

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-CINZAS NA
SOLUÇÃO DA TRANSFERÊNCIA RADIANTE EM MEIOS NÃO-ISOTÉRMICOS E
NÃO-HOMOGÊNEOS

por

Gustavo Duciak

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Abril de 2013

APLICAÇÃO DO MODELO DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-CINZAS NA
SOLUÇÃO DA TRANSFERÊNCIA RADIANTE EM MEIOS NÃO-ISOTÉRMICOS E
NÃO-HOMOGÊNEOS

por

Gustavo Duciak
Engenheiro Mecânico

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Aprovada por:

Prof^a. Adriane Prisco Petry

Prof. Cristiano Vitorino da Silva

Prof. Luiz Rocha

Prof.Dr.Rogério Marczak,
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 25, Abril de 2013

AGRADECIMENTOS

A minha esposa, por todo apoio, paciência, revisões e incentivo para a conclusão do mestrado.

Ao Professor Francis França, por toda ajuda disposição e orientação na condução deste estudo. Foram muitas reuniões para a concretização desse trabalho.

Ao colega Rogério Brittes, sua ajuda foi fundamental, tanto ao longo das disciplinas quanto no desenvolvimento da dissertação.

Ao colega Felipe Centeno, por sua contribuição com os perfis de temperatura e concentração da câmara de combustão cilíndrica e ideias que valorizaram esta dissertação.

Aos membros da banca avaliadora, por toda a atenção dada ao trabalho e sugestões importantes para sua melhoria.

A todos os professores do PROMEC pelo aprendizado. Fundamental para esse trabalho.

Aos colegas e amigos do GESTE por toda a parceria e amizade criada durante o período de mestrado.

A UFRGS que abriu as portas para o desenvolvimento desse trabalho.

RESUMO

A integração da equação da transferência radiante (RTE) é uma tarefa complexa devido a forte variação do coeficiente de absorção com relação ao número de onda. O modelo da soma ponderada dos gases cinza (WSGG) evita a integração linha por linha da RTE reduzindo o esforço computacional na resolução de problemas que envolvam gases participantes. Com a atualização dos coeficientes do WSGG, obtidos através do banco de dados HITEMP 2010, este trabalho se propôs a validá-los por meio de problemas unidimensionais de transferência de calor radiante. Os problemas são resolvidos pelo modelo WSGG e comparados com a solução obtida pela integração LBL (solução *benchmark*). Nas comparações foram utilizados diferentes perfis de temperatura, distâncias características, gradientes de temperatura e concentrações de espécies. Nos casos analisados é possível verificar uma boa concordância geral entre os resultados WSGG e LBL. O modelo também é testado na resolução de perfis advindos de seções de uma câmara de combustão cilíndrica que apresentaram condições diferentes para os quais os coeficientes WSGG foram propostos. Mesmo assim os resultados obtidos apresentaram uma boa concordância para o termo fonte radiante e para o fluxo de calor, sendo que os maiores erros foram observados na entrada da câmara onde os gradientes de temperatura são mais significativos.

Palavras-chave: radiação térmica; gases de combustão; modelo WSGG, integração linha-por-linha.

ABSTRACT

The spectral integration of the radiative transfer equation (RTE) is still a complex task due to the strong variation of the absorption coefficient with the wavenumber. The Weighted-Sum-of-Gray-Gases (WSGG) model avoids the Line-by-Line (LBL) integration of RTE. The aim of this study is to evaluate the updated WSGG coefficients, obtained from the database HITEMP 2010, in one-dimensional problems of radiative heat transfer. The problems are solved by the WSGG model and compared with the solution obtained by the LBL integration (benchmark solution). Various temperature and concentration profiles were evaluated and showed a good overall agreement between the WSGG and LBL results. The model was also tested by solving profiles arising from cylindrical combustion chamber and the obtained results showed good agreement for the radiative heat source term and the heat flux. The largest errors were observed near the chamber entrance where the temperature gradients are most significant.

Keywords: thermal radiation; combustion gases; WSGG model, integrating line-by-line.

ÍNDICE

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO..... | 1 |
| 1.1 | Revisão bibliográfica | 1 |
| 1.2 | Objetivos..... | 5 |
| 1.3 | Organização do trabalho | 6 |
| 2 | FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO TÉRMICA EM MEIOS PARTICIPANTES | 7 |
| 2.1 | Intensidade de radiação e poder emissivo do corpo negro | 7 |
| 2.2 | Intensidade da radiação térmica em meios não-participantes..... | 8 |
| 2.3 | Intensidade da radiação térmica em meios-participantes | 9 |
| 2.3.1 | Atenuação da intensidade devido a absorção e o espalhamento do meio participante...9 | |
| 2.3.2 | Aumento da intensidade devido a emissão do meio participante. | 12 |
| 2.4 | A equação do transporte radiante | 13 |
| 2.5 | A emitância total..... | 13 |
| 3 | LINHAS ESPECTRAIS DE ABSORÇÃO-EMIÇÃO..... | 15 |
| 3.1 | Alargamento das linhas espectrais..... | 17 |
| 3.2 | Tratamento dos parâmetros fornecidos pelo banco de dados espectral..... | 19 |
| 3.2.1 | Geração das linhas espectrais a partir do banco de dados HITEMP 2010 espectro | 20 |
| 3.3 | Correção da intensidade de linha devido à temperatura | 21 |
| 3.4 | Coefficiente de absorção espectral..... | 22 |
| 3.5 | O efeito da pressão e da temperatura sobre o coeficiente de absorção..... | 24 |
| 4 | MODELAGEM DO COEFICIENTE DE ABSORÇÃO DOS GASES | 27 |
| 4.1 | Integração linha por linha (LBL)..... | 27 |
| 4.2 | O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas..... | 29 |
| 4.2.1 | Os coeficientes da soma-ponderada-de-gases-cinzas | 31 |
| 4.2.2 | A equação da transferência radiante em problemas unidimensionais | 32 |
| 4.3 | O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais (SLW).34 | |
| 4.4 | O modelo do número de onda cumulativo (CW)..... | 37 |
| 5 | RESULTADOS E DISCUSSÃO..... | 45 |
| 5.1 | Perfis de temperatura e concentração uniformes | 48 |
| 5.2 | Perfis de temperatura não homogêneo e concentração homogêneas | 51 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 5.3 | Perfis não homogêneos de temperatura e concentração | 57 |
| 5.3.1 | Caso 1: | 57 |
| 5.3.2 | Caso 2 | 61 |
| 5.3.3 | Caso 3 | 65 |
| 5.3.4 | Caso 4 | 68 |
| 5.3.5 | Caso 5 | 72 |
| 5.4 | Perfis de temperatura e de pressão parcial obtidos de uma câmara cilíndrica..... | 75 |
| 5.4.1 | Seção axial | 75 |
| 5.4.2 | Seção radial a uma distância axial de 0,312 m | 78 |
| 5.4.3 | Seção radial a uma distância axial de 0,912 m | 80 |
| 5.4.4 | Seção radial a uma distância axial de 1,312 m | 82 |
| 6 | CONCLUSÕES..... | 85 |
| 6.1 | Proposta de continuidade | 87 |
| | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 88 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1.1 – Coeficiente de absorção de uma mistura de ar (gás inerte) com 20% em volume de vapor d'água na temperatura de 400 K e pressão de 1 atm (faixa do espectro: $1500 \text{ cm}^{-1} \leq \eta \leq 1700 \text{ cm}^{-1}$. Dados obtidos do banco de dados HITEMP [Rothman et al., 2010]. | 2 |
| Figura 2.1 – Geometria para definição da intensidade de radiação em meio participante. | 9 |
| Figura 2.2 – Absorção da radiação por um elemento infinitesimal de meio participante. | 9 |
| Figura 4.1– Divergente do fluxo radiante obtidos para diferentes interpolações de temperatura | 29 |
| Figura 4.2 – Representação de um meio participante por meio de três gases cinza através modelo WSGG [Galarça et al., 2008]. | 30 |
| Figura 4.3 – Partes do espectro em que a função ALB é calculada. | 34 |
| Figura 4.4 – Seções transversais usando o modelo SLW. | 35 |
| Figura 4.5 – Forma esquemática do número de onda cumulativo [Solovjov e Webb, 2002]. | 38 |
| Figura 4.6 – Dependência do número de onda cumulativo com a concentração [Solovjov e Webb, 2002]. | 40 |
| Figura 4.7 – Dependência do número de onda cumulativo com uma constante adicionada ao espectro [Solovjov e Webb, 2002]. | 41 |
| Figura 4.8 – Modelagem espectral dos gases cinzas fracionais [Solovjov e Webb, 2002]. | 41 |
| Figura 5.1 – Representação da geometria referente aos problemas solucionados. | 45 |
| Figura 5.2– Divergente do fluxo radiante obtidos para número de malha distintos. | 46 |
| Figura 5.3– Convergência dos resultados para o divergente do fluxo radiante obtidos para diferentes número de malha. | 46 |
| Figura 5.4– Divergente do fluxo radiante obtidos para diferentes interpolações de temperatura | 47 |
| Figura 5.5 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 48 |
| Figura 5.6 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 49 |
| Figura 5.7 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 49 |

| | |
|--|----|
| Figura 5.8 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogenias para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ | 50 |
| Figura 5.9 Perfis de temperatura utilizados para testar o modelo WSGG..... | 52 |
| Figura 5.10 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação para modelo WSGG com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.3)..... | 54 |
| Figura 5.11 –Resultados para Fluxo de calor do modelo WSGG comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.4)..... | 54 |
| Figura 5.12 –Resultados obtidos para fluxo de calor por radiação com modelo WSGG comparado a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.5)..... | 55 |
| Figura 5.13 – Comparação do termo fonte radiante obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.3)..... | 55 |
| Figura 5.14 – Comparação do termo fonte radiante obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.4)..... | 56 |
| Figura 5.15 – Comparação do termo fonte radiante obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.5)..... | 56 |
| Figura 5.16 Perfil de temperatura dado pela Eq.(5.6). | 58 |
| Figura 5.17 Perfil de concentração dado pela Eq.(5.7). | 58 |
| Figura 5.18 – Resultados para o fluxo de calor por radiação com o modelo WSGG comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$:..... | 59 |
| Figura 5.19 – Resultados para o fluxo de calor por radiação com o modelo WSGG comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$;..... | 59 |
| Figura 5.20 – Resultados para do termo fonte radiate obtidos através do modelo WSGG e comparados com solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ | 60 |
| Figura 5.21 – Resultados para do termo fonte radiate obtidos através do modelo WSGG e comparados com solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ | 60 |
| Figura 5.22 Perfil de concentração dado pela Eq.(5.8). | 62 |
| Figura 5.23 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ | 63 |
| Figura 5.24 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ | 63 |

| | |
|--|----|
| Figura 5.25 – Resultados para termo fonte obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 64 |
| Figura 5.26 – Resultados para termo fonte obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 64 |
| Figura 5.27 – Resultados para o fluxo de calor radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 66 |
| Figura 5.28 – Resultados para o fluxo de calor por radiação obtido com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 66 |
| Figura 5.29 - Resultados para o termo fonte radiante obtido com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 67 |
| Figura 5.30 - Resultados para o termo fonte radiante obtidos através da solução LBL e comparados com o método WSGG para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 67 |
| Figura 5.31 – Comparação dos resultados para o fluxo de calor por radiação do modelo WSGG com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 69 |
| Figura 5.32 Comparação dos resultados para o fluxo de calor por radiação do modelo WSGG com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 70 |
| Figura 5.33 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 70 |
| Figura 5.34 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 71 |
| Figura 5.34 – Resultados para o fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 72 |
| Figura 5.35 – Resultados para o fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 73 |
| Figura 5.36 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$. | 73 |
| Figura 5.37 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. | 74 |

| | |
|---|----|
| Figura 5.39 – Câmara de combustão com os respectivos cortes onde foram obtidos os perfis de temperatura e pressões parciais..... | 75 |
| Figura 5.40 – Perfil de temperatura obtido para o corte axial na câmara de combustão..... | 76 |
| Figura 5.41 – Perfis para as pressões parciais de vapor da água e gás carbônico.obtidos para o corte axial na câmara de combustão. | 76 |
| Figura 5.42 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção axial da câmara de combustão..... | 77 |
| Figura 5.43 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção axial da câmara de combustão..... | 77 |
| Figura 5.44 – Perfil de temperatura.obtido através do corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,312 m. | 78 |
| Figura 5.45 – Perfis de pressões parciais de CO ₂ e H ₂ O no corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,312 m. | 78 |
| Figura 5.46 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,312 m da câmara de combustão..... | 79 |
| Figura 5.47 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante.para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,312 m da câmara de combustão..... | 79 |
| Figura 5.48 – Perfil de temperatura obtido em um corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,912 m. | 80 |
| Figura 5.49 – Perfis das pressões parciais de CO ₂ e H ₂ O.em um corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,912 m. | 81 |
| Figura 5.50 –Resultados para o fluxo de calor por radiação do modelo WSGG em comparação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,912m da câmara de combustão. | 81 |
| Figura 5.51 –Resultados para o termo fonte radiante do modelo WSGG em comparação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,912m da câmara de combustão. | 82 |
| Figura 5.52 – Corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 1,312 m para o perfil de temperatura..... | 83 |
| Figura 5.53 – Corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 1,312 m para os perfis das pressões parciais de CO ₂ e H ₂ O..... | 83 |

Figura 5.54 – Resultados do fluxo de calor por radiação com o modelo WSGG comparado a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 1,312 m da câmara de combustão. 84

Figura 5.55 – Resultados do termo fonte radiante com modelo WSGG e comparado a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 1,312 m da câmara de combustão. 84

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 3.1– Nomenclatura utilizada no banco de dados HITEMP [Mossi, 2011]..... | 20 |
| Tabela 4.4.1 – Coeficientes utilizados no modelo WSGG para mistura de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ | 31 |
| Tabela 4.4.2 – Coeficientes utilizados no modelo WSGG para mistura de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ | 32 |
| Tabela 5.1 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (<i>benchmark</i>). | 57 |
| Tabela 5.2 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com a solução LBL (<i>benchmark</i>). | 61 |
| Tabela 5.3 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com a solução LBL (<i>benchmark</i>). | 65 |
| Tabela 5.4 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (<i>benchmark</i>). | 68 |
| Tabela 5.5 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (<i>benchmark</i>). | 71 |
| Tabela 5.6 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (<i>benchmark</i>). | 74 |
| Tabela 5.7 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (<i>benchmark</i>) das seções da câmara estudada. | 85 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|--------|---|
| ALB | Função distribuição das linhas de absorção de corpo negro |
| ALBDF | <i>Absorption-line blackbody distribution function</i> |
| CDS | Banco de dados espectral para CO ₂ |
| CW | Modelo do número de onda Cumulativo |
| EM2C | Banco de dados baseado no HITRAN 1992 |
| HITEMP | Banco de dados espectral para a temperatura de 1000 K |
| HITRAN | Banco de dados espectral para a temperatura de 296 K |
| LBL | Linha-Por-Linha |
| RTE | Equação da Transferência Radiante |
| SLW | Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinzas baseado nas linhas espectrais |
| WSGG | Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas |

