

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS ESPECTRAIS WSGG E SLW EM
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CHAMA LAMINAR

por

Larissa Domingues Lemos

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

Porto Alegre, janeiro de 2024

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO

Lemos, Larissa Domingues

Comparação entre os modelos espectrais WSGG e SLW em simulação numérica de chama laminar / Larissa Domingues Lemos. -- 2024.

17 f.

Orientador: Francis Henrique Ramos França.

Coorientador: Luís Gustavo Pires Rodrigues.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) -- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Curso de Engenharia Mecânica, Porto Alegre, BR-RS, 2024.

1. WSGG. 2. Rank-Correlated SLW. 3. Combustão numérica. 4. Chama laminar. I. França, Francis Henrique Ramos, orient. II. Rodrigues, Luís Gustavo Pires, coorient. III. Título.

Larissa Domingues Lemos

COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS ESPECTRAIS WSGG E SLW EM
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE CHAMA LAMINAR

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

Prof. Dr. Ignacio Iturrioz
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Energia e Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Co- orientador: Dr Luís Gustavo Pires Rodrigues

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França (Presidente)

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Prof Dr. Andrés Armando Mendiburu Zevallos

Dr. Cristian Alex Hoerlle

Porto Alegre, janeiro de 2024

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família pelo apoio durante os meus anos de estudo, meus pais Marco e Cristina, minha irmã Júlia e meu marido William, vocês são parte dessa conquista.

Agradeço ao meu orientador, Francis, por embarcar em mais um projeto comigo e pelo tempo dedicado ao longo dos anos para minha formação. Ao meu co-orientador, Gustavo, por confiar no meu potencial para realizar esse trabalho, pela paciência e amizade.

Aos meus amigos, que tornaram essa jornada mais leve e me impulsionaram a seguir em frente.

Domingues Lemos, Larissa. **Comparação entre os Modelos Espectrais WSGG e SLW em Simulação Numérica de Chama Laminar**. 2024. 17. Monografia de Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2024.

RESUMO

A radiação térmica apresenta um importante papel na modelagem da combustão devido às altas temperaturas envolvidas. O objetivo deste estudo é comparar dois modelos espectrais, o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) e a variante *Rank-Correlated* do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado nas linhas espectrais (SLW) através da simulação numérica de uma chama difusiva laminar. A cinética química foi resolvida com o modelo de cinética química detalhada, as equações de estado e a conservação da massa e da quantidade de movimento completam a modelagem do escoamento laminar. O estudo é realizado com o solver comercial Ansys Fluent. A modelagem da radiação térmica é realizada de forma desacoplada à simulação da chama. O modelo WSGG e o modelo *Rank-Correlated* SLW são incorporados através de rotinas definidas pelo usuário. As diferenças encontradas entre os modelos são cerca de 20 % para o fluxo de calor radiativo calculado e 12 % para o termo fonte radiativo, considerando cinco gases cinza. Ao aumentar o número de gases cinza para dez no modelo *Rank-Correlated* SLW, a diferença com relação ao modelo WSGG foi em média de 5% para fluxo de calor radiativo e 2 % para o termo fonte radiativo.

PALAVRAS-CHAVE: WSGG, Rank-Correlated SLW, Combustão numérica, Chama laminar.

Domingues Lemos, Larissa. **Comparison of WSGG and SLW Spectral Radiation Models in Laminar Flame Numerical Simulation**. 2024 17 Mechanical Engineering End of Course Monography – Mechanical Engineering degree, The Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2024.

ABSTRACT

Thermal radiation has an important role in modelling combustion due to the high temperatures involved. The objective of this study is to compare two spectral models, the weighted-sum-of-gray-gases (WSGG) and the Rank-Correlated variant of the spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model (SLW) through the numerical simulation of a laminar diffusive flame. The detailed chemical kinetics, the equations of state and the conservation of mass and momentum complete the laminar flow modelling. The study was performed using the commercial solver Ansys Fluent. Thermal radiation modelling is uncoupled, using the converged temperature and concentration fields of the participating species in the flame studied. The WSGG model and the Rank-Correlated SLW model were incorporated through user-defined routines. The differences between the models are around 20 % for radiative heat flux and 12 % for the radiative source term, considering five grey gases. When increasing the number of grey gases to ten in the Rank-Correlated SLW model, the difference with the WSGG model was on average 5% for radiative heat flux and 2% for the radiative source term.

KEYWORDS: WSGG, Rank-Correlated SLW, Numerical Combustion, Laminar flame

NOMENCLATURA

Símbolos

a_j	Coeficiente de ponderação do gás j no modelo WSGG	
C	Valor prescrito da secção transversal de absorção	[cm ² /molecula]
C_j	Seção transversal de absorção do gás cinza	[m ² /molecula]
\tilde{C}_j	Seção transversal de absorção suplementar	[m ² /molecula]
C_η	Seção transversal de absorção espectral	[m ² /molecula]
$D\omega$	Elemento de ângulos sólido	sr
E_b	Poder emissivo de corpo negro	[Wm ⁻¹]
$E_{\eta b}$	Poder emissivo espectral de corpo negro	[Wm ² μm]
F	Função ALBDF	
H	Entalpia	[kJkg ⁻¹]
I	Intensidade de radiação	[Wm ⁻² sr ⁻¹]
I_b	Intensidade de radiação de corpo negro	[Wm ⁻² sr ⁻¹]
N	Densidade molar do gás	[molecula/m ³]
N_G	Número de gases cinza considerados no modelo WSGG	
P	Pressão	[Pa]
p_a	Pressão parcial	atm
q_R''	Fluxo de calor	[Wm ⁻²]
SRad	Termo fonte de calor radiativo	[Wm ⁻³]
T	Temperatura	[K]
T_b	Temperatura de corpo negro	[K]
T_g	Temperatura do gás	[K]
V	Velocidade	[ms ⁻¹]
X	Fração molar	
Y	Fração mássica	
Símbolos gregos		
P	Massa específica do sólido	[kg m ⁻³]
K	Coeficiente de absorção	[m ⁻¹]
E	Emitância	
Abreviaturas e acrômimos		
ALBDF	Função distribuição de energia de corpo negro nas linhas espectrais	
DOM	Método das ordenadas discretas	
LBL	Modelo linha-por-linha	
RTE	Equação da transferência radiativa	
SLW	Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza baseado em linhas espectrais	
WSGG	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza	

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. FUNDAMENTAÇÃO.....	2
2.1 MODELO DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZA.....	2
2.2 MODELO SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZA BASEADO NAS LINHAS ESPECTRAIS	4
2.3 MODELAGEM DIRECIONAL DA RADIAÇÃO TÉRMICA – MÉTODO DAS ORDENADAS DISCRETAS.....	6
3. SIMULAÇÃO NUMÉRICA CHAMA LAMINAR.....	7
3.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO	8
3.2 MODELAGEM NUMÉRICA	9
3.3 ANÁLISE DE QUALIDADE DE MALHA	9
4. RESULTADOS	10
5. CONCLUSÃO.....	15

1. INTRODUÇÃO

A combustão está presente em diversas aplicações industriais, como fornos, caldeiras, motores, em diferentes tipos de queimadores, entre outras. A radiação térmica possui papel importante na modelagem da combustão e é o principal objeto deste estudo. A transferência de calor por radiação influencia diretamente na temperatura da chama, que por sua vez influencia na cinética das reações químicas e no campo de velocidades. As chamas não pré-misturadas são mais comuns devido ao maior controle do processo de combustão quando comparado com chamas pré-misturadas. Neste trabalho, foi escolhida uma chama difusiva laminar para avaliar o impacto da modelagem da radiação térmica sobre a temperatura e concentrações das espécies químicas. Sendo este um problema complexo, envolvendo efeitos não lineares, a solução envolve diferentes modelos e a utilização do solver comercial Ansys Fluent.

O efeito da transferência de calor por radiação pode ser dominante em uma chama devido às altas temperaturas. Para se obter resultados satisfatórios para o termo fonte radiativo, temperatura de chama e demais parâmetros são necessários modelos que forneçam maior precisão. A radiação térmica em gases de combustão possui forte dependência com o comprimento de onda, temperatura e concentrações de espécies, além disso, a radiação térmica envolve propagação direcional no espaço, o que requer a modelagem espacial para a obtenção de resultados.

