Fluxo de calor radiativo para a chama PC0050C50.

PC0050C40					
x (m)	Experimental	WSGG/Dorigon		GRAYGAS/Cassol	
	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)	$q_R''$ (kW/m <sup>2</sup> )	$desv_{q_R''}$ (%)
-0,048	0,143533	0,258048	14,2176	0,272562	16,0196
-0,028	0,237971	0,371860	16,6230	0,392665	19,2061
-0,008	0,405088	0,517371	13,9405	0,546093	17,5066
0,012	0,596642	0,671420	9,28410	0,709160	13,9697
0,032	0,760354	0,799556	4,86714	0,845575	10,5807
0,052	0,805442	0,872039	8,26840	0,924372	14,7658
0,072	0,780511	0,880751	12,4453	0,937960	19,5481
0,092	0,706428	0,835398	16,0123	0,896984	23,6585
0,112	0,591300	0,753968	20,1961	0,819580	28,3422
0,132	0,488588	0,655517	20,7251	0,724206	29,2533
0,152	0,379467	0,555649	21,8740	0,625829	30,5873
0,172	0,299189	0,464200	20,4870	0,534052	29,1594
0,192	0,252008	0,385447	16,5671	0,453315	24,9933
0,212	0,197263	0,319879	15,2235	0,384470	23,2427
0,232	0,154921	0,266081	13,8011	0,326477	21,2995
0,252	0,094257	0,221929	15,8511	0,277494	22,7498
0,272	0,088093	0,185259	12,0637	0,235510	18,3025
0,292	0,066151	0,154059	10,9143	0,198524	16,4348
0,312	0,049076	0,126628	9,62849	0,163135	14,1611
0,332	0,045745	0,101853	6,96612	0,133156	10,8526
		Média	13,9978	Média	20,2317