LISTA DE SIMBOLOS

| | |
|------------------|---|
| A | área, m ² |
| $a_{\eta}S$ | espessura ótica, adimensional |
| a_j | coeficientes de ponderação da soma ponderada dos gases cinza, adimensional |
| $b_{j,1}$ | coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, adimensional |
| $b_{j,2}$ | coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻¹ |
| $b_{j,3}$ | coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻² |
| $b_{j,4}$ | coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻³ |
| $b_{j,5}$ | coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻⁴ |
| c | velocidade da luz, m/s |
| C_{η} | seção transversal de absorção em função do número de onda, cm ² /molec |
| $C_{\eta,ij}$ | seção transversal de absorção na transição i para j , cm ² /molec |
| C_1 | constante da distribuição espectral de energia de Planck, W μ m ⁴ /(m ² sr) |
| C_2 | constante da distribuição espectral de energia de Planck, μ mK |
| D | diâmetro das moléculas |
| e_b | poder emissivo do corpo negro, W/m ² |
| E_i | nível de energia do átomo ou molécula no estado i , J |
| E_j | nível de energia do átomo ou molécula no estado j , J |
| E_{η} | energia da molécula no estado inferior, cm ⁻¹ |
| e | Número de Euler |
| $e_{\eta b}$ | poder emissivo espectral do corpo negro, W/(m ² · μ m) |
| h | constante de Planck, J·s |
| $I_{j,b}$ | Intensidade de corpo negro correspondente a região j |
| I_{η} | intensidade de radiação espectral, W/(m ² · μ m·sr) |
| $I_{\eta,b}$ | intensidade de radiação espectral emitido pelo corpo negro, W/(m ² · μ m·sr) |
| $I_{\eta,e}$ | intensidade de radiação espectral emitido, W/(m ² · μ m·sr) |
| $I_{\eta,total}$ | intensidade líquida de radiação espectral W/(m ² · μ m·sr) |
| k | condutibilidade térmica |
| k_i | coeficiente de absorção para WSGG, (atm·m) ⁻¹ |
| K_{η} | coeficiente de extinção, m ⁻¹ |

| | |
|------------|---|
| L | distância entre duas placas infinitas, m |
| M | Peso molecular |
| n | coeficiente de dependência da temperatura, adimensional |
| N | número de <i>Loschmidt</i> , moléculas/cm ³ ·atm |
| NL | faixa de linhas lidas no banco de dados, cm ⁻¹ |
| NP | número de pontos usados na abscissa dos espectros, adimensional |
| P | pressão, atm |
| Y_{CO_2} | Concentração molar de CO_2 na mistura |
| Y_{H_2O} | Concentração molar de H_2O na mistura |
| P_{CO_2} | pressão parcial de CO_2 , atm |
| P_{H_2O} | pressão parcial de H_2O , atm |
| PL | produto da pressão por uma distância finita, atm·m |
| PS | produto da pressão pelo caminho, atm·m |
| P_S | pressão parcial de determinada substância, atm |
| Q | soma total de partições internas, |
| q'_R | fluxo radiante, W/m ² |
| S | caminho percorrido pela radiação em um meio participante, m |
| S_{ij} | intensidade de linha na transição de i para j , cm ² /molécula |
| T | temperatura, K |
| T_{ref} | temperatura de referência, K |
| x | parâmetro de tamanho, m |

SÍMBOLOS GREGOS

| | |
|---|---|
| α_η | absortância espectral em função do número de onda, adimensional |
| α_λ | absortância espectral em função do comprimento de onda, adimensional |
| β | ângulo em relação à normal da superfície, rad |
| γ | maior erro obtido no espaço, na comparação LBL com WSGG, % |
| δ | erro médio obtido, na comparação LBL com WSGG, % |
| γ_c | meia largura de banda, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ |
| $\gamma_{ar,i}$ | meia largura de banda causada pelo ar na linha i do banco de dados, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ |
| γ_i | meia largura de banda na linha i do banco de dados HITEMP 2010, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ |
| $\gamma_{self,i}$ | meia largura de banda causada pela própria molécula, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ |
| δ_i | diferença de energia entre o estado inicial e final de uma molécula, cm^{-1} |
| ε | emitância total, adimensional |
| ε_η | emitância espectral em função do número de onda, adimensional |
| ε_λ | emitância espectral em função do comprimento de onda, adimensional |
| η | número de onda, cm^{-1} |
| η_i | número de onda na linha i do banco de dados HITEMP 2010, cm^{-1} |
| η_{ij} | número de onda em que ocorre a transição do nível de energia i para j , cm^{-1} |
| κ_η | coeficiente de absorção por unidade de pressão, m^{-1}/atm |
| κ_{η,CO_2} | coeficiente de absorção por unidade de pressão do CO_2 , m^{-1}/atm |
| κ_{η,H_2O} | coeficiente de absorção por unidade de pressão do H_2O , m^{-1}/atm |
| κ_{η,p_s} | coeficiente de absorção por unidade de pressão, m^{-1}/atm |
| $\kappa_{\eta,\rho}$, $\kappa_{\eta,\rho}$ | coeficiente de absorção por unidade de massa específica, $\text{m}^{-1}/(\text{Kg}/\text{m}^3)$ |
| λ | comprimento de onda, μm |
| ν | frequência de energia do fóton, $1/\text{s}$ |
| ν_{ij} | frequência em que ocorre a transição do nível de energia de i para j , $1/\text{s}$ |
| ρ | massa específica, kg/m^3 |
| σ | constante de Stefan-Boltzmann, $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$ |
| σ_η | coeficiente de espalhamento, m^{-1} |
| ω | ângulo sólido, sr |

τ_η transmitância espectral, adimensional

1 INTRODUÇÃO

A transferência de calor por radiação tem grande importância em aplicações como fornalhas, câmaras de combustão, motores, turbinas a gás, entre outros exemplos. Esses equipamentos são normalmente empregados na produção de energia, seja térmica, mecânica ou elétrica. Os gases gerados e as altas temperaturas envolvidas nesses equipamentos podem emitir e absorver quantidades consideráveis de radiação térmica, fazendo das trocas radiantes o principal mecanismo de transferência de calor.

A emissão de gases-estufa, provenientes principalmente da queima de combustíveis fósseis nos equipamentos citados anteriormente, é um dos maiores problemas ambientais atuais. Para encontrar mecanismos que possam ajudar no desenvolvimento de tecnologias mais limpas e eficientes, o estudo da radiação térmica em meios participantes é de importância fundamental.

A evolução contínua dos recursos computacionais e a possibilidade de determinação apurada do comportamento espectral de gases participantes podem ajudar a engenharia a direcionar o desenvolvimento de uma tecnologia mais limpa com a produção de equipamentos menos poluentes e mais eficientes.

1.1 Revisão bibliográfica

Como abordado anteriormente, a transferência de calor por radiação térmica em meios participantes tem papel importante em várias aplicações de engenharia. Nestas aplicações normalmente a radiação é o mecanismo dominante sobre as outras formas de transferência de calor, principalmente pelas altas temperaturas envolvidas e pela presença de gases que participam da troca radiante, como o vapor da água e o gás carbônico. Assim, uma previsão apurada das propriedades radiativas para os gases participantes se faz necessária garantindo uma maior confiabilidade nos cálculos de transferência de calor.

A modelagem da transferência de calor por radiação térmica em gases participantes impõe grandes dificuldades. Uma delas é a variação brusca e irregular do coeficiente de absorção com relação ao número de onda como pode ser observado na Figura 1.1. Isto ocorre porque quando um fóton é absorvido ou emitido por um átomo ou molécula, não ocorre a combinação de íons e elétrons, mas sim um salto quântico de energia. Por isto, os coeficientes de absorção são funções que variam abruptamente com o número de onda.

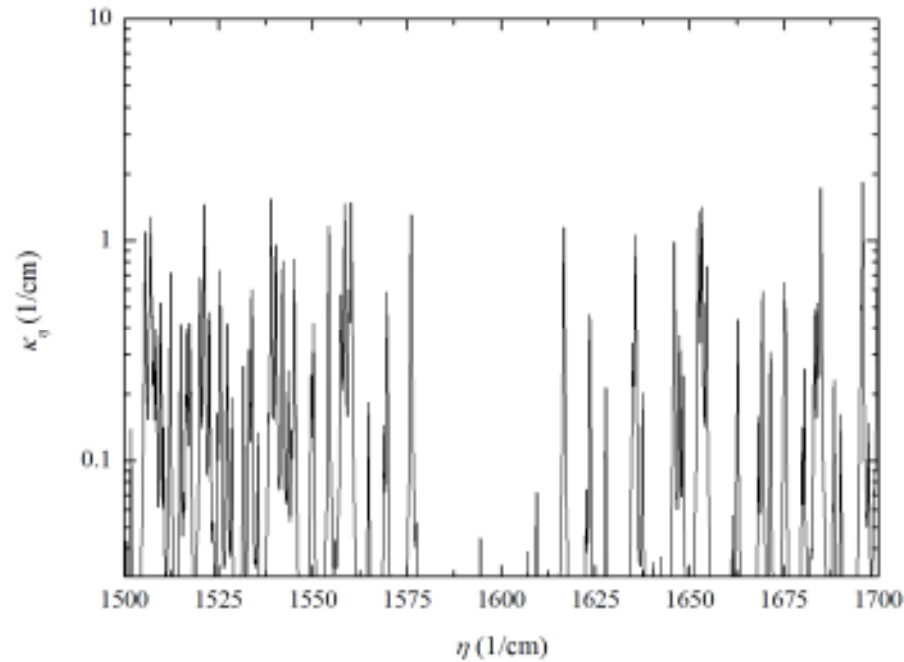


Figura 1.1 – Coeficiente de absorção de uma mistura de ar (gás inerte) com 20% em volume de vapor d'água na temperatura de 400 K e pressão de 1 atm (faixa do espectro: $1500 \text{ cm}^{-1} \leq \eta \leq 1700 \text{ cm}^{-1}$). Dados obtidos do banco de dados HITEMP [Rothman et al., 2010].

O interesse crescente em aplicações práticas onde a transferência de calor radiante em gases participantes é importante requer o desenvolvimento de modelos espectrais. O modelo mais simples é o do gás de cinza, no qual o coeficiente de absorção não depende do comprimento de onda, sendo a energia emitida dependente apenas da quarta potência da temperatura e do coeficiente de absorção do gás cinza empregado. Devido à sua simplicidade irrealista, o modelo apresenta forte desvio do comportamento real de gases em relação ao espectro de absorção de radiação. Apesar disso, o modelo continua sendo amplamente empregado na solução de problemas de combustão como nos estudos de Xue et al., 2001, Al-Omari, 2006, Desmukh et al., 2007 e Narayana e Trouvé, 2009.

A modelagem da soma ponderada de gases cinzas (WSGG), apresentada por Hottel e Sarofim, 1967, considera que o meio participante possa ser representado por uma composição de gases cinzas utilizando o método das zonas, onde todo o espectro é representado por algumas regiões com coeficiente de absorção uniforme, cada uma delas correspondendo a um gás cinza.

O WSGG não necessita de dados espectrais detalhados e por este motivo é classificado como um método global. Em geral, os coeficientes de absorção e as funções de ponderação são ajustados a partir de banco de dados tabelados, que por sua vez são obtidos a partir de modelos espectrais mais detalhados. Atualmente esse é o modelo mais conhecido e

amplamente utilizado em softwares comerciais, pela simplicidade de implementação e superioridade dos resultados em relação ao modelo do gás cinza.

Smith et al., 1982, obtiveram as funções de ponderação e os coeficientes de absorção para misturas gasosas de vapor de água, dióxido de carbono e nitrogênio. A base de dados utilizada para o ajuste das correlações foi obtida através do modelo exponencial de banda larga.

Modest, 1991, aplicou o método WSGG à equação do transporte radiante, demonstrando que o modelo pode ser aplicado com qualquer outro método de solução disponível para a equação do transporte radiante.

Galarça et al., 2008, obtiveram coeficientes para o modelo WSGG através da geração de dados de emitância com a aplicação do método Monte Carlo. As funções de distribuição ALB foram geradas a partir das versões de 2008 dos bancos de dados HITEMP e HITRAN. Os coeficientes foram utilizados em cálculos que abrangeram uma faixa de temperatura de 400 K a 2400 K, proporções de mistura P_{H_2O}/P_{CO_2} de 1,0 e 2,0 e produto da distância pela pressão parcial das espécies participantes, PL , de 0,001 atm·m a 10 atm·m.

Soluções *benchmark* do problema espectral requerem a integração linha-por-linha da equação de transferência radiante (Hartmann et al., 1983). Este método surgiu com o advento dos bancos espectrais tais como HITRAN e HITEMP, que apresentam dados detalhados sobre as linhas de emissão e absorção de radiação das moléculas. A partir desses dados, os problemas de troca radiante podem ser solucionados de forma completa e acurada por meio de cálculos que consideram cada linha do espectro de absorção. No entanto, mesmo com a melhoria dos recursos computacionais esse método requer um grande esforço computacional, inviabilizando sua aplicação em problemas práticos de engenharia, mas a obtenção de resultados em problemas unidimensionais e até mesmo bidimensionais, mesmo que muito lenta, são consideradas próximas da exata e servem como base de comparação para os demais modelos espectrais.

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais (SLW) foi desenvolvido por Denison e Webb, 1993a, diferindo do WSGG clássico pela forma como são obtidos os pesos e os coeficientes de absorção. No modelo SLW, os fatores de ponderação são obtidos diretamente do espectro molecular dos gases através da função distribuição das linhas de absorção de corpo negro (ALB). A função distribuição ALB é definida como a fração da energia de corpo negro nas regiões do espectro onde a seção transversal de absorção do gás é menor do que um valor prescrito [Denison e Webb, 1993b e 1995a]. Originalmente,

o modelo SLW foi proposto para uma única espécie química e meios não-isotérmicos [Denison e Webb, 1993a], mas, ao longo dos anos, foi estendido para resolver problemas com: meios não-homogêneos [Denison e Webb, 1995b], mistura de vapor de água e dióxido de carbono [Denison e Webb, 1995c], meios constituídos por muitos gases [Solovjov e Webb, 2000] e mistura de gases com fuligem [Solovjov e Webb, 2001].

Assim como no modelo SLW, o modelo do número de onda cumulativo (CW), desenvolvido por Solovjov e Webb, 2002, parte de uma função distribuição aplicada ao espectro molecular dos gases. No caso do modelo CW, a função distribuição cumulativa cresce linearmente com o número de onda quando a seção transversal de absorção do gás é menor do que um valor prescrito, caso contrário permanece constante. Diferentemente do modelo SLW, o CW não produz termos de Leibniz na integração espectral da equação da transferência radiante, pois, neste caso, a integração é realizada em intervalos fixos do número de onda. Galarça et al., 2011, apresentaram uma modificação do modelo CW para satisfazer ao balanço de energia radiante. Este critério, em geral, não é satisfeito pelo modelo CW original.

Maurente, 2007, realizou cálculos de transferência de calor por radiação utilizando campos de temperatura e concentrações reais de uma câmara cilíndrica. Os cálculos foram realizados através dos modelos WSGG e ALBDF (*absorption-line blackbody distribution function*). A comparação dos resultados mostraram diferenças consideráveis entre os dois modelos.

Johansson et al., 2011, propuseram correlações para o (WSGG) utilizando quatro gases cinzas onde o ajuste dos dados de emitância foram calculados pelo modelo da banda estreita utilizando o banco de dados EM2C baseado no HITRAN 1992, estando portanto desatualizado em comparação ao bancos de dados atuais. Sendo assim, as correlações obtidas provavelmente apresentam falta de precisão quando consideram estudos de combustão devido às altas temperaturas envolvidas neste processo, que facilmente alcançam temperaturas acima de 1000 K.

Kangwanpongpan et al., 2012, geraram coeficientes para o WSGG obtidos a partir do banco de dados HITRAN 2010 para cálculos de gases provindos da oxi-combustão. As correlações foram obtidas para as frações molares de vapor de água e dióxido de carbono compreendidas entre 0,125 a 4, intervalo de temperatura de 400 a 2500 K e para valores de PL compreendidos de 0,001 a 60 bar m. Os resultados do termo fonte radiativo foram comparados com os alcançados com a solução LBL. Para meios isotérmicos os autores

obtiveram erro máximo para o fluxo de calor de 10%, para meios não isotérmicos o erro foi de no máximo 15% para o fluxo de calor.