O modelo da soma ponderada de gases cinza (*Weighted-sum-of-gray-gases* - WSGG) foi proposto por Hottel e Sarofim (1967) e baseia-se na proposta de substituição da variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinza com coeficiente de absorção constantes e com a adição de janelas transparentes. Esta combinação apresentou resultados precisos em trabalhos recentes (Yi et al., 2018; Fonseca et al., 2018; Lemos et al., 2020).

O modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza baseado em linhas espectrais (*Spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases* - SLW) proposto por Denison e Webb (1993a) também pode ser empregado ao cálculo da radiação térmica em meios participantes. O modelo SLW é baseado na função distribuição de energia de corpo negro nas linhas espectrais (*Absorption-line blackbody distribution function* - ALBDF) apresentada por Denison e Webb (1993b). Utilizando o conceito de ALBDF é possível substituir a integração sobre o número de onda pela integração sobre a seção transversal de absorção definida localmente. A partir do modelo original do SLW foram desenvolvidos diversos aperfeiçoamentos com o objetivo de prever a transferência de calor por radiação com precisão comparável ao do método de referência, a integração linha por linha (*Line-by-Line* -LBL) mas com custo computacional consideravelmente menor (Webb et al., 2019). Um dos modelos construídos a partir do modelo SLW é o *Rank-Correlated* SLW, nesse modelo não é necessário especificar um estado termodinâmico do gás de referência, o modelo apresenta melhoria significativa com relação a previsão da transferência radiativa entre gases (Solovjov, et al, 2017).

Além dos métodos SLW e WSGG, entre os métodos globais de transferência de calor por radiação, pode-se citar também o modelo *Absorption Distribution Function* - ADF, *Full Spectrum k-distribution* -FSK são modelos eficientes do ponto de vista computacional, que podem atingir elevada precisão na previsão da radiação térmica, sendo seus resultados comparáveis ao LBL (Solovjov, et al, 2017).

O objetivo desse trabalho consiste em avaliar o impacto da modelagem da radiação térmica em uma simulação numérica de chama laminar. A simulação foi realizada no *software* Ansys Fluent, empregando rotinas desenvolvidas pelo grupo de radiação térmica para implementação do modelo *Rank-Correlated* SLW e do modelo WSGG para contabilizar o

efeito da transferência de calor por radiação. A partir dos resultados obtidos pelos diferentes modelos foi possível avaliar apenas o impacto da modelagem da radiação térmica.

A cinética química foi resolvida com o modelo detalhado de reações, no qual as equações de conservação das espécies são resolvidas. As equações de estado e conservação de massa e quantidade de movimento completam a modelagem do escoamento laminar. Com a simulação da chama laminar foi possível obter os campos de temperatura e concentração das espécies participantes e então obter, de forma desacoplada, o fluxo de calor calculado por cada um dos modelos *Rank-Correlated* SLW e WSGG.

2. FUNDAMENTAÇÃO

O desafio fundamental na previsão da transferência de calor por radiação térmica de gases é a dependência espectral das propriedades de emissão e, principalmente das propriedades de absorção dos gases. Para determinar a radiação total, a Equação de Transferência Radiativa (*Radiative Transfer Equation* - RTE) deve ser integrada para acumular as contribuições em todos os números de onda. A RTE pode ser escrita conforme a Equação 1, e permite o cálculo da variação da intensidade de energia radiativa, dI_η , em um meio que absorve e emite energia ao longo do caminho, d_s (Siegel e Howell, 2002):

$$dI_\eta = -\kappa_\eta(S)I_\eta dS + \kappa_\eta(S)I_{b,\eta} dS \quad (1)$$

onde κ_η [m^{-1}] é o coeficiente de absorção espectral e $I_{b,\eta}$ [$\text{Wm}^{-2}\text{sr}^{-1}\mu\text{m}^{-1}$] é a intensidade de radiação espectral associada à emissão de corpo negro. O conceito de corpo negro consiste em uma idealização teórica de um corpo físico em que toda radiação incidente é absorvida, independente da direção e do comprimento de onda. A parcela da RTE relativa ao espalhamento foi negligenciada, segundo Modest (1993), este efeito pode ser negligenciado quando não há significativa formação de fuligem.

A emitância espectral ε_η , parâmetro de um meio de gases participantes, define a energia emitida em cada número de onda comparada com a energia de emitida por um corpo negro. A emitância total é a integração em todo espectro da intensidade de radiação emitida por um meio participante comparada ao poder emissivo total de um corpo negro (Siegel e Howell, 2002):

$$\varepsilon(T) = \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b} \varepsilon_\eta(T) d\eta}{\int_0^\infty I_{\eta,b} d\eta} \quad (2)$$

2.1 MODELO DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZA

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) é baseado na substituição da variação espectral do coeficiente de absorção por um pequeno número de gases cinza. No modelo WSGG a emitância total, ao longo de um caminho é calculada conforme Equação 3:

$$\varepsilon(pS) = \sum_{i=0}^{N_G} a_j(T)(1 - e^{-\kappa_j pS}) \quad (3)$$

onde κ_j [$\text{Pa}^{-1}\text{m}^{-1}$] é o coeficiente de absorção por unidade de pressão e a_j é o coeficiente de absorção correspondente ao j -ésimo gás cinza, N_G é o número de gases cinza considerados. O coeficiente de ponderação é calculado conforme a Equação 4 (Smith et al., 1982):

$$a_j(T) = \sum_{k=1}^K b_{j,k}(T^{k-1}) \quad (4)$$

sendo $b_{j,k}$ o coeficiente polinomial de grau $K-1$ e j o gás cinza ($j=1,\dots,N_G$). Nas janelas espectrais o coeficiente de absorção é nulo, porém, para garantir o balanço de energia, o coeficiente de ponderação a_0 é diferente de zero e calculado conforme Equação 5:

$$a_0(T) = 1 - \sum_{i=0}^{N_G} a_i(T) \quad (5)$$

O coeficiente de absorção é obtido para cada gás cinza. Para uma mistura o coeficiente de absorção de cada gás cinza pode ser calculado como uma função da pressão total, p , e da concentração das espécies participantes (CO_2 e H_2O):

$$\kappa_j = \kappa_{p,j} p (X_{\text{CO}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}}) \quad (6)$$

O modelo WSGG pode ser empregado com qualquer método de solução espacial da equação da transferência radiativa (Modest, 1991):

$$\frac{dI_j}{ds} = -p_a \kappa_{p,j} I_j + p_a \kappa_{p,j} a_j \quad (7)$$

Sendo p_a a pressão parcial, $p_a = p(X_{\text{CO}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}})$, e p a pressão total. A pressão total utilizada nesse trabalho foi de 1 atm. Com a solução da Equação 7 para cada gás cinza j o termo fonte radiativo pode ser determinado somando a contribuição de cada intensidade parcial de gás cinza, incluindo a intensidade parcial relacionada para as janelas transparentes:

$$I = \sum_{j=0}^j I_j \quad (8)$$

Assim, o termo fonte radiativo pode ser calculado por:

$$S_{\text{RAD}} = -\nabla \cdot \vec{q}_R = \kappa_j \left[\left(\int_{4\pi} I d\omega \right) - 4\pi I_b \right] \quad (9)$$

Os coeficientes polinomiais obtidos através do ajuste das curvas de emitância total em relação às calculadas a partir da integração linha-por-linha foram propostos por Dorigon et al., (2013), conforme apresentado na Tabela 1. Os coeficientes foram obtidos para 4 gases cinza para uma mistura de dióxido de carbono e vapor de água para razão de pressão parcial $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ e são válidas para temperaturas entre 400K e 2500K:

Tabela 1 - Coeficientes do modelo WSGG para $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ [Dorigon et al., 2013]

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

As correlações propostas por Dorigon et al., (2013), apresentaram resultados mais precisos em comparação às correlações propostas por Smith et al (1982), pois utilizam uma base de dados espectrais mais atual HITEMP (High Temperature Molecular Spectroscopic Database) que foi atualizada em Rothman et al (2010).