O banco de dados HITEMP 2010, apresentado em Rothman et al., 2010, tem seus dados obtidos na temperatura de 1000 K e portanto são mais adequados para o cálculo da combustão. Dorigon, 2012, utilizou esse banco de dados para obter os coeficientes do modelo WSGG a partir de cálculos da emitância total para proporções de mistura P_{H_2O}/P_{CO_2} 1,0 e 2,0, e temperaturas uniformes ao longo do caminho de integração, variando de 400 K a 2000 K. Os resultados foram obtidos e comparados com a solução LBL e apresentaram erros locais de 8% para o perfil parabólico e 18% para o cosenoidal, no entanto os erros médios não ultrapassaram 1,6%.

Centeno et. al., 2012, estudaram o efeito da radiação na combustão de uma câmara cilíndrica com difusão turbulenta de metano-ar através de duas correlações diferentes do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (WSGG): A clássica desenvolvida por Smith et al., 1982, e as novas correlações obtidas por Dorigon, 2012. Os autores constataram que a temperatura, o fluxo de calor radiante da parede e a fração radiante apresentaram diferenças consideráveis entre as duas correlações do WSGG utilizadas. O efeito sobre as concentrações das espécies foi de menor relevância. Também foi observado que os resultados numéricos considerando as novas correlações do WSGG (Dorigon, 2012) estão mais próximos dos dados experimentais [Garretón e Simonin, 1994] do que os obtidas com o caso do modelo clássico.

1.2 Objetivos

Com a atualização dos coeficientes do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (WSGG) por Dorigon, 2012, este trabalho se propõe a:

- Avaliar o comportamento dos coeficientes (WSGG) em simulações unidimensionais, onde a concentração das espécies químicas e a temperatura variam ao longo do meio.
- Realizar a simulação de uma secção da câmara cilíndrica com os campos de temperatura e concentração obtidos por Centeno et. al., 2012.
- Comparar os resultados obtidos em ambas às simulações com a integração LBL (solução *benchmark*).
- Sintetizar as diferenças entre os resultados do WSGG e LBL.

1.3 Organização do trabalho

Este trabalho é organizado nos seguintes capítulos:

- Capítulo 2: Fundamentos da radiação térmica em meios participantes. Esse capítulo apresenta uma discussão dos fundamentos de transferência de calor por energia radiante. Inicialmente é apresentado o conceito de intensidade de radiação e poder emissivo de corpo negro. Em seguida, a intensidade de radiação térmica é abordada em meios que não participam da troca radiante. Também são introduzidos os conceitos de absorção e emissão de meios participantes. Por fim, a equação de energia radiante e o conceito de emitância total são apresentados ao leitor.
- Capítulo 3: Linhas de absorção e emissão. Nesse capítulo é discutido o comportamento espectral dos gases, apresentando as principais formas de alargamento das linhas espectrais e o efeito da pressão e da temperatura nos coeficientes de absorção e emissão de gases.
- Capítulo 4: Modelagem do coeficiente de absorção dos gases. São apresentados os dois modelos utilizados neste trabalho para descrever o comportamento do coeficiente de absorção em gases que absorvem e emitem radiação. É apresentada também a fundamentação dos principais modelos utilizados atualmente.
- Capítulo 5: Resultados. Apresentam-se as soluções de problemas unidimensionais considerando meios participantes uniformes e não uniformes. Os resultados são obtidos através da aplicação do modelo WSGG e comparados com os resultados fornecidos pela solução LBL . A geometria para todos os casos corresponde a um sistema unidimensional formado por duas placas planas paralelas contendo o meio participante.
- Capítulo 6: Conclusões. Esse capítulo descreve as conclusões com base nos casos simulados e expõe as vantagens e desvantagens observadas no modelo WSGG. Sugestões de continuidade da pesquisa são propostas no final do capítulo.

2 FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO TÉRMICA EM MEIOS PARTICIPANTES

A radiação térmica pode ser entendida como o transporte de calor através de ondas eletromagnéticas. Em sistemas comuns na indústria, tais como câmaras de combustão e geradores de vapor, a transferência de calor em meios participantes tem importância fundamental. Os gases provenientes da queima do combustível como gás carbônico e o vapor da água são importantes na emissão e na absorção da energia radiante. As altas temperaturas envolvidas nestes equipamentos fazem da radiação térmica o mecanismo de transferência dominante; negligenciar a participação do meio nestes sistemas resultaria em análises incorretas. Portanto a modelagem espectral em gases participantes se faz necessária devido a altas temperaturas envolvidas e pela grande variação das propriedades radiantes observadas nos gases provenientes da combustão.

2.1 Intensidade de radiação e poder emissivo do corpo negro

O corpo negro é uma idealização do comportamento radiante de superfícies reais, na medida em que absorve toda energia radiante incidente, independentemente do comprimento de onda. Como consequência, o calor radiante emitido por um corpo negro a uma dada temperatura é máximo para cada comprimento de onda e direção, ou seja, toda a radiação térmica incidente em um corpo negro é absorvida independentemente da direção e do comprimento de onda.

O poder emissivo espectral hemisférico de um corpo negro, $e_{\eta b}(\eta, T)$ (W/m²μm), têm dependência em relação ao comprimento de onda dada pela distribuição espectral de Planck, expressa pela seguinte equação:

$$I_{\eta, b} = \frac{2C_1\eta^3}{e^{C_2\eta/T} - 1} \quad (2.1)$$

onde T (K) é a temperatura, η (cm⁻¹) é o número de onda e C_1 e C_2 são constantes que valem, respectivamente: $0,59552137 \times 10^8$ Wμm⁴/m²sr e $1,4387752 \times 10^4$ μmK.

A integração da Eq. (2.1) em todos os comprimentos de onda resulta na lei de Stefan-Boltzman como enunciada a seguir:

$$e_b = \sigma T^4 \quad (2.2)$$

onde e_b (W/m^2) é o poder emissivo total do corpo negro e σ ($5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/\text{m}^2\text{K}^4$) é a constante de Stefan-Boltzmann [Siegel e Howell, 2002].

2.2 Intensidade da radiação térmica em meios não-participantes

De acordo com as definições expostas acima, a intensidade de radiação emitida por um corpo negro não depende da direção. A comparação da intensidade direcional emitida por superfícies reais com relação a do corpo negro é extremamente útil, como poderá se observado mais adiante neste trabalho.

Considere a Figura 2.1, onde a energia radiante espectral d^3q_r está saindo de uma superfície dA e percorrendo um meio que não absorve, não emite e não espalha energia radiante dentro de um ângulo sólido $d\omega$. A intensidade de radiação I_η é a energia radiante incidente nesta área por unidade de tempo, ângulo sólido e área projetada na direção normal a I_η conforme abaixo:

$$I_\eta = \frac{d^3q_R}{dA \cos \beta d\omega d\eta} \quad (2.3)$$

onde I_η é dado em $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \mu\text{m} \cdot \text{sr})$.

Uma consequência importante da definição de intensidade é que ela se mantém constante quando não há atenuação ou emissão no meio.

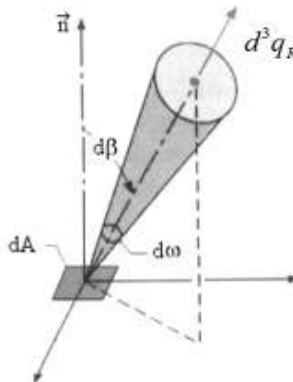


Figura 2.1 – Geometria para definição da intensidade de radiação em meio participante.

2.3 Intensidade da radiação térmica em meios-participantes

Ao contrário do que foi visto no item anterior, para meios participantes, a intensidade de radiação varia ao longo do trajeto, ou seja, o meio, além de transmitir, também absorve, emite e em alguns casos espalha o calor radiante.

2.3.1 Atenuação da intensidade devido a absorção e o espalhamento do meio participante

Considere um feixe radiante incidindo perpendicularmente a um volume infinitesimal, com comprimento dS , que absorve e espalha energia radiante como mostra a Figura 2.2.

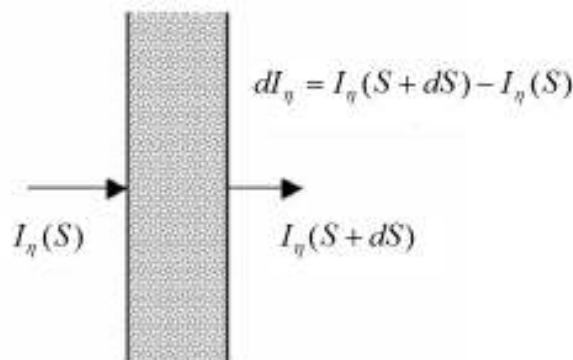


Figura 2.2 – Absorção da radiação por um elemento infinitesimal de meio participante.

Quando o feixe de radiação atravessa o meio participante, este atenua a radiação, diminuindo sua intensidade. Dessa forma, a radiação reduz-se ao longo do caminho conforme a equação abaixo:

$$dI_\eta = -K_\eta(S)I_\eta dS \quad (2.4)$$

onde K_η é definido como coeficiente de extinção espectral, sendo composto por dois mecanismos, o de absorção e o de espalhamento da energia radiante, que são funções da temperatura, pressão, concentração do meio e do número de onda da radiação incidente. Logo,

para um meio não uniforme, eles tornam-se dependentes da posição, conforme expresso na relação funcional abaixo:

$$K_{\eta}(\eta, T, P) = \kappa_{\eta}(\eta, T, P) + \sigma_{\eta}(\eta, T, P) \quad (2.5)$$

Os gases provenientes da queima do metano são uma mistura de H₂O, CO₂ e N₂ que apenas absorvem e emitem radiação térmica, sendo o espalhamento mais comum em combustíveis com presença de particulados, o que não é o caso deste estudo. Dessa forma é possível dizer que $K_{\eta} = \kappa_{\eta}$, de forma que a Eq. (2.5) pode ser reescrita como segue:

$$dI_{\eta} = -\kappa_{\eta}(S)I_{\eta}dS \quad (2.6)$$

Conforme discutido em Siegel e Howeel, 2002, e Modest, 1993, o coeficiente de absorção pode ser decomposto em um coeficiente relativamente independente da pressão parcial, $\kappa_{\eta,p}$, conforme a relação abaixo:

$$\kappa_{\eta,p_s} = \frac{\kappa_{\eta}}{P_s} \quad (2.7)$$

onde P_s é a pressão parcial do meio participante em questão, em atm, e $\kappa_{\eta,p}$ é o coeficiente de absorção por unidade de pressão, em $m^{-1} \cdot atm^{-1}$.

No entanto, o coeficiente de absorção também têm forte dependência da massa específica do meio sendo que quanto maior a massa específica, maior a atenuação da radiação devido à absorção. Conforme apresentado por Siegel e Howell, 2002, e Modest, 1993 o coeficiente de absorção pode ser reescrito como segue:

$$\kappa_{\eta,\rho} = \frac{\kappa_{\eta}}{\rho_x} \quad (2.8)$$

sendo ρ_x a massa específica das espécies participantes e $\kappa_{\eta,\rho}$ é o coeficiente de absorção por unidade de massa específica. Deve-se tomar cuidado ao representar o coeficiente de absorção

dessa forma, pois apesar de aparentemente tornar-se independente da massa específica, essa ainda influencia na largura de cada banda no espectro. No entanto, prefere-se representar esse coeficiente desta maneira, pois a partir de um mesmo $\kappa_{\eta,\rho}$ pode-se calcular o coeficiente de absorção para diferentes massas específicas. Nesta dissertação, não será levado em conta este coeficiente, sendo utilizado o coeficiente de absorção, κ_{η} , e o coeficiente de absorção baseado na pressão, $\kappa_{\eta,p}$.

Como discutido anteriormente, para um meio não uniforme, o coeficiente de extinção espectral é função da posição. Para determinar a quantidade de radiação que chega a um determinado ponto do espaço, deve-se integrar a Eq. (2.6) ao longo do caminho, conforme apresentado abaixo:

$$\int_{I_{\eta}(0)}^{I_{\eta}(S)} \frac{dI_{\eta}}{I_{\eta}} = - \int_0^S \kappa_{\eta}(S) dS \quad (2.9)$$

Como resultado desta integração, obtém-se a intensidade $I_{\eta}(S)$ dada conforme a equação abaixo:

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0) \exp \left[- \int_0^S \kappa_{\eta}(S) dS \right] \quad (2.10)$$

onde $I_{\eta}(0)$ é a intensidade de radiação na origem do caminho, $I_{\eta}(S)$ a intensidade de radiação no final da trajetória e o termo $-\int_0^S \kappa_{\eta}(S) dS$ é conhecido como espessura óptica ou opacidade.

A lei de Bourger [Siegel e Howell, 2002] diz que a radiação é atenuada exponencialmente ao longo de um caminho. Uma vez que o coeficiente de absorção depende da temperatura, pressão e composição do meio, a espessura óptica também terá a mesma dependência, quanto maior a espessura ótica, maior será a atenuação da radiação.

Nos casos onde o coeficiente de absorção κ_{η} é considerado constante ao longo da trajetória, como em meios onde a temperatura e a concentração não variam, a espessura ótica é expressa como mostra a equação abaixo:

$$-\int_0^S \kappa_\eta(S) dS = -\kappa_\eta S \quad (2.11)$$

Com esta consideração, a Eq. (2.12) pode ser reescrita como segue:

$$I_\eta(S) = -I_\eta(0) \exp(-\kappa_\eta S) \quad (2.12)$$

2.3.2 Aumento da intensidade devido a emissão do meio participante.

Como visto anteriormente, na medida em que um feixe atravessa um meio participante, a energia é absorvida ao longo do caminho e sua intensidade, atenuada. Contudo, simultaneamente, enquanto que a energia do feixe é diminuída pela atenuação, ela também aumenta devido ao fenômeno de emissão deste mesmo meio.

A partir de considerações de 1ª e 2ª leis da Termodinâmica, é possível demonstrar que o coeficiente de emissão possui o mesmo valor do coeficiente de absorção. Assim, a intensidade de radiação emitida por um meio participante pode ser escrita conforme a equação abaixo:

$$dI_{\eta,e} = \kappa_\eta(S) I_{\eta,b}(\eta) dS \quad (2.13)$$

Como mostrado para um meio que atenua a intensidade de radiação, similarmente tem-se a intensidade de radiação para um meio que emite da seguinte forma:

$$I_\eta(S) = I_{\eta,b}(\eta) [1 - \exp(-\kappa_\eta S)] \quad (2.14)$$

A equação completa da intensidade espectral de radiação é obtida pela soma da parcela da intensidade absorvida e da parcela de intensidade emitida pelo meio.

$$I_\eta(\eta, S) = I_\eta(\eta, 0) \exp(-\kappa_\eta S) + I_{\eta,b}(\eta) [1 - \exp(-\kappa_\eta S)] \quad (2.15)$$

onde $\exp(-\kappa_\eta S)$ é a transmitância espectral responsável pela energia transmitida de $I_\eta(\eta, 0)$ e que será representado pelo símbolo τ_η . O termo $[1 - \exp(-\kappa_\eta S)]$ é conhecido como absorptância espectral (ou emitância espectral, de acordo com a Lei de Kirchhoff), responsável pela energia absorvida pelo meio e será representado pelo símbolo α_η . Assim a Eq.(2.15) pode ser reescrita da forma como segue:

$$I_\eta(\eta, S) = I_\eta(\eta, 0)\tau_\eta(\eta, S) + I_{\eta,b}(\eta)\alpha_\eta(\eta, S) \quad (2.16)$$

2.4 A equação do transporte radiante

A partir das Eqs. (2.4) e (2.13) é possível concluir que a variação na intensidade da radiação que atravessa um meio participante com espessura dS é obtida através da seguinte equação:

$$I_{\eta,total}(\eta, S) = I_{\eta,b}(\eta)\kappa_\eta(S)dS - I_\eta(\eta)\kappa_\eta(S)dS \quad (2.17)$$

Esta equação pode ser representada de forma simplificada da seguinte forma:

$$\frac{dI_\eta}{dS} = \kappa_\eta(I_{\eta,b} - I_\eta) \quad (2.18)$$

A Eq. (2.18) é conhecida como *equação da transferência radiante (RTE – Radiative Transfer Equation)* para meios que absorvem e emitem, mas não espalham a radiação.

2.5 A emitância total

A comparação entre a capacidade de emissão de um meio participante com a do corpo negro é conhecida como emitância total ε , ou seja, a intensidade de radiação emitida em todo o espectro por um meio participante comparada com o poder emissivo total do corpo negro conforme apresentado por Singel e Howell, 2002.

Para emitância espectral ε_η têm-se a mesma comparação, porém considera-se para cada número de onda que compõe o seu espectro, tendo assim uma dependência no espectro na radiação emitida.

A emitância total é obtida pela seguinte relação:

$$\varepsilon(S) = \pi^0 \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b}(\eta) \varepsilon_\eta(\eta, S) d\eta}{\int_0^\infty I_{\eta,b}(\eta) d\eta} \quad (2.19)$$

Fazendo-se valer a Lei de Kirchoff, onde $\varepsilon_\eta = \alpha_\eta$, substituindo a absortância espectral por $[1 - \exp(-\kappa_{\eta,P}S)]$ e $\kappa_{\eta,P}$ por $\kappa_\eta \cdot P$, obtém-se: $\varepsilon_\eta = \alpha_\eta = [1 - \exp(-\kappa_{\eta,P}S)]$
 $\kappa_{\eta,P} = P \kappa_\eta$

$$\varepsilon(S) = \pi^0 \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b}(\eta) [1 - \exp(-\kappa_\eta PS)] d\eta}{\sigma T^4} \quad (2.20)$$

onde PS é o produto da pressão parcial das espécies participantes pelo comprimento percorrido pela radiação ao longo de uma determinada trajetória retilínea, em atm·m.

3 LINHAS ESPECTRAIS DE ABSORÇÃO-EMISSÃO

O comportamento espectral dos gases é, em geral, muito mais complexo do que aquele apresentado por sólidos opacos. Em um sólido opaco as variações de propriedades são suaves com relação ao número de onda, como pode ser observado na Figura 3.1.

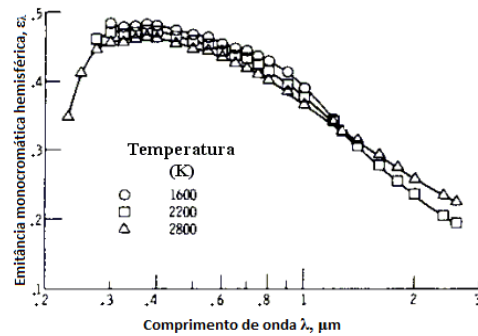


Figura 3.1 – Variação da emissividade espectral do tungstênio (adaptado de Siegel e Howell, 2002).

Para os gases, as variações das propriedades são mais abruptas com relação ao número de onda, como na Figura 3.2.

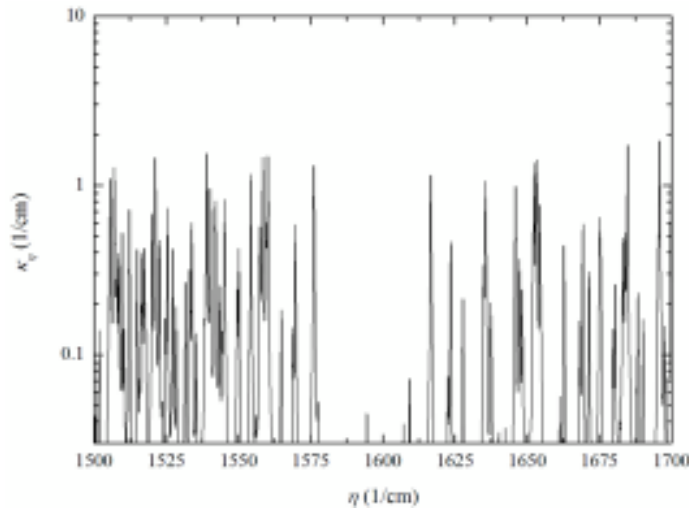


Figura 3.2 – Variação do coeficiente de absorção de uma mistura de ar com 20% em volume de vapor d'água na temperatura de 400 K e pressão de 1 atm (faixa do espectro: $1500 \text{ cm}^{-1} \leq \nu \leq 1700 \text{ cm}^{-1}$). Dados obtidos do banco de dados HITEMP [Rothman et al., 2010].

O gás é composto de moléculas, átomos, íons e elétrons que podem assumir diferentes níveis de energia. Na molécula, por exemplo, os átomos formam um sistema dinâmico com

modos de vibração, translação e rotação que assumem níveis específicos de energia ilustrados na Figura 3.3.

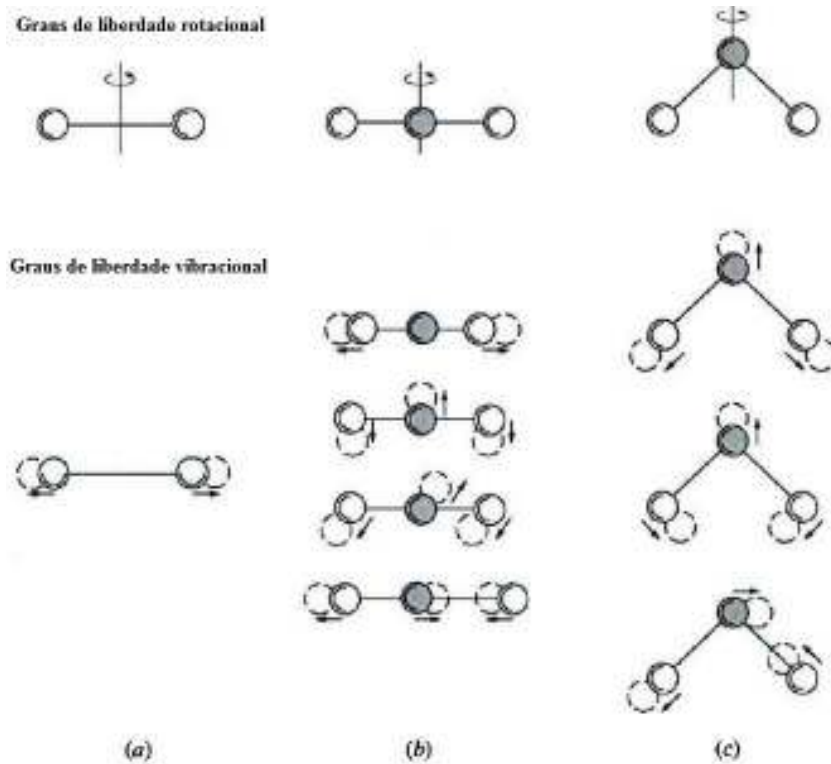


Figura 3.3 – Modos de vibração rotação e translação assumida pelos átomos (a) diatômicos (b) triatômicos lineares e (c) triatômicos não lineares [Modest, 1993].

Os estados de rotação e vibração estão sempre acoplados, eles se situam na região do infravermelho e por isto são os mais importantes para cálculos de troca térmica nas temperaturas comumente encontradas em problemas de engenharia. Para cada modo de vibração, existem vários modos de rotação.

As transições entre níveis de rotação no mesmo estado de vibração envolvem pouca energia, o que significa que baixas frequências de radiação são necessárias para ocasionar a mudança de estado, sendo importantes nas faixas abaixo do infravermelho.

Para transições de níveis de rotação em diferentes níveis de vibração deve haver uma maior quantidade de energia envolvida, o que remete a maiores frequências de radiação próximas ao infravermelho. Para transição vibracional-rotacional de um determinado nível eletrônico para outro, quantidades de energia envolvidas são ainda maiores, e conseqüentemente frequências de radiação também devem ser maiores, envolvendo regiões visíveis do espectro e ultravioleta [Siegel e Howell, 2002].

O fóton é a unidade básica de energia radiante, sendo liberado quando há emissão de energia. Isto faz com que a molécula tenha seu nível de energia diminuído. Da mesma forma, quando ocorre a captura de um fóton um aumento no nível de energia da molécula é observado.

A magnitude com que ocorre a transição de energia está relacionada à frequência com que ocorre a emissão ou a absorção. A energia de um fóton é dada por $h\nu$, na qual h é a constante de Planck e ν é a frequência da energia do fóton. Como a mudança de estado de energia de um átomo ou molécula envolve níveis discretos, tem-se que a energia é dada por:

$$E_i - E_f = h\nu_{if} \quad (3.1)$$

na qual E_i e E_f são os níveis de energia que o átomo ou molécula podem adquirir e ν_{if} é a frequência em que ocorre a passagem do nível de energia de i para j . Nas condições normalmente encontradas em problemas de engenharia os níveis de energia são fixos entre as transições. Assim, somente frequências específicas de radiação estarão associadas ao aumento ou redução da energia de uma dada molécula ou átomo, sendo assim haverá emissão ou absorção da radiação apenas em números de onda específicos. A consequência disto é um espectro de absorção de radiação com centenas de milhares de linhas, com uma espessura infinitesimal, mas que, no entanto possuem uma espessura finita que é ocasionada pelo fenômeno conhecido como alargamento da banda.

3.1 Alargamento das linhas espectrais

Uma molécula pode ocupar apenas níveis de energia pré-determinados, sendo assim, pode apenas absorver e emitir fótons com níveis específicos de energia, os quais a farão saltar de um estado quântico para outro. As moléculas constituintes de um determinado gás podem emitir e absorver somente em regiões espectrais específicas, conhecidas como linhas espectrais. No entanto fenômenos conhecidos como alargamento de linha fazem com que a absorção e a emissão ocorram em regiões contínuas.

O alargamento natural normalmente é negligenciado em aplicações de engenharia, pois tem pouca influência quando comparado aos outros mecanismos de alargamento.

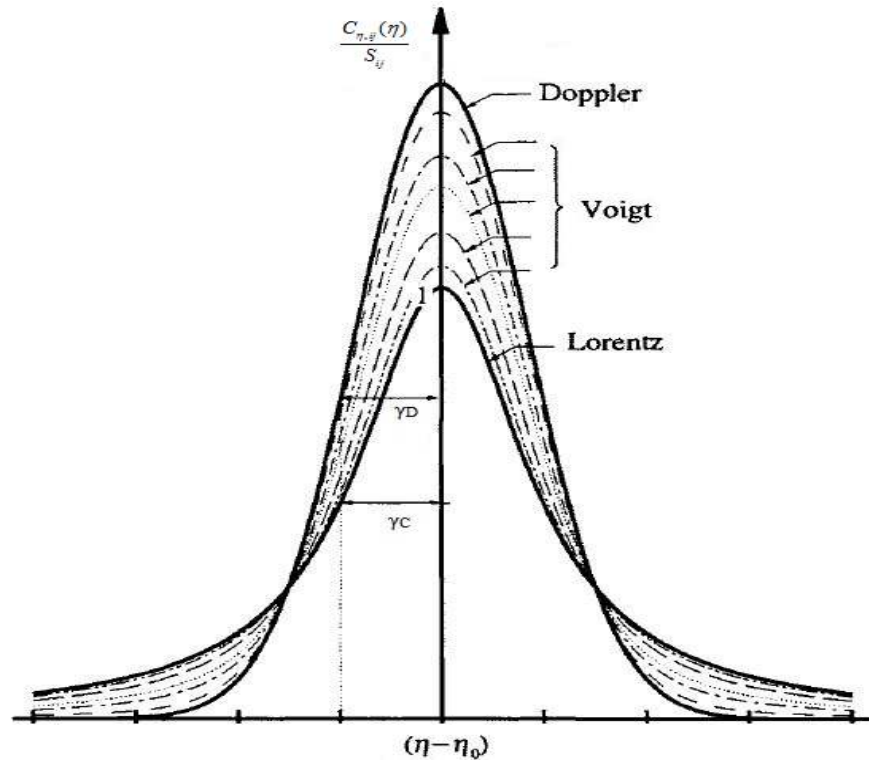


Figura 3.4 – Formas de linha para diversos tipos de alargamento [Modest, 1993].

O fenômeno de alargamento por colisões é o mais importante quando se considera a combustão. As colisões entre moléculas perturbam seus estados de energia, o que provoca o alargamento das linhas espectrais. Quando a pressão na câmara de combustão aumenta a taxa de colisões entre moléculas também aumenta e é por este motivo que o coeficiente de extinção de um gás tem forte dependência com a pressão. A temperatura também provoca uma variação no nível de energia das moléculas o que altera a taxa de colisões entre elas.

Quando a concentração de espécies varia, ela modifica o tipo de moléculas e também o modo como elas emitem e absorvem, pois, por exemplo, o alargamento provocado pela colisão entre duas moléculas de água é diferente do provocado pela colisão entre uma molécula de água e uma de gás carbônico.

O alargamento por colisão pode ser calculado pela seguinte expressão, baseada no perfil de Lorentz:

$$\frac{C_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_c/\pi}{\gamma_c^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.2)$$

onde γ_c é a meia largura, determinada pela taxa de colisão entre moléculas, pode ser aproximado pela seguinte equação:

$$\gamma_c = \frac{1}{2\pi c} \frac{4\sqrt{\pi} D^2 P}{(MkT)^{1/2}} \quad (3.3)$$

em que D é o diâmetro das moléculas, P a pressão do gás, c é a velocidade da luz e M é a peso molecular. Pela observação da Eq. (3.3) fica claro que o alargamento por colisão se eleva com a pressão, mas reduz-se com a temperatura.

Existem também outros mecanismos de alargamento, como o alargamento Stark, que tem influência na presença de fortes campos elétricos, e o alargamento Doppler, que ganha importância em temperaturas muito elevadas. No entanto, segundo Siegel e Howell, 2002, o alargamento por colisão é dominante na região do infravermelho, de forma que os outros mecanismos de alargamento podem ser negligenciados.

3.2 Tratamento dos parâmetros fornecidos pelo banco de dados espectral

O banco de dados HITEMP, junto com o banco de dados HITRAN, apresenta diversos parâmetros relativos às moléculas. A partir desses parâmetros, é possível gerar os espectros de absorção de um meio participante.

Os dados contidos no banco HITEMP foram obtidos a temperatura de 1000K, sendo o uso deste apropriado para cálculos que envolvam combustão, principalmente pelas altas temperaturas que são envolvidas neste processo.

O HITEMP utiliza arquivos em formato ASCII, sendo sua extensão “.par”. A versão atual possui arquivos com tamanho de 17,2 Gigabytes para o H₂O e 1,68 Gigabytes para o CO₂ contendo aproximadamente 14 vezes mais informação que em sua versão anterior. Esse aumento dos arquivos apesar de apresentar dados mais precisos, acarreta em um maior tempo de processamento. Na

Tabela 3.1 verifica-se o significado de cada parâmetro contido no banco de dados.

Tabela 3.1– Nomenclatura utilizada no banco de dados HITEMP [Mossi, 2011].

| Parâmetro | Descrição |
|------------------------|--|
| Mol | Número da molécula. |
| Iso | Número do isótopo. |
| η | Número de onda no vácuo, em cm^{-1} . |
| S | Intensidade, em $\text{cm}^{-1}/(\text{molec} \times \text{cm}^{-2})$. |
| A | Coefficiente de Einstein, s^{-1} . |
| γ_{ar} | Alargamento da meia largura pelo ar, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$. |
| γ_{self} | Alargamento da meia largura, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$. |
| E'' | Energia do estado mais baixo, cm^{-1} . |
| n | Coefficiente de dependência da temperatura. |
| δ | Deslocamento da linha por pressão do ar, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$. |
| v' | Índice quântico global do estado superior. |
| v'' | Índice quântico global do estado inferior. |
| Q' | Números quânticos do estado superior. |
| Q'' | Números quânticos do estado inferior. |
| i_{err} | Índices de precisão para frequência, intensidade e alargamento pelo ar. |
| i_{ref} | Índices para tabelas de referência correspondentes à frequência, intensidade e meia largura. |
| * | Marcação para as linhas calculadas com um algoritmo de acoplamento. |
| g' | Peso estatístico do estado superior. |
| g'' | Peso estatístico do estado inferior. |

3.2.1 Geração das linhas espectrais a partir do banco de dados HITEMP 2010 espectro

Para gerar o espectro de secção transversal de absorção, para determinado número de onda, somam-se todos os $C_{\eta,ij}(\eta)$ de todas as transições importantes S_{ij} do banco de dados HITEMP 2010. Desta forma a equação para construção do espectro de absorção dos gases, considerando o alargamento por colisão fica:

$$C_{\eta}(\eta) = \sum_{\eta-NC}^{\eta+NC} \frac{S_i(T)}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (3.4)$$

onde C_{η} é a seção transversal de absorção e S_i é a intensidade da linha para cada linha do banco de dados em um determinado número de onda, η_i , NC é a faixa de dados em torno de η que é lida no banco de dados para o cálculo de C_{η} e γ_i é a meia largura para cada transição.