2.2 MODELO SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZA BASEADO NAS LINHAS ESPECTRAIS

O modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza baseado nas linhas espectrais (SLW) é fundamentado na função distribuição de energia de corpo negro nas linhas espectrais (ALBDF) apresentada por Denison e Webb (1993b). A ALBDF é definida como a fração da energia do corpo negro nas regiões do espectro em que a seção transversal de absorção do gás no estado termodinâmico local, $C_\eta(\phi)$ é inferior a um valor prescrito da seção transversal de absorção suplementar C . A função ALBDF pode ser calculada por:

$$F(C, \phi, T_b) = \int_{\{\eta: C_\eta(\phi) < C\}} \frac{E_{\eta,b}(T_b)}{E_b(T_b)} d\eta = \int_0^\infty H[C - C_\eta(\phi)] \frac{E_{\eta,b}(T_b)}{E_b(T_b)} d\eta \quad (10)$$

onde $\phi = \{T_g, X, p\}$ é a função de estado termodinâmico que depende da temperatura do gás T_g , da fração molar das espécies X e da pressão total p . A temperatura de corpo negro T_b é utilizada para calcular o poder emissivo espectral $E_{\eta,b}$ e o poder emissivo total E_b . H é uma função degrau, a função ALBDF é uma função crescente da variável C_η definida no intervalo $[0,1]$ e invertível. A função inversa da ALBDF $C(F, \phi, T_b)$ é uma função da variável contínua F . A função ALBDF é previamente calculada a partir das secções transversais de absorção de alta resolução da solução LBL e armazenada em tabelas de consulta (Pearson et al., 2014a; Pearson et al., 2014b). A Figura 1 apresenta representação gráfica da definição da função ALBDF:

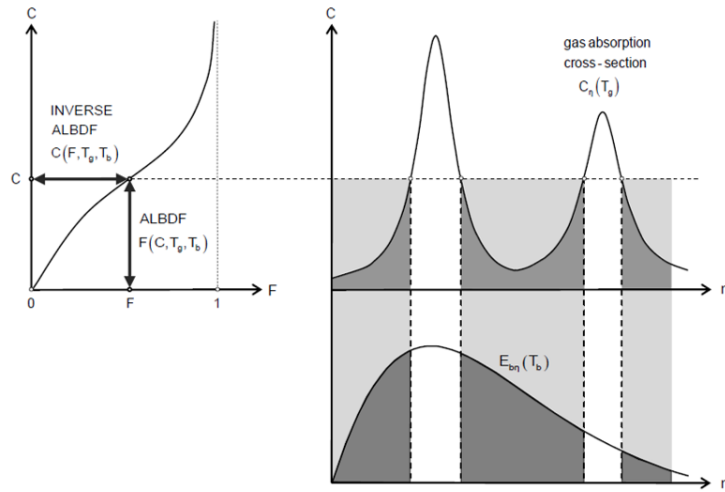


Figura 1 – Definição da função ALBDF $F(C, \phi, T_b)$ e da função ALBDF inversa $C(F, \phi, T_b)$ (Solovjov et al., 2016).

A RTE integrada no modelo SLW tem a mesma forma que o modelo WSGG, Equação 7. O coeficiente local de absorção de gás cinza é calculado com as secções transversais de absorção suplementares locais \tilde{C}_j^{loc} de acordo com a Equação 11.

$$\kappa_j^{loc} = N_\chi^{loc} X_\chi^{loc} \sqrt{\tilde{C}_{\chi,j}^{loc} \tilde{C}_{\chi,j-1}^{loc}} = N_\chi^{loc} X_\chi^{loc} C_{\chi,j}^{loc} \quad (11)$$

onde N_{χ}^{loc} e X_{χ}^{loc} são densidade molar do gás e fração molar do gás participante, respectivamente. $C_{\chi,j}^{loc}$ a secção transversal de absorção local do gás cinza e o subíndice χ indica se o meio participante é uma mistura ou uma espécie pura. Os pesos locais do gás cinza são calculados com os valores suplementares \tilde{F}_j^{loc} da função ALBDF:

$$a_j^{loc} = \tilde{F}_{\chi,j}^{loc} - \tilde{F}_{\chi,j-1}^{loc} \quad (12)$$

A emitância total ao longo de um caminho S de acordo com o SLW é dada pela equação:

$$\varepsilon(S, T) = \sum_{j=1}^{n_g} a_j [1 - e^{-N X_{\chi} C_j S}] \quad (13)$$

Esse é o equacionamento básico do modelo SLW, conhecendo os valores locais do coeficiente de absorção do gás cinza e os respectivos pesos com as funções ALBDF direta e inversa é possível determinar o termo fonte radiativo. O modelo SLW é um modelo espectral com vários desenvolvimentos recentes, e nesse trabalho será empregada a versão *Rank-Correlated* SLW apresentado em Solovjov et al., (2017).

O *Rank-Correlated* se difere de outras abordagens de modelos SLW porque não é necessário especificar um estado termodinâmico do gás de referência. Nesse modelo é necessário especificar uma temperatura de referência da fonte de corpo negro $T_b = T_{ref}$ para calcular os valores locais das seções transversais de absorção. É necessário a especificação da temperatura de referência para preservar os intervalos espectrais de integração da RTE.

No modelo *Rank-Correlated* SLW a variável F é dividida em valores de referência \tilde{F}_j^{ref} e F_j^{ref} entre F_{min} e F_{max} conforme Equações 14 e 15:

$$\tilde{F}_j^{ref} = F_{min} + (F_{max} - F_{min}) \sum_{k=1}^j w_k; j = 0, 1, 2, \dots, n_g \quad (14)$$

$$F_j^{ref} = F_{min} + (F_{max} - F_{min}) x_j; j = 1, 2, \dots, n_g \quad (15)$$

onde $x_j > 0$ são abscissas positivas e w_k são os pesos correspondentes calculados com a quadratura de Gauss-Legendre. Os valores de referência da variável C são calculados com a função ALBDF inversa para o estado local através das Equações 16 e 17:

$$\tilde{C}_j^{loc} = C(\tilde{F}_j^{ref}, \phi_{loc}, T_b = T_{ref}) \quad (16)$$

$$C_j^{loc} = C(F_j^{ref}, \phi_{loc}, T_b = T_{ref}) \quad (17)$$

O coeficiente de absorção local de cada gás cinza é calculado com a Equação 10, aplicando os valores da secção transversal de absorção local calculados com a Equação 16. O coeficiente de absorção da janela transparente é $\kappa_0^{loc} = 0$. Os valores dos pesos dos gases cinza, a_j^{loc} , são calculados com a ALBDF direta para o estado local e as secções transversais de absorção \tilde{C}_j^{loc} conforme Equação 18:

$$a_j^{loc} = F(\tilde{C}_j^{loc}, \phi_{loc}, T_b = T_{loc}) - F(\tilde{C}_{j-1}^{loc}, \phi_{loc}, T_b = T_{loc}) \quad (18)$$

Por fim o peso da janela transparente é calculado por:

$$a_0^{loc} = F(\tilde{C}_0^{loc}, \phi_{loc}, T_b = T_{loc}) \quad (19)$$

Para considerar a mistura, como as propriedades espectrais de cada espécie de gás têm a sua própria dependência do estado termodinâmico, é necessário empregar uma modelagem adicional para aproximar a ALBDF da mistura com as ALBDFs das espécies participantes individuais. Entre as abordagens de modelagem pode-se citar a integração múltipla, multiplicação, superposição e convolução (Webb et al., 2019). Neste trabalho foi empregado o método da multiplicação para modelar a mistura de gases.