Denison e Webb, 1993a, verificaram que as linhas na qual a contribuição para C_{η} são significantes estão na vizinhança de η até 25 cm^{-1} em cada lado. A meia largura γ_i é calculada conforme equação abaixo:

$$\gamma_i = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n P_s \gamma_{self} + (1 - P_s) \gamma_{ar} \quad (3.5)$$

onde n é o coeficiente de dependência da temperatura, γ_{self} e γ_{ar} são as meias larguras devido ao alargamento da molécula em questão e do alargamento causado pelo ar respectivamente, P_s é a pressão parcial do meio participante e T_{ref} é a temperatura de referência em que está compilado o banco de dados. Os valores de S , γ_{ar} , γ_{self} e n são obtidos diretamente dos bancos de dados espectrais, como HITRAN (*high-resolution transmission moléculas absorption database*), HITEMP (*high temperature molecular spectroscopic database*) e CDS (Carbon dioxide spectroscopic database).

Para estudos envolvendo a combustão, recomenda-se empregar o banco de dados HITEMP, que é análogo ao banco de dados HITRAN, porém com dados obtidos em temperaturas compreendidas entre 1000 K a 1500 K, que são mais representativas de processos a combustão.

3.3 Correção da intensidade de linha devido à temperatura

Para que o banco de dados fique na temperatura de referência de 296 K como outros banco de dados a intensidade de linha S_i é convertida pela seguinte equação:

$$S_i(T) = S_i(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref}) \exp(-C_2 E_\eta / T) [1 - \exp(-C_2 \delta_i / T)]}{Q(T) \exp(-C_2 E_\eta / T_{ref}) [1 - \exp(-C_2 \delta_i / T_{ref})]} \quad (3.6)$$

onde E_η é a energia da molécula no estado inferior (cm^{-1}) e δ_i é a diferença de energia entre o estado inicial e final como definido por Rothman et al. 2010. $Q(T)$ é a soma total de partições internas e contemplando a soma de todos os estados de energia como vibracional, rotacional, torsional e elétrico e pode ser obtida através da rotina de uma rotina computacional em Fortran, disponibilizada por Gamache et al., 1990, pelo endereço eletrônico de internet http://faculty.uml.edu/robert_gamache.

Caso seja necessário os valores de Q a uma temperatura distinta daquelas obtidas por Gamache, pode-se aplicar uma interpolação lagrangiana de quarta ordem nos valores obtidos pelo autor. A limitação das rotinas disponibilizadas está na restrição de que os valores de temperatura estejam compreendidos na faixa de 70 a 3000K, portanto estes valores satisfazem os processos usuais de combustão.

3.4 Coeficiente de absorção espectral.

Os valores de seção transversal de absorção devem apresentar um estudo de independência com relação aos números de pontos para que possam representar com precisão os diversos picos de absorção mais importantes de uma substância.

A Fig. 3.4 apresenta os espectros da seção transversal de absorção para as moléculas de CO_2 e H_2O obtidos por Dorigon, 2012, calculados para uma temperatura de 1000 K e para pressão parcial de 0,1 atm.

Com os valores da seção transversal de absorção, é possível obter o coeficiente de absorção por unidade de pressão como segue:

$$\kappa_\eta = N C_\eta \quad (3.7)$$

em que N é o número de *Loschmidt*, correspondendo ao número de moléculas por unidade de volume. Esse número apresenta uma dependência com a temperatura conforme a equação abaixo (Killinger e Plutov, 2009):

$$N = 2,479 \times 10^9 \left(\frac{296}{T} \right) \quad (3.8)$$

Desta forma é possível obter o coeficiente de absorção por meio da Eq. (2.7) representada abaixo.

$$\kappa_{\eta} = P_s \kappa_{\eta, P_s} \quad (2.7)$$

O coeficiente de absorção é obtido separadamente para cada gás participante do meio. Para quantificar o efeito de mais um gás em uma determinada mistura, como no caso de CO₂ e H₂O, o coeficiente de absorção da mistura, $\kappa_{\eta, m}$, é obtido pela soma dos coeficientes de absorção individuais como expresso pela equação seguinte:

$$\kappa_{\eta, m} = P_{\text{CO}_2} \kappa_{\eta, P_{\text{CO}_2}} + P_{\text{H}_2\text{O}} \kappa_{\eta, P_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (3.9)$$

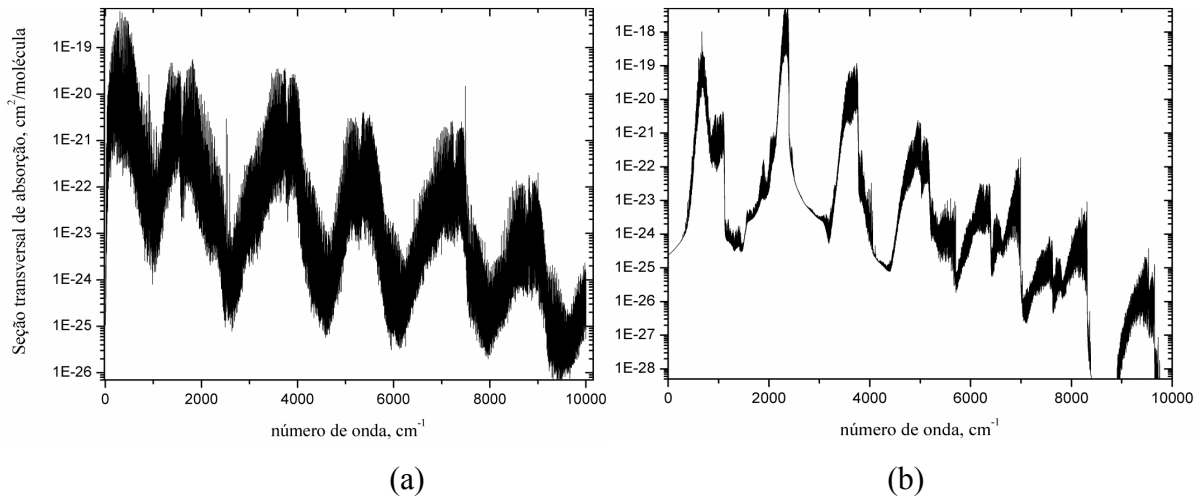


Figura 3.5 – Espectro de seção transversal de absorção (a) para H₂O; (b) para CO₂ (Dorigon, 2012).

3.5 O efeito da pressão e da temperatura sobre o coeficiente de absorção

Os efeitos da pressão e da temperatura têm influência direta no coeficiente de absorção espectral e conseqüentemente alteram os valores de emitância total do gás participante. Dois fenômenos são observados quando há mudança na pressão parcial: o aumento do número de moléculas no caminho a ser percorrido pela radiação e o alargamento da banda causado pelo aumento das colisões. Este último provoca uma mudança na meia largura γ e, como C_η depende do alargamento, o espectro da seção transversal é modificado.

A influência da pressão sobre o coeficiente de absorção pode ser quantificada pela seguinte relação:

$$\kappa_\eta = PNC_\eta \quad (3.10)$$

Dorigon, 2012, avaliou separadamente a emitância total para os gases CO_2 e H_2O em diversas pressões parciais, porém mantendo constante o valor de PL . Para que esta proporção fosse mantida quando se aumenta o valor de P , deve-se reduzir o valor da distância L para possibilitar a comparação dos resultados para um mesmo produto PL .

Desta forma foram gerados os gráficos para emitância total de CO_2 e H_2O utilizando diferentes pressões parciais como apresentado pela Figura 3.5. O CO_2 apresentou uma fraca dependência da emitância total com relação a P_{CO_2} quando se mantém a relação de PL .

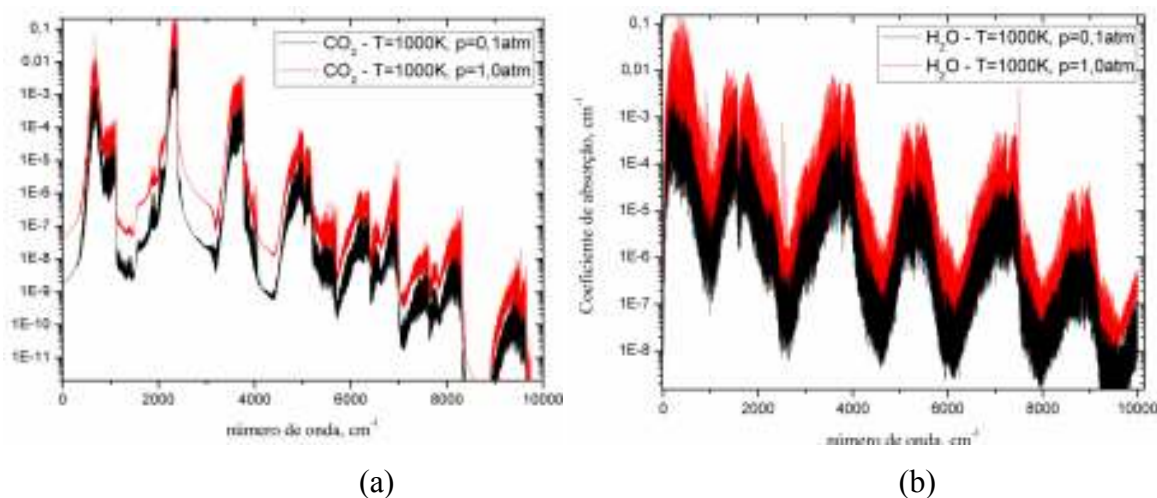


Figura 3.6– Espectro do coeficiente de absorção na pressão parcial de 0,1 atm e 1,0 atm, (a) para o CO_2 ; (b) para o H_2O (Dorigon, 2012).

Por outro lado, para o H₂O, constata-se uma dependência maior da emitância total em relação à pressão parcial para um valor fixo de PL .

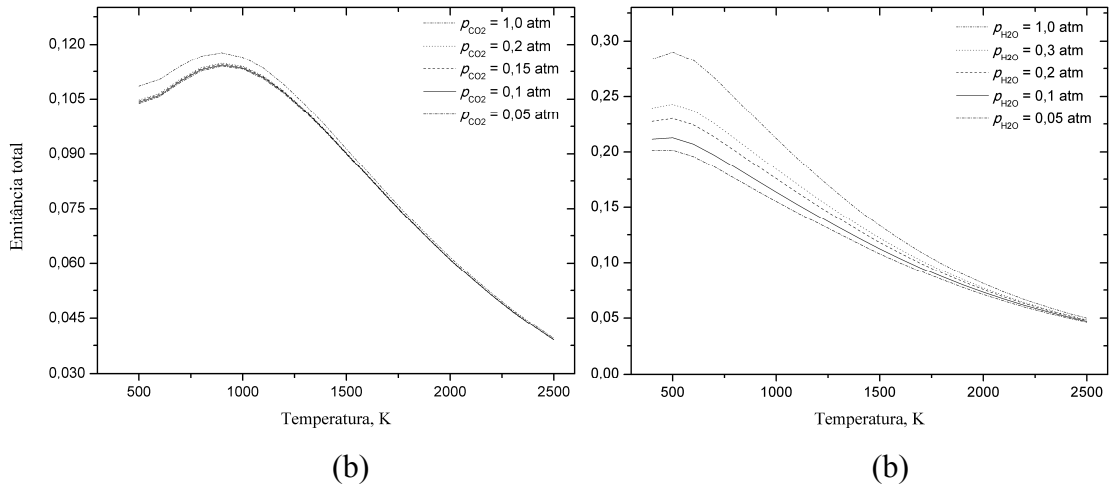


Figura 3.7– Valores de emitância total calculadas para $PL = 0,1 \text{ atm} \cdot \text{m}$ e diferentes pressões parciais, (a) para o CO₂; (b) para o H₂O (Dorigon, 2012)

Dorigon, 2012, também realizou um estudo para mistura de H₂O e CO₂ onde foi avaliada a influência das pressões parciais sobre o valor da emitância total, mantendo-se constante as proporções de P_{H_2O}/P_{CO_2} igual a 1 e 2 conforme apresentado na Figura 3.6.

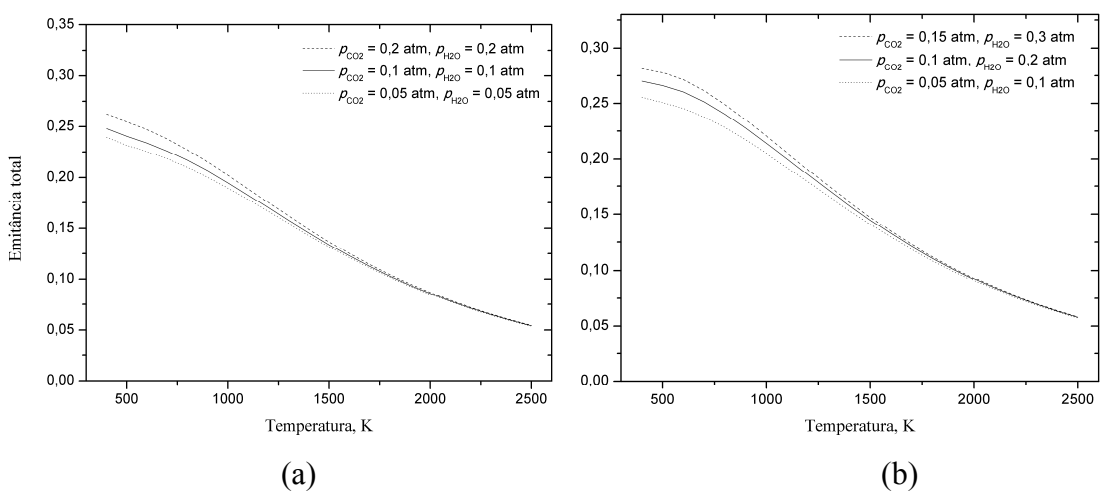


Figura 3.8 – Valores de emitância total para mistura de H₂O e CO₂, para $PL = 0,1 \text{ atm} \cdot \text{m}$ (a) para proporções de P_{H_2O}/P_{CO_2} igual 1 ; (b) para proporções de P_{H_2O}/P_{CO_2} igual 2 . (Dorigon, 2012)

Devido à influência do vapor d'água sobre a mistura verifica-se a dependência em relação à pressão parcial em ambas as proporções de P_{H_2O}/P_{CO_2} .

O espectro de absorção também depende da temperatura do meio participante, como pode ser observado pelas Eqs. (3.7) e (3.8). Dessa forma, ao utilizar temperaturas diferentes daquelas em que foi compilado o banco de dados, deve-se realizar uma correção da intensidade de linha. Maiores dados sobre esta correção podem ser encontrados no trabalho de Dorigon, 2012.

4 MODELAGEM DO COEFICIENTE DE ABSORÇÃO DOS GASES

Como discutido no Capítulo 1, existem diversos modelos para avaliação das propriedades de gases participantes que foram desenvolvidos de modo a levarem em consideração a estrutura espectral da radiação em substâncias gasosas. Neste capítulo, aborda-se inicialmente a integração linha por linha da equação da transferência radiante (RTE), que não envolve nenhuma simplificação do espectro, e que por isto pode ser considerada uma solução *benchmark*, a não ser por aproximações menores na solução numérica da RTE. Em seguida, apresenta-se o modelo soma-ponderada-de-gases-cinzas (WSGG), foco principal deste trabalho e empregado em todas as simulações, além dos modelos SLW (WSGG baseado nas linhas espectrais) e CW (número de onda acumulado). Embora os dois últimos modelos não sejam aplicados aos problemas considerados nesta dissertação, suas apresentações permitem uma melhor apreciação da simplicidade e economia computacional do WSGG.

4.1 Integração linha por linha (LBL)

A integração linha por linha resolve a equação do transporte radiante considerando toda a variação espectral do coeficiente de absorção para diferentes temperaturas e concentrações encontradas nas misturas dos gases resultantes da combustão. Dessa forma, a equação a ser resolvida para cada direção S , considerando um meio que absorve e emite, tem a seguinte forma:

$$\frac{dI_\eta}{dS} = \kappa_\eta I_{\eta,b} - \kappa_\eta I_\eta \quad (4.1)$$

onde κ_η é o coeficiente de absorção do gás, que tem dependência do número de onda e do estado termodinâmico do gás, e $I_{\eta,b}$ é a emissão do corpo negro e pode ser obtido pela Eq. (2.1) que é rerepresentada logo abaixo:

$$I_{\eta,b} = \frac{2C_1\eta^3}{e^{C_2\eta/T} - 1} \quad (4.2)$$

Com a solução da equação do transporte radiante, é possível determinar o fluxo radiante pela seguinte equação:

$$\vec{q}_r = \int_0^{\infty} \vec{q}_\eta d\eta = \int_0^{\infty} \int_0^{4\pi} I_\eta(S) d\eta d\omega \quad (4.3)$$

De posse das Eq. (4.1) e (4.2), é possível obter o divergente do fluxo radiante pela seguinte equação:

$$\nabla \vec{q}_r = \int_0^{\infty} \int_0^{4\pi} (-\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{\eta,b} S) d\eta d\omega \quad (4.4)$$

O método de integração LBL não requer nenhuma simplificação do comportamento espectral, e assim pode ser considerado como solução *benchmark* para validação de modelos de gases, como o caso deste trabalho em que este método é empregado para validar os resultados obtidos pelo método WSGG.

Os dados de variação espectral que são utilizados pela integração linha por linha são obtidos diretamente do banco de dados HITEMP 2010. Portanto, uma avaliação da resolução utilizada para interpolação com relação à temperatura para coleta destes dados espectrais no banco de dados se faz necessária. A Figura 4.1 apresenta resultados obtidos do divergente do fluxo radiante utilizando diferentes interpolações de temperatura.

Pela observação da Figura 4.1, nota-se que os valores obtidos do divergente do fluxo radiante estão bem ajustados para uma interpolação de temperatura com um passo de 100 K devido a pouca variação de resultados com passos mais refinados. Embora ainda se note algumas pequenas variações entre as soluções com interpolação de 100 K e 12,5 K, essas variações não são significativas para comparação com as soluções baseadas em modelos de gases, onde os desvios tendem a ser consideravelmente maiores.

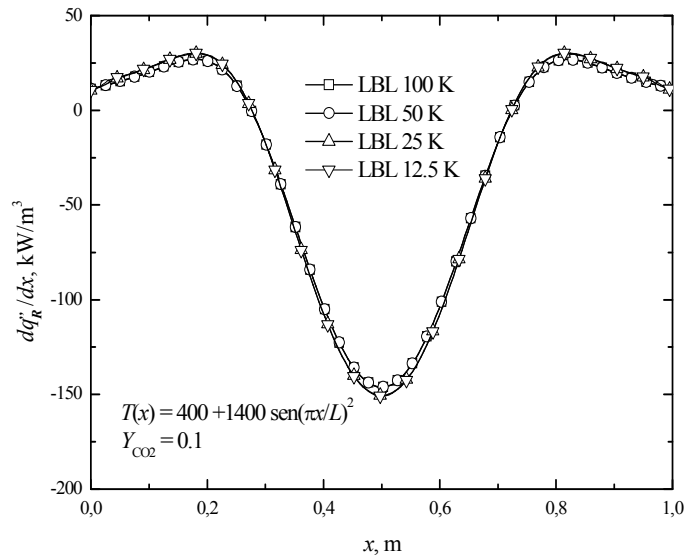


Figura 4.1– Divergentes do fluxo radiante obtidos para diferentes interpolações de temperatura

4.2 O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas

O conceito da soma-ponderada-de-gases-cinzas (WSGG) foi primeiramente introduzida por Hottel e Sarofim, 1967, em conjunto com o método das zonas para estimativa das trocas radiantes. Nesta abordagem o gás não cinza é substituído por um número de N gases cinzas a fim de simular as propriedades de gases reais. Desta forma, as razões de transferência de calor podem ser calculadas independentemente para cada gás.

Modest, 1991, integrou a equação da transferência radiante separadamente para cada um dos N gases cinzas, com o somatório de todas as intensidades parciais resultando na intensidade total.

A Figura 4.2 é uma representação de um meio participante composto por de três gases cinza com janelas transparentes. As janelas transparentes possuem coeficiente de absorção igual à zero enquanto nos locais representados por gases cinzas o coeficiente de absorção é não nulo e constante.

Da mesma forma que a solução LBL a equação do transporte pode ser descritos como segue:

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j I_j + \kappa_j I_{j,b} \quad (4.5)$$

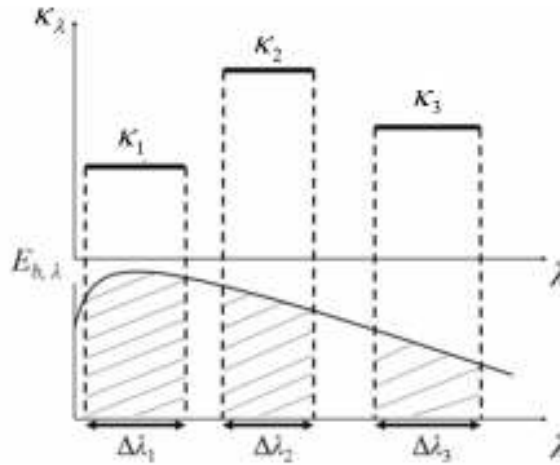


Figura 4.2 – Representação de um meio participante por meio de três gases cinzas através modelo WSGG [Galarça et al., 2008].

onde κ_j é o coeficiente de absorção e $I_{j,b}$ é o valor da intensidade do corpo negro correspondente à região κ_j e pode ser obtido pela com a seguinte equação:

$$I_{j,b} = \frac{\int_{\Delta\eta} I_b(\eta, T) d\eta}{I_b(T)} I_b(T) = a_j I_b(T) \quad (4.6)$$

onde a_j é o coeficiente de ponderação para o j -ésimo gás cinza usado no modelo e depende apenas da temperatura do gás. Fisicamente, o coeficiente de ponderação a_j é a fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza κ_j . Assim a equação do transporte radiante fica:

$$\frac{dI_j}{ds} = -\kappa_j (a_j I_b - I_j) \quad (4.7)$$

Smith et al., 1982, propôs que os coeficientes ponderação a_j fossem representados por um polinômio, da seguinte forma:

$$a_j = \sum_{i=1}^j b_{j,i} T^{i-1} \quad (4.8)$$

onde $b_{j,i}$ corresponde aos coeficientes polinomiais para N gases cinzas.

Modest, 1991, mostrou que o modelo do WSGG pode ser aplicado na equação de transferência radiante como apresentado a seguir:

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j \left[\frac{a_j \sigma T^4(S)}{\pi} - I_j(S) \right] \quad (4.9)$$

4.2.1 Os coeficientes da soma-ponderada-de-gases-cinzas

Para a obtenção dos coeficientes do modelo WSGG Dorigon, 2012, gerou espectros para 22 temperaturas compreendidas entre 400K a 2500K, para 2 diferentes pressões parciais do vapor de água ($P_{H_2O} = 0,1$ e $0,2$) e uma para o dióxido de carbono ($P_{CO_2} = 0,1$). Estes por sua vez, deram origem aos valores de emitância total através da integração em todo o espectro para os diversos produtos de comprimento pelo trajeto. A partir desses valores, Dorigon, 2012, utilizou o método de regressão múltipla não linear de Levenber-Marquardt para a obtenção dos coeficientes da função de ponderação da temperatura e coeficientes de absorção a partir de dados calculados de emitância através da Equação (2.6). Desta forma, Dorigon, 2012, obteve os valores dos coeficientes de absorção por unidade de pressão κ_j e os coeficientes polinomiais, $b_{j,i}$. A Tabela 4.1 mostra os valores dos coeficientes do modelo WSGG para a proporção parcial $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$, enquanto a Tabela 4.2 apresenta os coeficientes obtidos para a proporção de pressão parcial $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

Tabela 4.4.1 – Coeficientes utilizados no modelo WSGG para mistura de

$$P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$$

| I | κ_j (atm·m)-1 | $b_{j,1}$ | $b_{j,2}$ (K ⁻¹) | $b_{j,3}$ (K ⁻²) | $b_{j,4}$ (K ⁻³) | $b_{j,5}$ (K ⁻⁴) |
|-----|----------------------|-----------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| 1 | 0,187 | 7,197E-02 | 8,724E-04 | -9,690E-07 | 4,651E-10 | -7,917E-14 |
| 2 | 1,723 | 1,107E-01 | 3,397E-04 | -2,467E-07 | 4,647E-11 | -1,039E-15 |
| 3 | 12,484 | 2,091E-01 | -6,423E-05 | -3,200E-08 | 1,718E-11 | -2,105E-15 |
| 4 | 144,938 | 7,092E-02 | 6,586E-05 | -1,278E-07 | 5,577E-11 | -7,709E-15 |

Tabela 4.4.2 – Coeficientes utilizados no modelo WSGG para mistura de

$$P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2.$$

| I | κ_j (atm·m)-1 | $b_{j,1}$ | $b_{j,2}$ (K ⁻¹) | $b_{j,3}$ (K ⁻²) | $b_{j,4}$ (K ⁻³) | $b_{j,5}$ (K ⁻⁴) |
|-----|----------------------|-----------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| 1 | 0,192 | 5,617E-02 | 7,844E-04 | -8,563E-07 | 4,246E-10 | -7,440E-14 |
| 2 | 1,719 | 1,426E-01 | 1,795E-04 | -1,077E-08 | -6,971E-11 | 1,774E-14 |
| 3 | 11,370 | 1,362E-01 | 2,574E-04 | -3,711E-07 | 1,575E-10 | -2,267E-14 |
| 4 | 111,016 | 1,222E-01 | -2,327E-05 | -7,492E-08 | 4,275E-11 | -6,608E-15 |

4.2.2 A equação da transferência radiante em problemas unidimensionais

Como abordado anteriormente a equação da transferência radiante (RTE) unidimensional em um meio que não espalha energia radiante é dada por:

$$\frac{dI_\eta}{dx} = \kappa_\eta I_{b\eta} - \kappa_\eta I_\eta \quad (4.10)$$

Empregando o método das ordenadas discretas, a Eq. (4.5) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\mu \frac{\partial I_\eta}{\partial x} = \kappa_\eta I_{b\eta} - \kappa_\eta I_\eta \quad (4.11)$$

Onde μ representa as direções. Uma vez que as intensidades podem ser encontradas ao longo de cada direção no sentido positivo ou negativo, a Eq (4.11) deve ser dividida em duas partes, uma para a direção positiva e outra para a direção negativa como segue:

$$\mu \frac{dI^+}{dx} = \kappa_\eta I_{b\eta} - \kappa_\eta I_\eta^+ \quad (4.12)$$

$$-\mu \frac{dI^-}{dx} = \kappa_\eta I_{b\eta} - \kappa_\eta I_\eta^- \quad (4.13)$$

Supondo a transferência radiante entre duas superfícies negras com temperaturas diferentes e separadas por uma distância L , as condições de contorno dessas superfícies são dadas por:

$$I^+(x=0) = I_b(x=0) \quad (4.14)$$

$$I^-(x=L) = I_b(x=L) \quad (4.15)$$

Para a discretização dos termos de variação de intensidade de irradiação em função do caminho radiante, d/dx , nas Eq. (4.12) e Eq. (4.13) emprega-se o método de diferenças finitas, aplicando a diferença finita atrasada para a primeira e a diferença finita adiantada para a segunda. Recomenda-se não aplicar o método de diferenças finitas centrada para este caso, pois o sistema gerado por este método não apresenta diagonal dominante, o que compromete a convergência da solução. Dessa forma, aplicando as diferenças finitas atrasada e adiantada às Eq. (4.16) e Eq. (4.17), respectivamente, chegam-se às seguintes expressões:

$$I_\eta^+ = \frac{\Delta x \kappa_\eta I_{b,\eta} + \mu I_{x-1,\eta}^+}{\mu + \Delta x \kappa_\eta} \quad (4.16)$$

$$I_\eta^- = \frac{\Delta x \kappa_\eta I_{b,\eta} + \mu I_{x+1,\eta}^-}{\mu + \Delta x \kappa_\eta} \quad (4.17)$$

onde Δx é o passo da malha.

As equações referentes ao fluxo de calor e ao termo fonte radiante utilizando o método das ordenadas discretas para a solução LBL são dadas pelas equações que seguem:

$$q''_R(x) = \sum_l \left\{ \int_\eta 2\pi w_l \mu_l [I_\eta^+(x) - I_\eta^-(x)] d\eta \right\} \quad (4.18)$$

$$\dot{q}_R(x) = -\frac{dq''_R}{dx} = \sum_l \left\{ \int_\eta 2\pi \kappa_\eta w_l [I_\eta^+(x) + I_\eta^-(x)] - 4\pi \kappa w_l I_{b\eta} d\eta \right\} \quad (4.19)$$

E para o modelo WSGG fica:

$$q''_R(x) = \sum_l \left\{ \sum_j 2\pi w_l \mu_l [I_j^+ - I_j^-] \right\} \quad (4.20)$$

$$\dot{q}_R(x) = -\frac{dq_R''}{dx} = \sum_l \left\{ \sum_j 2\pi \kappa_j w_l [I_j^+ + I_j^-] - 4\pi \kappa w_l I_{bj} \right\} \quad (4.21)$$

4.3 O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais (SLW).

O modelo SLW, desenvolvido por Denison e Webb, 1993b, se assemelha com o WSGG onde os pesos e coeficientes de extinção do gás são obtidos a partir do espectro linha-por-linha através da função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (*absorption line blackbody distribution, ALB, function*).

A função distribuição ALB é definida como a fração de energia do corpo negro nas regiões onde o espectro do gás é menor do que um valor prescrito C_j . Na Figura 4.3 as regiões sombreadas representam os locais onde a função ALB é calculada.

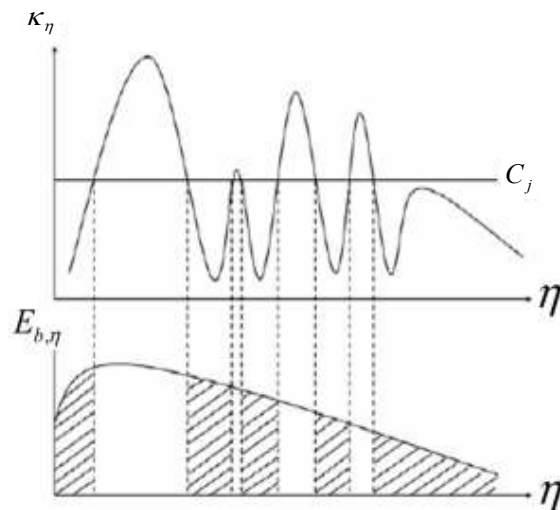


Figura 4.3 – Partes do espectro em que a função ALB é calculada.