No método da multiplicação a mistura de gases é tratada como um único gás através das funções de distribuição separadas das espécies individuais. A função ALBDF da mistura é aproximada, para n espécies participantes:

$$\begin{aligned} F_{X_1 C_{\eta,1} + X_2 C_{\eta,2} + \dots + X_{n_{spe}} C_{\eta,n_{spe}}} (C, T_g, T_b, X_1, \dots, X_{n_{spe}}, p) \\ = F_{C_{\eta,1}} \left(\frac{C}{X_1}, T_g, T_b, X_1, p \right) \times \dots \times F_{C_{\eta,n_{spe}}} \left(\frac{C}{X_{n_{spe}}}, T_g, T_b, X_{n_{spe}}, p \right) \end{aligned} \quad (20)$$

onde F_{XC_η} e F_{C_η} são a função ALBDF obtida para seção transversal de absorção XC_η e C_η . A dependência da função ALBDF da fração molar é dada por (Solovjov e Webb, 2000) :

$$F_{XC_\eta}(C, T_g, T_b) = F_{C_\eta} \left(\frac{C}{X}, T_g, T_b \right) \quad (21)$$

Para um meio participante composto por H₂O e CO₂, a função ALBDF da mistura pode ser reescrita como:

$$F_{w_c}(\tilde{C}_j, T_g, T_b, X_w, X_c, p) = F_w \left(\frac{\tilde{C}_j}{X_w}, T_g, T_b, X_w, p \right) \times F_c \left(\frac{\tilde{C}_j}{X_c}, T_g, T_b, X_c, p \right) \quad (22)$$

O coeficiente de absorção da mistura, que é incorporada ao modelo como um único gás, é calculado para ng de gases cinza, independentemente do número de espécies. Os pesos dos gases cinza da mistura são calculados por:

$$\begin{aligned} a_{w_c,j} = F_{w_c}(\tilde{C}_j, T_g, T_b, X_w, X_c, p) - F_{w_c}(\tilde{C}_{j-1}, T_g, T_b, X_w, X_c, p) = \\ F_w \left(\frac{\tilde{C}_j}{X_w}, T_g, T_b, X_w, p \right) F_c \left(\frac{\tilde{C}_j}{X_c}, T_g, T_b, X_c, p \right) - F_w \left(\frac{\tilde{C}_{j-1}}{X_w}, T_g, T_b, X_w, p \right) F_c \left(\frac{\tilde{C}_{j-1}}{X_c}, T_g, T_b, X_c, p \right) \end{aligned} \quad (23)$$

Estes são os modelos espectrais empregados neste trabalho, além disso é necessário empregar um método de solução para a dependência espacial da RTE, apresentado na próxima seção.

2.3 MODELAGEM DIRECIONAL DA RADIAÇÃO TÉRMICA – MÉTODO DAS ORDENADAS DISCRETAS

A transferência de calor radiativa é efetivamente computada na equação da conservação de energia como o negativo do divergente do fluxo de calor radiativo, Eq. (9). O método empregado para a integração no espaço utilizado neste trabalho é o Método das Ordenadas Discretas. O método foi proposto por Chandrasekhar (1960), é baseado em uma representação discreta da dependência direcional da intensidade radiativa. Dessa forma a solução é obtida resolvendo a RTE para um conjunto de direções discretas que totalizam o ângulo solido 4π . A

RTE é então escrita para cada ordenada direcional discreta e seus termos integrais são substituídos por quadraturas numéricas somadas para todas as direções discretas. O método empregado foi utilizado diretamente através da implementação do Ansys Fluent.

No Método das Ordenadas Discretas as integrais são substituídas por quadraturas numéricas:

$$\int_{4\pi} f(\vec{s}) d\omega = \sum_{m=1}^M w_i f(\vec{s}_m) \quad (24)$$

onde M é o número de direções e w_i são os pesos das quadraturas associadas as direções \vec{s}_m . A RTE, Equação 1, pode ser aproximada por um conjunto M de direções (Modest, 2003):

$$dI_\eta(S, \vec{s}_m) = -\kappa_\eta(S)I_\eta(S, \vec{s}_m)dS + \kappa_\eta(S)I_{b,\eta}(S)dS \quad (25)$$

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

$$\vec{q}_{rad,\eta}(S) = \int_{4\pi} I_\eta(S, \vec{s})\vec{s}d\omega \cong \sum_{m=1}^M w_m I_{m\eta}(S)\vec{s}_m \quad (26)$$

3. SIMULAÇÃO NUMÉRICA CHAMA LAMINAR

Neste trabalho foi avaliada uma chama difusiva laminar, nesse tipo de chama os reagentes estão inicialmente separados e a reação química ocorre na interface de encontro entre o combustível e o oxidante. O escoamento considerado é laminar e a modelagem consiste na solução das equações de conservação para a massa, quantidade de movimento, energia e massa das espécies químicas;

A equação de conservação de massa pode ser escrita por:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{v}) = 0 \quad (27)$$

onde ρ é a densidade da mistura e \vec{v} a velocidade do escoamento. Nesse caso o escoamento é considerado incompressível, então a densidade independe da pressão e é calculada por $\rho = p_0 MW / R_u T$, onde 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. A conservação da quantidade de movimento pode ser escrita por:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{v} \times \vec{v}) = -\vec{\nabla} p + \rho\vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \hat{\tau} \quad (28)$$

onde p é a pressão, \vec{g} é o vetor que representa as forças de campo e $\hat{\tau}$ o tensor das tensões. A conservação da massa das espécies químicas pode ser expressa em termos da fração mássica Y , para cada espécie para as N_s espécies envolvidas conforme a equação de transporte:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{v}Y_i) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i + \dot{\omega}_i, \quad \text{para } i = 1, N_s - 1 \quad (29)$$

onde \vec{J}_i representa o vetor de difusão mássica calculado pela Lei de Fick e $\dot{\omega}_i$ o termo fonte devido às reações químicas calculado pela equação de Arrhenius. A equação de conservação da energia pode ser escrita em termos da entalpia específica da mistura:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho\vec{v}h) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q + \dot{Q}_R, \quad (30)$$

os termos do lado esquerdo representam o transporte da entalpia, h , por advecção. A entalpia foi calculada por $\dot{m} \cdot h = \dot{m} h_f^0 + \int_{T_{ref}}^T \dot{m} c_p(T) dT$, sendo h_f^0 a entalpia específica de formação da espécie i na temperatura de referência, T_{ref} e c_p o calor específico a pressão constante e os termos do lado direito representam o divergente do vetor fluxo de calor, \vec{J}_q , e o termo fonte radiativo, \dot{Q}_R , objeto de estudo deste trabalho.

3.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Para a realização da simulação foi definida primeiramente o tipo de chama laminar e o tipo de queimador. A chama laminar difusiva escolhida não possui fuligem, o que foi possível obter utilizando como combustível CH_4 com diluição de CO_2 . Foi escolhido um queimador semelhante ao proposto em Santoro et al., 1983. Esse queimador é composto por um tubo central, com 11,1 mm de diâmetro interno e 12,7 mm de diâmetro externo, no qual ocorre a entrada do combustível e um tubo externo coaxial com 101,6 mm de diâmetro interno e 107,9 mm de diâmetro externo no qual escoam o oxidante (*coflow*), o que gera a estabilização da chama.

Um esquema da geometria utilizada na simulação é apresentado na Figura 2. Cada região do domínio está indicada com a condição de contorno proposta para resolver o problema, conforme a nomenclatura utilizada no *software*. O problema é considerado axissimétrico, portanto, apenas a metade da chama está sendo resolvida.

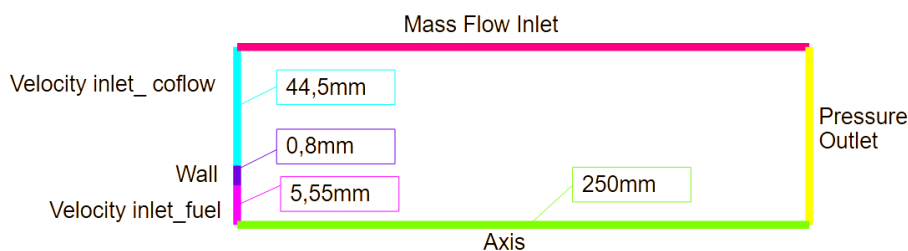


Figura 2 – Esquema com condições de contorno e geometria.