Para o caso de uma única espécie absorvedora, a função ALB é dada pela equação a seguir:

$$F(C_j) = \frac{\pi}{\sigma T^4} \sum_i \int_{\Delta_i} I_{b\eta}(T, \eta) d\eta \quad (4.22)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzman e $I_{b\eta}$ é a função de Planck avaliada no número de onda η na temperatura da fonte T .

Observando-se a Eq. 4.21 fica evidente que a função ALB varia de zero a um, pois, quando C_j é igual ao valor máximo do coeficiente de absorção espectral molar, toda a curva κ_η está abaixo de C_j , abrangendo todo o espectro. Da mesma forma quando C_j é igual a zero toda a curva κ_η está acima dele, devido a inexistência de valores negativos para o coeficiente de absorção espectral.

O modelo SLW utiliza a função ALB e divide o campo radiante de um gás em $j+1$ seções transversais constantes C , gerando j faixas que cobrem todo o domínio do coeficiente de absorção, conforme Figura 4.4

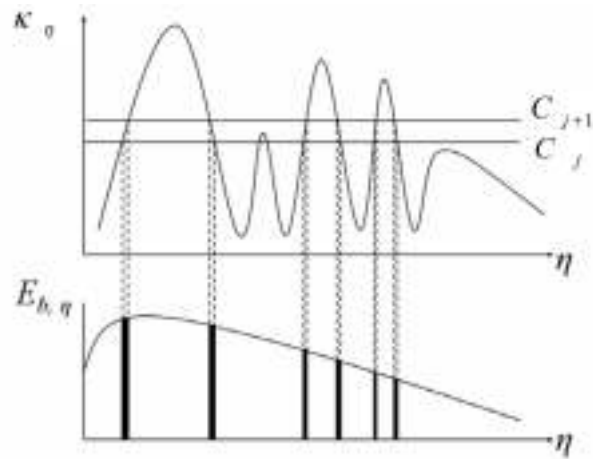


Figura 4.4 – Seções transversais usando o modelo SLW.

Denilson e Weeb,1993b, propuseram a seguinte relação para calcular o coeficiente de absorção molar médio dentro de uma região delimitada por C_j e C_{j+1} , que é o coeficiente de absorção molar do j -ésimo gás:

$$\kappa_j = N\sqrt{C_j \cdot C_{j+1}} \quad (4.23)$$

onde N é a densidade molar do gás e pode ser calculada pela Eq. 3.8 apresentada anteriormente.

Da mesma forma que nos outros modelos apresentados a equação do transporte pode ser descrita como segue:

$$\frac{dI_\eta}{dS} = -\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{\eta,b} \quad (4.24)$$

Integrando-se a equação de transporte radiante separadamente em cada uma das faixas em que o coeficiente de absorção foi dividido, se obtém a seguinte equação:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \frac{dI_\eta}{dS} = \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} (-\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{\eta,b}) d\eta, j=1,2..n \quad (4.25)$$

Como κ_j é considerado constante e aplicando a regra de Leibnitz do lado esquerdo da Eq. (4.23) chega-se o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dS} \left[\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \frac{dI_\eta}{dS} \right] &= -\kappa_j \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta + \kappa_j \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta + \sum_i I_\eta (\eta^{u_{i,j}}) \frac{d\eta^{u_{i,j}}}{dS} - \\ &\sum_i I_\eta (\eta^{l_{i,j}}) \frac{d\eta^{l_{i,j}}}{dS} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Negligenciando os dois últimos termos da Eq.(4.26) chega-se:

$$\frac{dI_j}{dS} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j I_b \quad (4.27)$$

onde I_j é definido como:

$$I_j = \sum_i \int_{\Delta\eta} I_\eta d\eta \quad (4.28)$$

e a_j é uma função de ponderação que é calculada usando o conceito da função distribuição ALB da seguinte forma:

$$a_j = F(C_{j+1}) - F(C_j) = \left(\sum_i \int_{\Delta\eta} I_\eta d\eta \right) / I_b \quad (4.29)$$

Para facilitar a aplicação do método, Solovjov e Weeb, 2000 apresentaram a seguinte aproximação para problemas não homogêneos.

$$F_{yC_\eta}(C_j) = F_{C_\eta}(C_j/Y) \quad (4.30)$$

Para uma mistura de gases a função distribuição ALB deve ser recalculada cada vez que o estado termodinâmico da mistura muda. Desta forma para facilitar a aplicação do método, Solovjov e Webb, 2000 apresentaram aproximações a serem usadas na modelagem. Para uma mistura de gases sem a presença de partículas sólidas a aproximação por multiplicação que segue abaixo é a que melhor descreve a função distribuição ALB.

$$F_{multi}(C_j) = \prod_{i=1}^m F_i(C_j/Y_i) \quad (4.31)$$

No entanto para uma mistura de gases com a presença de fuligem a aproximação mais indicada é a híbrida que é definida da seguinte maneira:

$$F_{multi}(C) = [F_{multi}(C) \ln(a/C) + F_{sup} \ln(C_j/b)] / \ln(b/a) \quad (4.32)$$

onde a e b são o limites mínimo e máximo dos coeficientes de absorção usados no cálculo da função ALB.

4.4 O modelo do número de onda cumulativo (CW).

Desenvolvido por Solovjov e Webb, 2002, o modelo CW é baseado na seção de absorção transversal dos gases dado em cm^2/molec , onde para qualquer valor fixo da seção transversal, C , e número de onda η , é definido o número de onda cumulativo pela seguinte relação:

$$w(C, \eta) = \begin{cases} \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) + (\eta - \eta^*) & \text{se } C_\eta < C \\ \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) & \text{se } se \geq C_\eta / C \end{cases} \quad (4.33)$$

onde α_i e β_i são intervalos de número de onda obtidos com a intersecção da curva com as linhas transversais $C_\eta = C$, e η^* é o maior número de onda da intersecção para o caso onde a seção transversal C_η é menor do que um valor C . Com o auxílio da Figura 4.5 fica evidente a definição de que o número de onda cumulativo é uma função crescente contínua de η .

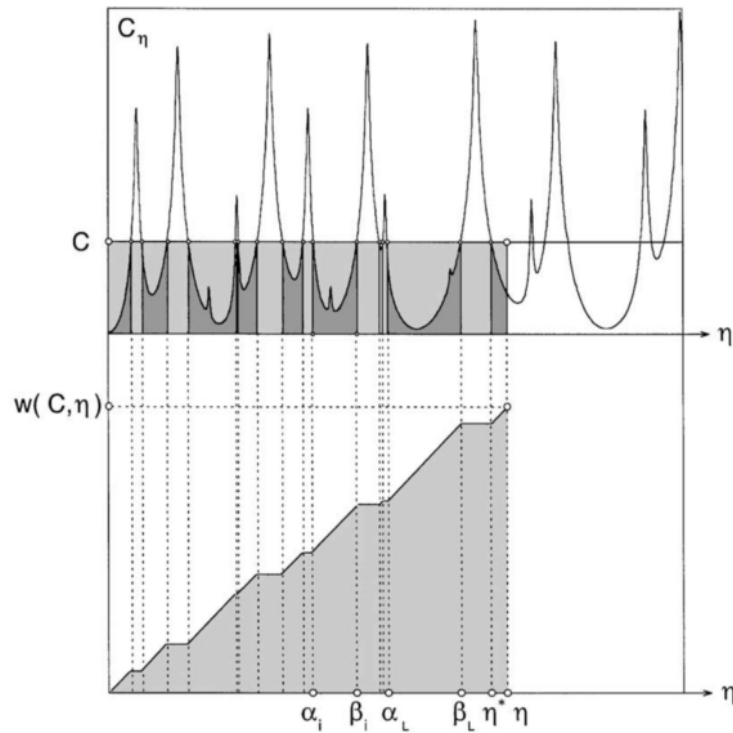


Figura 4.5 – Forma esquemática do número de onda cumulativo [Solovjov e Webb, 2002].

O número de onda é definido conforme Eq.(4.33) da seguinte maneira:

$$w(C, \eta) = \int_0^{\eta} H(C - C_\eta) d\eta \quad (4.34)$$

Pode-se perceber que a função CW é uma reta crescente enquanto o valor de C for maior do que o espectro de absorção e constante quando C for menor que o espectro. Desta forma a derivada da Eq. (4.32) fica:

$$\frac{w(C, \eta)}{d\eta} = \int_0^{\eta} H(C - C_{\eta}) = \begin{cases} 1 & \text{se } C > C_{\eta} \\ 0 & \text{se } C \leq C_{\eta} \end{cases} \quad (4.35)$$

Substituindo na Eq. (4.34) a integração com respeito a variável independente η pela integração com respeito ao número de onda cumulativo chega-se a seguinte equação:

$$\int_{\{C_{\eta} < C\}} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} H(C - C_{\eta}) d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} \frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} dw(C, \eta) \quad (4.36)$$

O domínio de integração do lado esquerdo da Eq. (4,35) é a união dos intervalos de número de onda definidos pela intersecção da linha C com o espectro de absorção do gás. Já o termo do lado direito da Eq. (4.35), é o conjuntos de todos os números de onda que estão contidos no espectro de absorção molecular.

Para casos onde a concentração dos gases é variável Solojovo e Webb, 2005 propõem a simplificação de negligenciar o alargamento do espectro para o gás na nova concentração. Desta forma o espectro para a nova concentração do gás se desloca apenas verticalmente como se pode perceber na Figura 4.6.

Assim, a relação entre a curva CW para o gás com $Y = 1,0$ e a curva CW para uma substância com concentração diferente é dada pela seguinte equação:

$$w_{Y_{C_{\eta}}}(C, \eta) = w_{C_{\eta}}(C/Y, \eta) \quad (4.37)$$

Quando se considera problemas envolvendo fuligem em processos de combustão, a equação que segue é útil para simplificação do modelo:

$$w_{C_{\eta}+C^*}(C, \eta) = w_{C_{\eta}}(C - C^*, \eta) \quad (4.38)$$

Onde $w_{C_{\eta}+C^*}(C, \eta)$ é a função CW em relação ao espectro $C_{\eta} + C^*$ na secção transversal C e $w_{C_{\eta}}(C - C^*, \eta)$ é a função CW em relação ao espectro C_{η} na secção transversal $C_{\eta} + C^*$ como pode ser visto na Figura 4.7

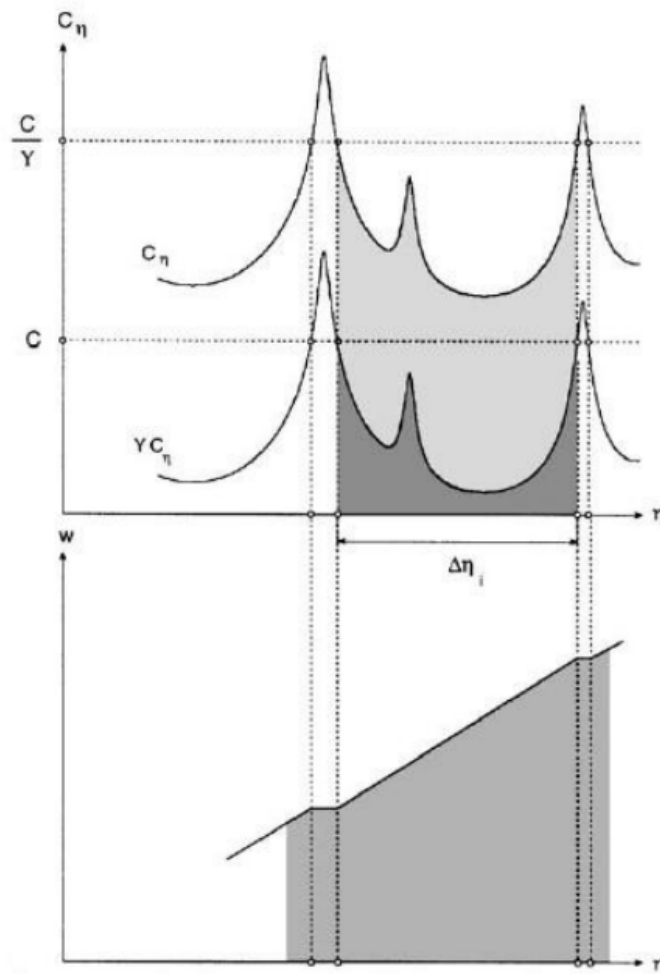


Figura 4.6 – Dependência do número de onda cumulativo com a concentração [Solovjov e Webb, 2002].

Para caso de uma mistura constituída de m gases e assumindo a premissa de que não haverá sobreposição de linhas espectrais, para as seções transversais de absorção, o número de onda cumulativo pode ser representado como:

$$w_{C_\eta}(C, \eta) = w_1 \left(\frac{C}{Y_1}, \eta \right) + w_2 \left(\frac{C}{Y_2}, \eta \right) + \dots + w_m \left(\frac{C}{Y_m}, \eta \right) - (m-1)\eta \quad (4.39)$$

onde w_i são os números de onda cumulativos de cada espécie que compões a mistura.

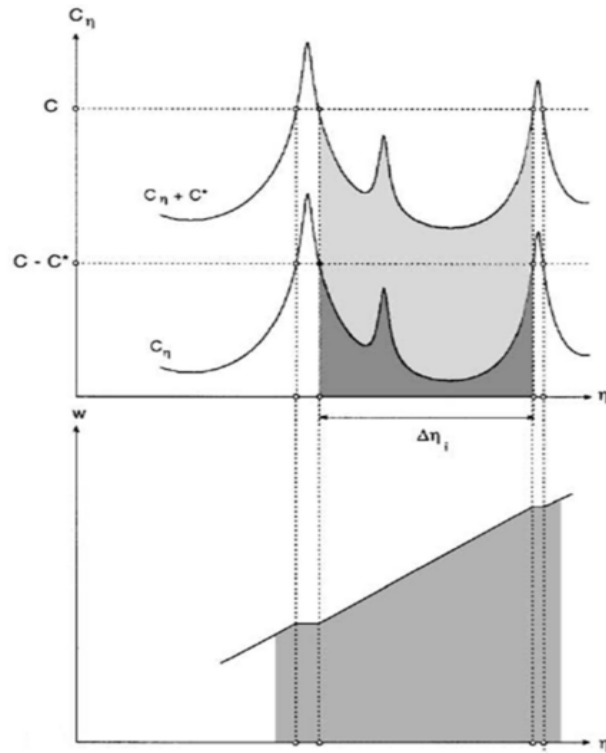


Figura 4.7 – Dependência do número de onda cumulativo com uma constante adicionada ao espectro [Solovjov e Webb, 2002].

Definida a forma de tratamento dos valores de seção transversais de absorção, C_η , o próximo passo é estender esta teoria para toda a faixa de valores de C_η . Considerando uma subdivisão de todo o domínio de absorção em gases cinzas, através das seções transversais suplementares C_j , para $j = 1, 2, 3, \dots, n$, onde n é o número de gases cinzas como apresentado na Figura 4.8.

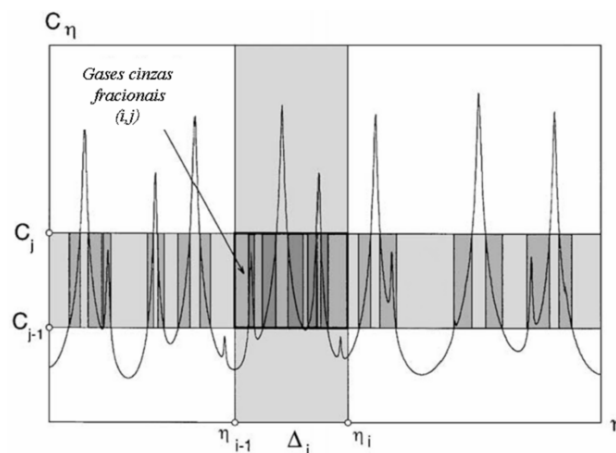


Figura 4.8 – Modelagem espectral dos gases cinzas fracionais [Solovjov e Webb, 2002].