A chama laminar utilizada nesse trabalho faz parte de um estudo conduzido no Laboratório de Combustão da UFRGS. A velocidade de entrada do combustível é de 0,0775 m/s e a velocidade de entrada do *coflow* é de 0,208 m/s. Não foi considerado o aquecimento do combustível. Para obter um escoamento plenamente desenvolvido na entrada de combustível, sendo um escoamento laminar em um tubo, sabe-se que seu perfil plenamente desenvolvido é parabólico (Fox et al., 2004). Uma equação fornecendo o perfil parabólico de entrada é definida em uma rotina, sendo implementada por uma função definida pelo usuário no Ansys Fluent.

A condição de contorno *mass flow inlet* exige um valor de vazão mássica de entrada no domínio. Como a chama está aberta ao ar exterior, a modelagem numérica consiste em definir um valor de $1e-12$ kg/s, ou seja, um valor numérico para atender a condição de contorno, mas que simula o ar ambiente. Com relação a condição de contorno de *pressure outlet* foi empregada a condição de pressão atmosférica. Com relação às concentrações molares do combustível, a chama laminar avaliada possui diluição de CO_2 , sendo composta em X_{CH_4} de 0,556 e X_{CO_2} de 0,5444. A diluição da chama foi considerada para que a chama não apresente fuligem na combustão. Dessa forma é possível negligenciar a sua modelagem e sua interação com a transferência de calor por radiação (Modest, 1993).

A avaliação do modelo de radiação térmica foi realizada de forma desacoplada, ou seja, foram utilizados campos de temperatura e concentração das espécies participantes (CO_2 e H_2O) convergidos da simulação da chama escolhida negligenciando a perda de calor por

radiação. Com os campos calculados foram obtidos o fluxo de calor radiativo e o divergente do fluxo de calor radiativo para cada um dos modelos WSGG e *Rank-Correlated* SLW. Dessa forma foi possível isolar o efeito do modelo de radiação empregado.

3.2 MODELAGEM NUMÉRICA

A modelagem numérica é baseada no método dos volumes finitos (FVM: *Finite Volume Method*) implementado no código comercial Ansys-Fluent versão Acadêmica 2020R1. A discretização espacial das equações governantes foi realizada pelo esquema *upwind* de segunda ordem. O acoplamento entre a pressão e a velocidade foi considerado pelo algoritmo SIMPLE (*SemiImplicit Method for Pressure Linked Equations*) (Patankar, 1980), no SIMPLE uma equação de correção para a pressão é resolvida para garantir a conservação de massa e obter o campo de pressão. A simulação foi realizada em regime estacionário.

As taxas de produção/destruição das espécies foram resolvidas com o mecanismo de cinética química GRI-Mech 3.0 (Smith et al., 1999) que consiste em 325 reações químicas elementares e contém 53 espécies participantes, acoplado ao ChemKin versão 4.0, incorporado ao código Ansys Fluent, para a solução das equações de transporte e com base na tabela de polinômios da NASA (McBride et al 1993) para o cálculo das propriedades termofísicas das espécies químicas.

Os modelos de radiação empregados neste trabalho foram implementados via sub-rotinas programadas em linguagem C, as *user defined functions* (UDFs). O modelo SLW não está disponível atualmente no *software* Ansys Fluent, portanto sua implementação depende da programação do modelo. O modelo WSGG disponível do Ansys Fluent foi avaliado no trabalho de Rodrigues (2016). Nesse trabalho foram encontradas significativas diferenças entre as correlações obtidas por Smith et al (1982) utilizando o código Ansys Fluent, com as correlações propostas por Dorigon et al., (2013). O modelo WSGG incorporado à simulação via sub-rotinas UDFs resultou em um fluxo de calor radiativo até 50% maior que o calculado pelo código do Ansys Fluent. O desenvolvimento das rotinas para implementação dos modelos não fez parte do escopo deste trabalho, sendo utilizadas rotinas desenvolvidas pelo grupo de pesquisa de Radiação Térmica da UFRGS.

No modelo WSGG foram definidos 5 gases cinza, o que inclui a janela transparente. Na primeira avaliação do modelo *Rank-Correlated* SLW também foram definidos 5 gases cinza, para testar o número de direções do Método das Ordenadas Discretas. No modelo *Rank-Correlated* SLW a temperatura utilizada como referência foi a temperatura média no volume da chama (foram considerados valores acima da temperatura ambiente, 298K). Após definição do número de direções foram testados no modelo *Rank-Correlated* SLW o número de 3, 5 e 10 gases cinza. As tabelas para função ALBDF utilizadas foram propostas em (Pearson et al., 2014a; e Pearson et al., 2014b).

3.3 ANÁLISE DE QUALIDADE DE MALHA

Para garantir a qualidade de malha será realizada uma avaliação com três diferentes malhas: a malha M1 possui 81920 elementos, a malha M2 possui 32000 e a malha M3 possui 12500 elementos. Os elementos das malhas são retangulares e não uniformes, conforme apresentado na Figura 3. Além disso, a maior parte dos elementos se concentram na região da chama laminar. A avaliação da qualidade de malha foi realizada através do *Grid Convergence Index*, GCI. A análise estima a precisão da solução numérica, avaliando a porcentagem de desvio da solução numérica em relação ao seu valor assintótico. O GCI foi calculado conforme proposto em Celik et al., 2008.

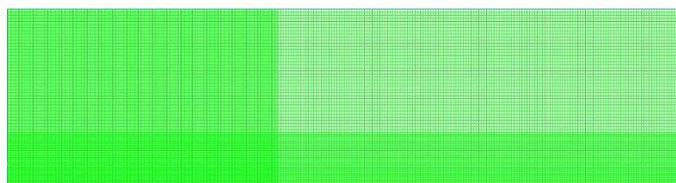


Figura 3 – Malha M2 com 32000 elementos.

Os parâmetros para avaliar a qualidade da malha foram temperatura e fração mássica de CO₂ e H₂O. O resultado para o índice GCI entre as malhas M3 e M2, GCI_{32} , foi considerado com precisão suficiente para utilização da malha intermediária. As incertezas associadas à temperatura e às frações mássicas de CO₂ e H₂O foram $8,26 \times 10^{-4}$, $9,22 \times 10^{-3}$ e $3,16 \times 10^{-3}$ respectivamente. Com base no estudo da qualidade da malha, a malha M2 com 32000 células, foi escolhida para relatar todos os resultados do caso escolhido.

Além da análise da qualidade de malha foi necessário avaliar a discretização angular empregada no modelo das ordenadas discretas. O estudo da discretização angular foi realizado apenas com a malha escolhida (M2). O modelo de ordenadas discretas resolve a RTE para um número finito de ângulos sólidos discretos. O critério de convergência adotado para a análise foi de 10^{-6} para os resíduos. Os testes foram realizados com 80, 120 e 160 divisões angulares, definidas no Ansys Fluent. Em cada avaliação o fluxo de calor radiativo obtido ao longo da linha de contorno do modelo foi comparado com o resultado obtido para 80 divisões angulares. O desvio percentual médio entre os resultados é apresentado na Tabela 2 e foi calculado conforme equação:

$$\delta(\%) = \frac{|q_{R2}'' - q_{R1}''|}{q_{R2}''} 100 \quad (31)$$

no qual q_{R2}'' é o fluxo radiativo em cada ponto sob a linha de medição com maior discretização angular e q_{R1}'' é o fluxo radiativo em cada ponto sob a linha de medição com menor número de direções angulares. O desvio percentual médio foi inferior a 0,4% para o modelo WSGG, indicando que 120 divisões angulares são suficientes. No modelo SLW o desvio percentual médio foi inferior a 0,6%. Sendo a diferença percentual inferior a 1% em ambos os modelos, pode-se entender que 120 direções são suficientes para análise do problema.

Tabela 2 - Desvio médio entre fluxo de calor radiativo obtido com diferente discretização angular

Direções	Desvio Médio $\delta(\%)$ - WSGG	Desvio Médio $\delta(\%)$ - SLW
80	-	-
120	0,34	0,41
160	0,38	0,59

4. RESULTADOS

Os resultados apresentados neste trabalho foram calculados com a malha M2 com 32000 elementos, conforme a análise de qualidade de malha. A Figura 4 apresenta o perfil de temperatura e espécies participantes. Esses são os resultados obtidos negligenciando a perda de calor por radiação térmica.

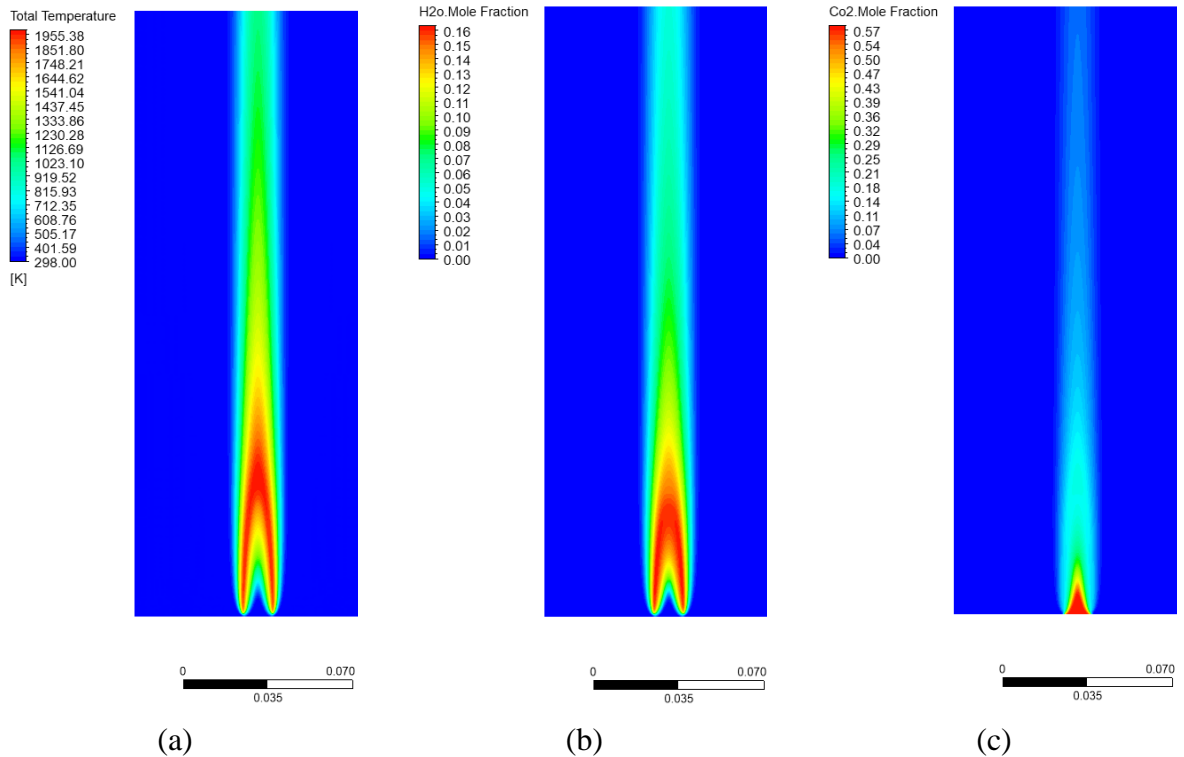


Figura 4 – Resultados para (a) perfil térmico de temperatura, (b) fração molar de H₂O e (c) fração molar de CO₂.

Pode-se observar o perfil térmico compatível com a chama proposta, conforme trabalho semelhante de Rodrigues et al., (2019). As frações molares de CO₂ e H₂O foram escolhidas por serem os gases participantes da transferência de calor por radiação. Além disso, com a fração molar de CO₂ podemos observar o efeito da diluição na entrada de combustível somada a quantidade produzida durante a combustão de CH₄.

O fluxo de calor radiativo foi obtido com os campos apresentados na Figura 4. Na Figura 5 são apresentados os valores obtidos com o modelo WSGG e *Rank-Correlated* SLW, esse valor foi contabilizado na linha de contorno do modelo, sobre a condição de contorno *mass flow inlet* (Figura 2).

Observa-se que o modelo *Rank-Correlated* SLW contabiliza um fluxo de calor radiativo inferior ao do modelo WSGG. O desvio médio entre as soluções e o desvio máximo são apresentados na Tabela 3. O desvio foi calculado conforme Equação 32:

$$\delta(\%) = \frac{|q_{SLW}'' - q_{WSGG}''|}{\max(q_{SLW}'')} 100 \quad (32)$$

onde q_{SLW}'' é o fluxo de calor radiativo obtido no modelo *Rank-Correlated* SLW e q_{WSGG}'' é o fluxo de calor obtido com o modelo WSGG.

O desvio foi normalizado para o valor máximo do fluxo de calor radiativo a fim de identificar os pontos em que o resultado é significativo. Além disso foi utilizado o valor obtido no modelo *Rank-Correlated* SLW porque é o modelo que se espera maior precisão dos resultados (Webb et al., 2019).

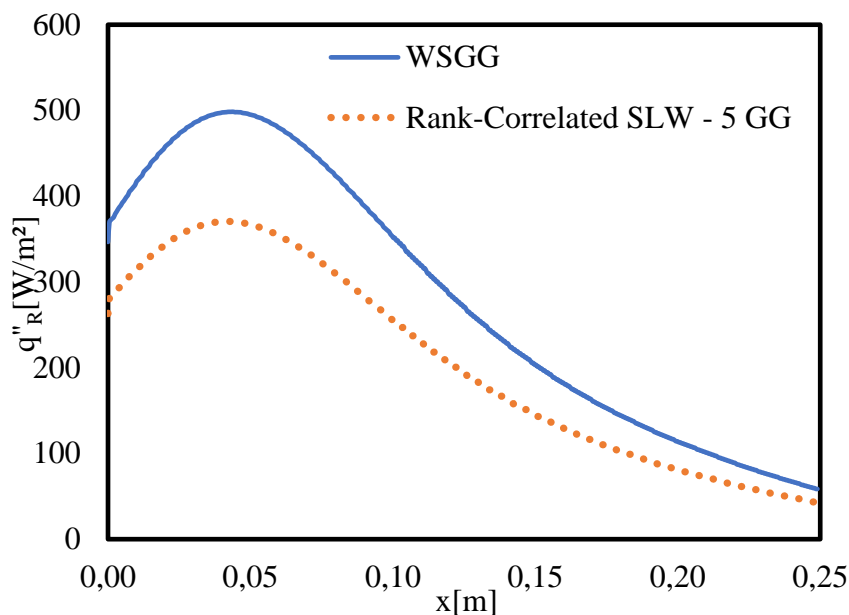


Figura 5 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Tabela 3 - Desvio médio e desvio máximo entre resultados de fluxo de calor radiativo obtido com modelos WSGG e Rank-Correlate SLW

Desvio Médio δ (%)	Desvio Máximo δ (%) -
20,3	34,6

Os valores de fluxo de calor radiativo apresentados Figura 5 são provenientes de simulações desacopladas, dessa forma não há influência de outros modelos sobre o resultado e os valores representam somente da modelagem espectral da radiação térmica. O modelo WSGG superestimou o fluxo de calor radiativo em comparação ao modelo *Rank-Correlated* SWL, o que também foi observado em Rodrigues et al., (2024) na região do pico. Porém, conforme a Figura 5, há diferença entre os modelos ao longo de toda linha de medição. Uma possível causa para a diferença entre os resultados foi o número de gases cinza utilizados, em Rodrigues et al (2024) foram considerados 20 gases cinza e neste trabalho apenas 5 gases cinza para a avaliação comparativa com o modelo WSGG. A escolha do número de gases cinza para o modelo *Rank-Correlated* SLW para este caso se baseou na pesquisa Solovjov et al., (2017) em que foram testados 3,4, 8 e 25 gases cinza no modelo *Rank-Correlated* SLW, e para as condições propostas, foi observado que com 5 gases cinza os resultados apresentaram boa precisão com relação a solução LBL.

O termo fonte radiativo foi calculado sobre a linha central do domínio, sobre o eixo de simetria. O termo fonte radiativo, S_R , foi calculado através da obtenção da parcela de radiação absorvida no volume reduzida da quantidade de radiação emitida no volume conforme Figura 6. O desvio entre as soluções é apresentado na Tabela 4, normalizado pelo valor mínimo obtido no modelo *Rank-Correlated* SLW:

$$\delta(\%) = \frac{||q''_{SLW}| - |q''_{WSGG}||}{|\min(q''_{SLW})|} 100 \quad (33)$$

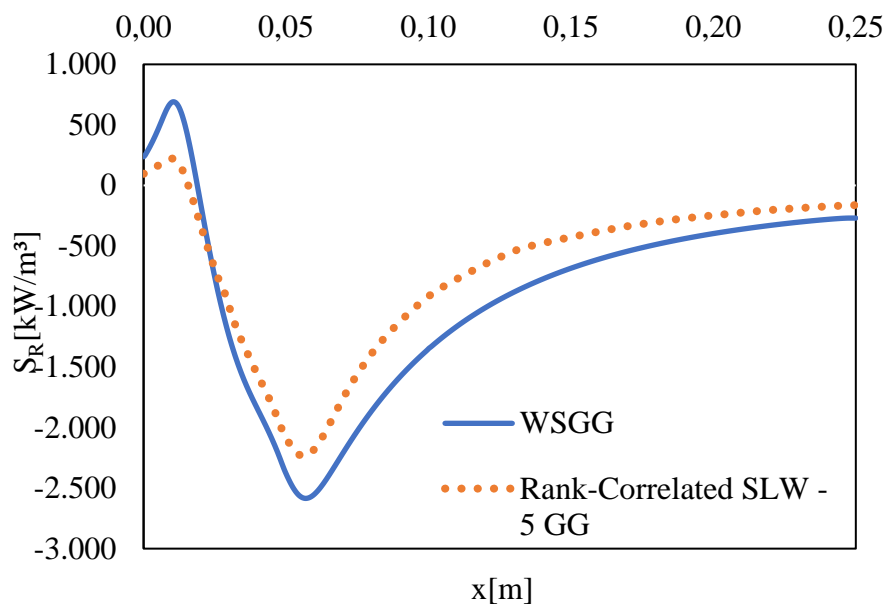


Figura 6 – Termo fonte radiativo na linha central.

Tabela 4 - Desvio médio e desvio máximo entre resultados de termo fonte radiativo obtido com modelos WSGG e Rank-Correlate SLW

Desvio Médio δ (%)	Desvio Máximo δ (%) -
11,8	21,2

Como também ocorre no resultado do fluxo de calor radiativo, na região de maior emissão o modelo WSGG estima um valor superior ao modelo *Rank-Correlated* SLW. Com a diferença apresentada entre os modelos espectrais foram testados 3, 5 e 10 gases cinza para o modelo *Rank-Correlated* SLW, a fim de avaliar o impacto do número de gases cinza neste modelo. A Figura 7 apresenta os resultados para o fluxo de calor radiativo.

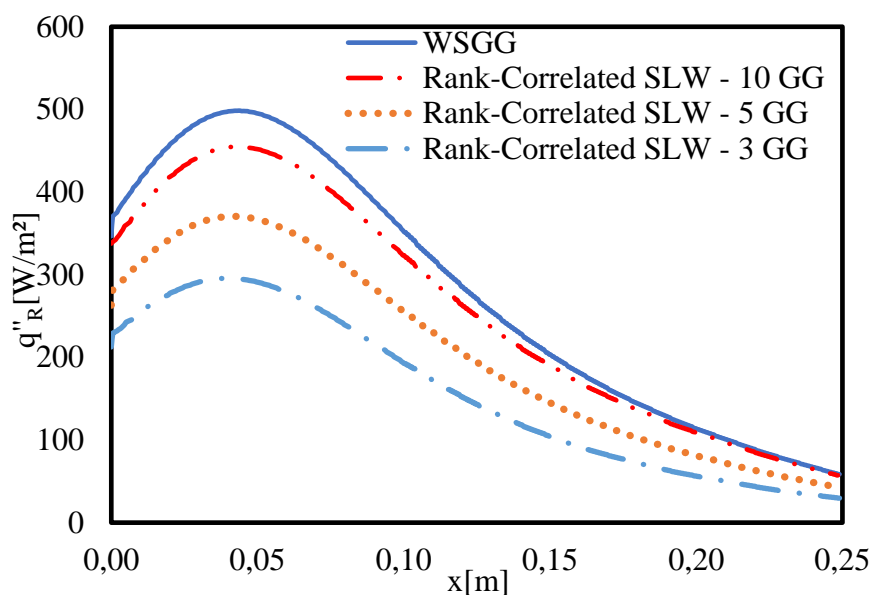


Figura 7 – Fluxo de calor radiativo na linha de medição.

Ao aumentar o número de gases cinza o intervalo de integração das seções transversais de absorção diminui, por isso observa-se a diferença dos resultados. A Tabela 5 apresenta os desvios entre cada uma das soluções obtidas para o modelo *Rank-Correlated* SLW e o modelo WSGG.

Tabela 5 - Desvio médio e desvio máximo entre resultados de fluxo de calor radiativo obtido com modelos WSGG e Rank-Correlated SLW

<i>Rank-Correlated</i> -SLW	Desvio Médio δ (%)	Desvio Máximo δ (%)
3 Gases Cinza	41,8	69,3
5 Gases Cinza	20,3	34,6
10 Gases Cinza	4,7	9,5

O termo fonte radiativo, Figura 8, apresenta comportamento semelhante ao fluxo de calor radiativo, com as soluções se aproximando ao aumentar o número de gases cinza no modelo *Rank-Correlated* SLW. A Tabela 6 apresenta os desvios entre cada uma das soluções obtidas para o modelo *Rank-Correlated* SLW e o modelo WSGG. Nota-se que o aumento do número de gases cinza aproximou as soluções, mas o modelo WSGG ainda apresenta maior fluxo de calor radiativo na região do pico. Medições experimentais desta chama poderão ser utilizadas em trabalhos futuros para comparação de resultados e avaliação do impacto das diferentes modelagens em uma simulação acoplada. Por fim, ainda que os desvios entre os modelos tenham sido reduzidos, o tempo computacional ao aumentar o número de gases cinza cresceu em torno de 4 vezes no modelo *Rank-Correlated* SLW considerando 10 gases cinza em comparação ao modelo WSGG.

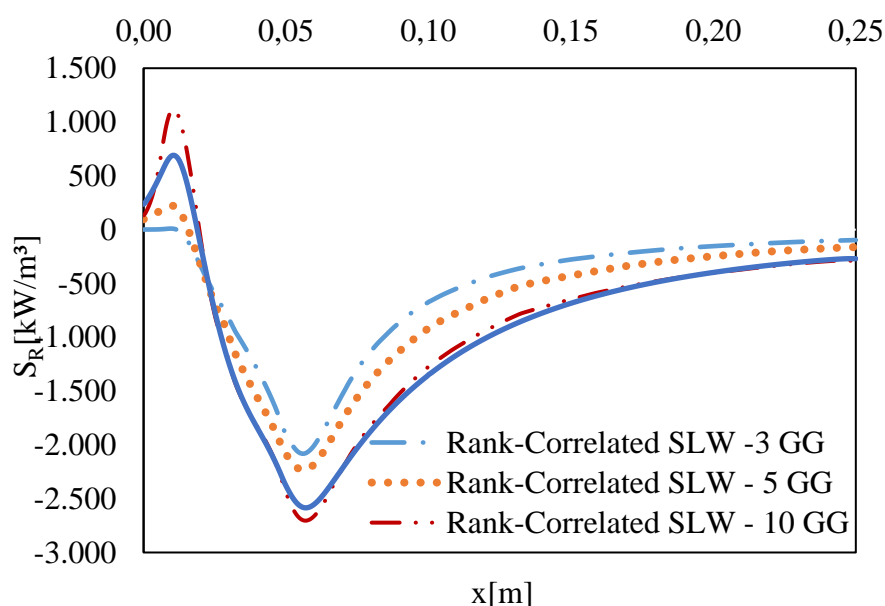


Figura 9 – Termo fonte radiativo na linha central

Tabela 6 - Desvio médio e desvio máximo entre resultados de termo fonte radiativo obtido com modelos WSGG e Rank-Correlated SLW

<i>Rank-Correlated</i> SLW	Desvio Médio δ (%)	Desvio Máximo δ (%)
3 Gases Cinza	20,4	32,7
5 Gases Cinza	11,8	21,2
10 Gases Cinza	1,9	15,9

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foram avaliados os impactos da modelagem espectral através da comparação de dois modelos espectrais, o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) e a variante *Rank-Correlated* do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseado nas linhas espectrais (SLW). Os modelos foram comparados utilizando resultados de perfis térmicos de temperatura e espécies participantes, CO₂ e H₂O, através da simulação numérica de chama laminar difusiva. A cinética química foi resolvida com o modelo detalhado de cinética química, as equações de estado e a conservação da massa e da quantidade de movimento completaram a modelagem do escoamento laminar. O estudo foi realizado com o *solver* comercial Ansys Fluent. A modelagem da radiação térmica foi realizada de forma desacoplada, foram utilizados os campos convergidos de temperatura e concentrações das espécies participantes da chama estudada. O modelo WSGG e o modelo *Rank-Correlated* SLW foram incorporados através de rotinas definidas pelo usuário. A modelagem numérica utilizada foi o método dos volumes finitos e a discretização espacial das equações que regem o escoamento foi realizada utilizando o esquema *upwind* de segunda ordem. O acoplamento entre pressão e velocidade foi realizado com algoritmo SIMPLE. Para garantir a qualidade da malha, foram avaliadas três malhas diferentes, com elementos retangulares e não uniformes, e a análise da qualidade da malha foi realizada utilizando o *Grid Convergence Index*, GCI.

As diferenças médias encontradas entre os modelos foram em torno de 20 % para o fluxo de calor radiativo calculado e de cerca de 12 % para o termo fonte radiativo considerando cinco gases cinza para o modelo *Rank-Correlated* SWL e no modelo WSGG foram considerados quatro gases cinza e a janela transparente. A avaliação do número de gases cinza no modelo *Rank-Correlated* SLW, considerando 3, 5 e 10 gases cinza mostrou que o aumento do número de gases aproxima o resultado do fluxo de calor radiativo e do termo fonte radiativo para ambos os modelos, com desvios médios para fluxo de calor radiativo em torno de 5% e termo fonte radiativo em torno de 2% para o caso em que foram considerados 10 gases cinza.

A próxima etapa desta pesquisa é utilizar os modelos de radiação espectral acoplados a simulação numérica da chama laminar. Ao contabilizar a perda de calor por radiação térmica a temperatura da chama será afetada, o que irá alterar o resultado do fluxo de calor radiativo. Portanto, é possível que as diferenças entre os modelos apresentem resultados diferentes dos obtidos neste trabalho. A comparação dos resultados numéricos com dados experimentais também poderá ser realizada, uma vez que esta chama possui medições para fluxo de calor radiativo e temperatura de chama, o que poderá contribuir de forma significativa para a avaliação dos modelos espectrais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Celik, I.B.; Ghia, U.; Roache, P.J.; Freitas, C.M.; Coleman, H.; Raad, P. Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. **Journal of Fluids Engineering**, v. 130, p. 078001-1 – 078001-4, 2008.
- Chandrasekhar, S., Radiative transfer, **Dover Publications**, 1960.
- Denison, M.K. and Webb, B.W. A spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers, **Journal of Heat Transfer**, v. 115(4), p. 1004-1012, 1993a.
- Denison, M.K. and Webb, B.W. An absorption-line blackbody distribution function for efficient calculation of total gas radiative transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 50, p. 499-510, 1993b.
- Dorigon, L.J., Duciak, G., Brittes, R., Cassol, F., Galarça, M., França, F.H.R., WSGG correlations based on HITEMP 2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures, **IJHMT**, v. 64, pp. 863-873, 2013.
- Fonseca, R.J.C.; Fraga, G.C.; Brittes, R.S., França, F.H.R., Application of the WSGG Model to Solve the Radiative Transfer in Gaseous System with Nongray Boundaries, **J. Heat Transfer**, v. 140, pp.1705-1715, 2018.
- Fox, R.W., McDonald, A.T., Pritchard, P.J. “Introduction to fluid mechanics”. **John Wiley & Sons, Inc**, ed. 6, 2004.
- Hottel, H.C.; Sarofim, A.F., “Radiative Transfer”. **Ed. McGraw-Hill**, New York, 1967.
- Lemos, L.D.;Llanos L.A.Q.; Pereira F.M.; Centeno F.R.; França F.H.R, Comparison between numerical and experimental data of radiative heat transfer in a natural gas/CO₂/H₂ turbulent flame, **Fuel**, v. 281, 2020.
- McBride, B.J.; Gordon, S.; Reno, M.A. Coefficients for calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species, **NASA Technical Memorandum** 4513, 1993.
- Modest, M. F., The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer, **J. Heat Transfer**, v. 113, pp.650-656, 1991.
- Modest, M.F. Radiative Heat Transfer, **MC Graw-Hill**, Nova York, 1993.
- Patankar, S.V., Numerical heat transfer and fluid flow, **Hemisphere**, New York, 1980.
- Pearson, J.T., Webb, B.W., Solovjov, V.P., and Ma, J. Effect of total pressure on the absorption line blackbody distribution function and radiative transfer in H₂O, CO₂, and CO, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 143, p. 100-110, 2014a.
- Pearson, J.T., Webb, B.W., Solovjov, V.P., and Ma, J. Efficient representation of the absorption line blackbody distribution function for H₂O, CO₂, and CO at variable temperature, mole fraction, and total pressure. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 138, p. 82-96, 2014b.
- Rodrigues, L.G.P., Aplicação do modelo da soma ponderada de gases cinza na simulação da transferência radiativa em chamas difusivas laminares de metano diluído com CO₂ e N₂, **Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul**, Porto Alegre, 2016.
- Rodrigues, L.G.P., Coelho F.R., Centeno F.R., França F.H.R., Application of absorption-line blackbody distribution functions for H₂O-CO₂ mixtures for the spectral integration of the radiative transfer equation with SLW model. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Vol 151, 2024
- Rodrigues, L.G.P., Machado, I.M., Zienniczak, A. Pereira, F.M., Pagot, P.R., França, F.H.R. Comparisons between Numerical Simulations and Experimental Measurements of Radiative Heat Flux for a Series of CH₄/N₂ Diluted Laminar Non-Premixed Flames. **Combustion Science and Technology**, v. 193, p. 1-22, 2019.

Rothman, L.S, Gordon, I.E., Barber, R.J., Dothe, H., Gamache, R.R, Goldman, A., Perevalov, V.I. Tashkun, S.A., and Tennyson, J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 2130-2150, 2010.

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

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

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

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

Solovjov, V.P., Andre, F., Lemonnier, D., and Webb, B.W. The generalized SLW model, Eurotherm Conference 105: Computational Thermal Radiation in Participating Media V, **Journal of Physics: Conference Series**. v. 676, p. 1-36, 2016.

Solovjov, V.P., Andre, F., Lemonnier, D., and Webb, B.W. The rank correlated SLW model of gas radiation in non-uniform media, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**. v. 197, p. 26-44, 2017.

Webb, B.W., Solovjov, V.P., and André, F. Chapter Four – The spectral line weighted-sum-of-gray-gases (SLW) model for prediction of radiative transfer in molecular gases, **Advances in Heat Transfer**, v. 51, p. 207-298, 2019.

Yi, Z.; Su Z.; Yang Q.; Li G.; Zhang W.; Study of the non-gray-TRI effect on the turbulent methane combustion under O₂/CO₂ atmosphere, **Applied Thermal Engineering**, v. 130, p. 449-457, 2018.