Assume-se o conjunto H_j como a união de todos os subintervalos espectrais para os quais o valor atual de C_η esteja entre C_j e C_{j-1} , ou seja:

$$H_j = \{\eta : C_{j-1} \leq C_\eta \leq C_j\}, j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (4.40)$$

$$\Delta_i = [\eta_{i-1}, \eta_i], i = 1, 2, 3, \dots, p \quad (4.41)$$

onde a Eq. (4.40) representa uma subdivisão da região de números de onda em subintervalos destes.

O modelo CW utiliza a intersecção dessas subdivisões espectrais para definir os gases cinzas fracionais, D_{ij} , conforme Eq. (4,41), representado na Figura 4.8..

$$D_{ij} = \Delta_i \cap H_j \quad (4.42)$$

A soma de todos os gases cinzas fracionais resulta no domínio total do espectro de absorção molecular dos gases. Ainda que os valores de Δ_i permaneçam fixos para qualquer localização do meio participante, H_j e D_{ij} podem mudar suas localizações dependendo do estado termodinâmico local do gás.

Esta modelagem é aplicada para subdividir a integração espectral sobre o número de onda em uma integração sobre o gás cinza fracional, D_{ij} . A subdivisão em gases cinzas H_j é usada para simplificação das linhas moleculares. Cada gás cinza é representado por um único valor de coeficiente de absorção. A subdivisão em intervalos Δ_i é utilizada para incorporação da continuidade do espectro e fronteiras não cinzas, como por exemplo, os meios que contém partículas de fuligem.

A correlação espectral local é definida pela diferença entre o número de onda cumulativo entre duas secções transversais suplementares. Para cada gás cinza fracional essa diferença pode ser representada pelo produto de duas funções, tais que uma depende somente da localização S e a outra somente do número de onda η .

$$w(C_j, S, \eta) - w(C_{j-1}, S, \eta) = u_{ij}(S)v_{ij}(\eta) \text{ para } \eta \in \Delta_i \quad (4.43)$$

Esta aproximação será tanto melhor, quanto menor for o intervalo Δ_i e quanto mais próximas forem as seções transversais suplementares C_j e C_{j-1} .

Para um ponto S qualquer, a função $u_{ij}(S)$ é calculada como:

$$u_{ij}(S) = \frac{w(C_j, S, \eta) - w(C_{j-1}, S, \eta)}{w(C_j, S^*, \eta) - w(C_{j-1}, S^*, \eta)} \quad (4.44)$$

onde S^* representa um estado termodinâmico de referência onde se conhece a temperatura e a fração molar. No estado de referência, assume-se $u_{ij}(S^*) = 1$.

A integração da intensidade espectral de radiação I_η , sobre o gás cinza produz:

$$\int_{D_{ij}} I_\eta d\eta = \int_{\{\eta: C_{j-1} < C_\eta < C_j\}} I_\eta d\eta = u_{ij}(S) J_{ij}(S) \quad (4.45)$$

onde J_{ij} é chamado de intensidade do gás cinza fracional e u_{ij} é um fator local de correção para esta intensidade.

Intensidade total da radiação pode ser determinada pelo somatório de todas as intensidades dos gases cinzas, ponderadas pelo fator de correção da seguinte forma:

$$I(S) = \int_0^\infty I_\eta(S) d\eta = \sum_{i,j} u_{ij}(S) J_{ij}(S) \quad (4.46)$$

Desta forma a equação do transporte radiante pelo método CW, considerando um meio que não espalha a radiação assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial J_{ij}}{\partial S} = -\kappa_j J_{ij} + \kappa_j J_{bij} \quad (4.47)$$

onde κ_j é calculado pela seguinte equação:

$$\kappa_j = N \sqrt{C_j C_{j-1}} \quad (4.48)$$

Onde N é a densidade molecular, em unidades de molec./cm³, calculada pela seguinte expressão:

$$N = \frac{7,34143 \times 10^{21}}{T} \quad (4.49)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram realizadas simulações utilizando o modelo WSGG e a integração LBL considerando uma geometria unidimensional constituída de duas placas planas, infinitas, paralelas entre si, com superfícies negras e preenchidas por um meio participante. A Figura 5.1 mostra a configuração do problema a ser resolvido.



Figura 5.1 – Representação da geometria referente aos problemas solucionados.

O foco principal deste trabalho é a comparação das soluções, obtidas pelos dois modelos, para o fluxo radiante, em W/m^2 , e o divergente do fluxo de calor, em unidades de W/m^3 , pois este dado é usado como termo fonte na equação da energia em problemas que envolvem outros mecanismos de transporte. Uma simplificação adotada no modelo WSGG considera que o coeficiente de absorção por unidade de pressão, κ_j , seja independente da temperatura e da concentração das espécies participantes, tendo sido determinados a partir da emitância do meio ao longo de um caminho isotérmico e homogêneo. Assim sendo, se faz necessário analisar como o modelo se comporta em meios não isotérmicos e não homogêneos, um estudo que não consta de forma clara na literatura.

A equação de transporte radiante é resolvida pelo método das ordenadas discretas. Esse método é baseado em uma representação discreta da variação das direções de intensidade radiante.

As soluções obtidas nesse trabalho são independentes em relação à malha espacial, comprovado com o estudo de refinamento de malha do problema, onde se buscou a convergência dos valores para o divergente do fluxo de calor, calculados através do método Linha por Linha. Os resultados são apresentados nas Figuras 5,2.e 5.3.

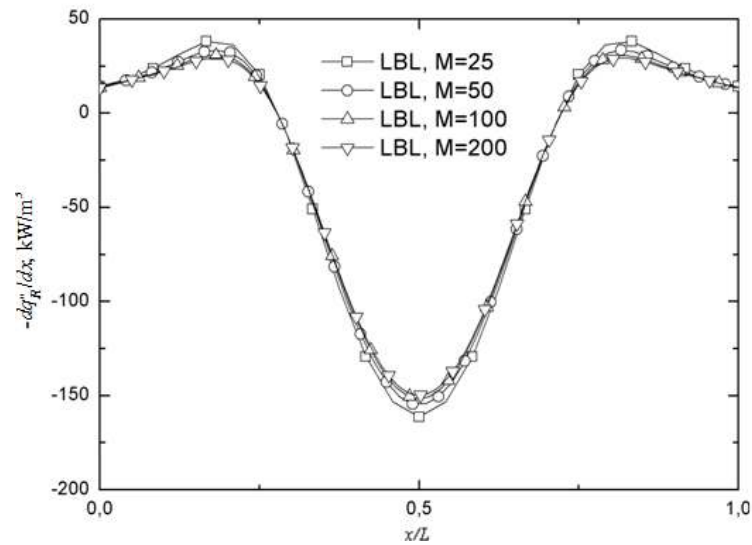


Figura 5.2– Divergente do fluxo radiante obtidos para número de malha distintos.

As maiores diferença entre os resultados estão concentrados na região central entre as placas como pode ser observado na Figura 5.2. Portanto a Figura 5.3 apresenta a convergência dos valores para o divergente do fluxo radiante nesta região. Optou-se por utilizar a malha com 200 pontos que apresenta uma boa qualidade de resultados com erro máximo de 0,35% com relação à malha de 400 pontos

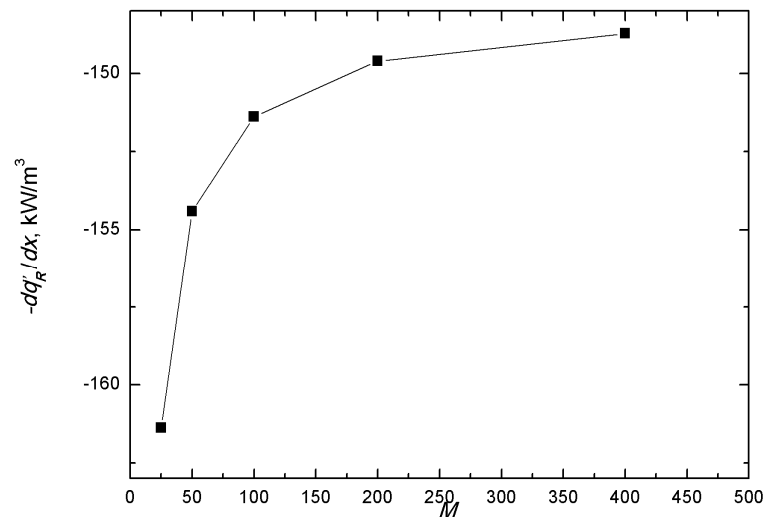


Figura 5.3– Convergência dos resultados para o divergente do fluxo radiante obtidos para diferentes número de malha.

O estudo para resolução da interpolação de dados do HITEMP 2010 com relação à temperatura utilizado na solução LBL foi apresentada na secção 4.1 e os resultados para o divergente do fluxo radiantes são reapresentados na Figura 5.4.

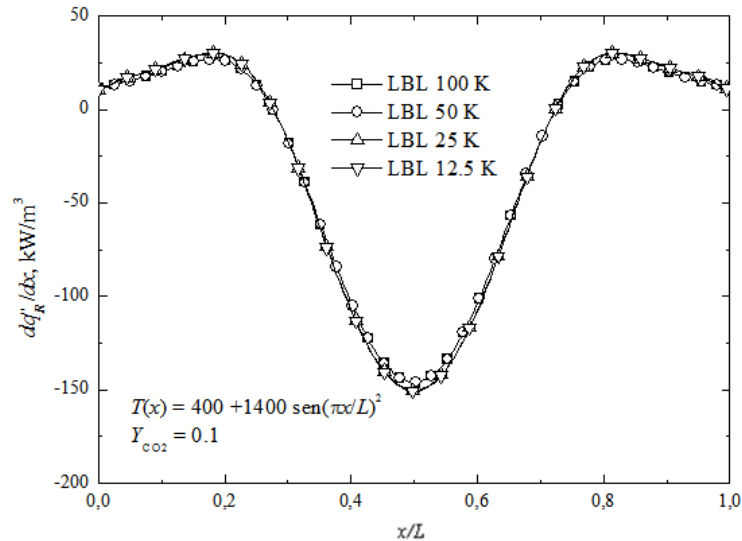


Figura 5.4– Divergente do fluxo radiante obtidos para diferentes interpolações de temperatura

O erro máximo é calculado pelo módulo da maior diferença entre os valores do fluxo radiante ou do divergente do fluxo radiante das soluções WSGG e LBL, avaliados no mesmo ponto x . Por fim, o módulo da diferença é dividido pelo maior valor em módulo encontrado pela solução LBL. A seguir, são apresentadas as equações utilizadas para cálculo do erro para o fluxo de calor radiante e do divergente do fluxo radiante:

$$\delta(\%) = \frac{|q''_{R,WSGG} - q''_{R,LBL}|}{\max|q''_{R,LBL}|} \times 100\% \quad (5.1)$$

$$\gamma(\%) = \frac{|\dot{q}_{R,WSGG} - \dot{q}_{R,LBL}|}{\max|\dot{q}_{R,LBL}|} \times 100\% \quad (5.2)$$

Além do erro máximo também é avaliado o erro médio, que é dado pela média aritmética de todos os erros locais.

Nas seções que seguem, neste capítulo, são analisados alguns casos unidimensionais com os mais diversos perfis de temperatura e concentração.

5.1 Perfis de temperatura e concentração uniformes

O modelo WSGG foi concebido para resolver problemas com temperatura e concentração homogêneas, por isto é pertinente iniciar este estudo com essas condições. Neste primeiro caso uma temperatura de 1800 K é mantida no meio, No entanto para que haja transferência radiante não nula no domínio, as paredes negras são mantidas na temperatura de 400 K.

Assim como a temperatura as pressões parciais de dióxido de carbono e vapor da água também são mantidas constantes no meio. Os resultados foram gerados para razões de pressões parciais iguais a 1 e 2 utilizando valores de 0,1 atm para o dióxido de carbono e de 0,1 e 0,2 atm para o vapor da água. A distância entre as placas negras foi de $L=1$ m

Como esperado, já que o modelo foi desenvolvido para estas condições, os resultados obtidos concordam quando comparados com a solução LBL, apresentando um erro médio de 2,04 % e 2,10 % para divergente do fluxo radiante com razões de pressão parcial igual a 1 e 2 respectivamente. Os erros máximos foram encontrados próximos às paredes negras devido ao elevado gradiente de temperatura imposta nesta região, alcançando valores de 5,45% e 5,55% para as razões de pressão parcial igual a 1 e 2 respectivamente. As Figuras 5.5 e 5.6 representam os resultados do fluxo de calor radiante para razões de pressão parcial iguais a $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e 2 respectivamente, enquanto que as Figuras 5.7 e 5.8 apresentam os resultados para o termo fonte.

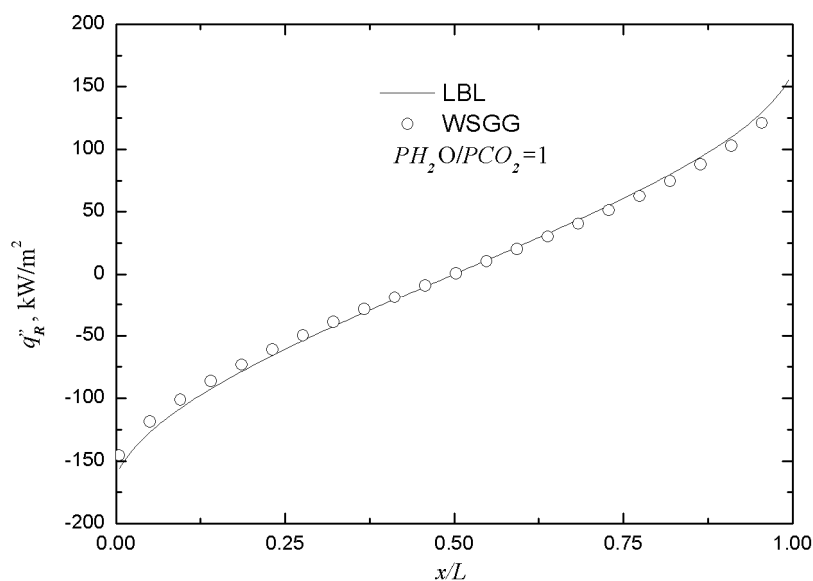


Figura 5.5 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

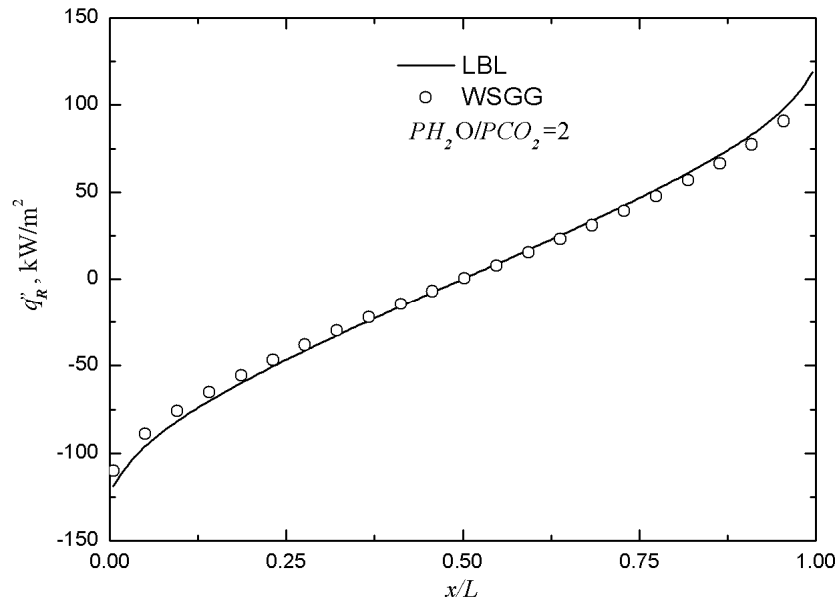


Figura 5.6 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

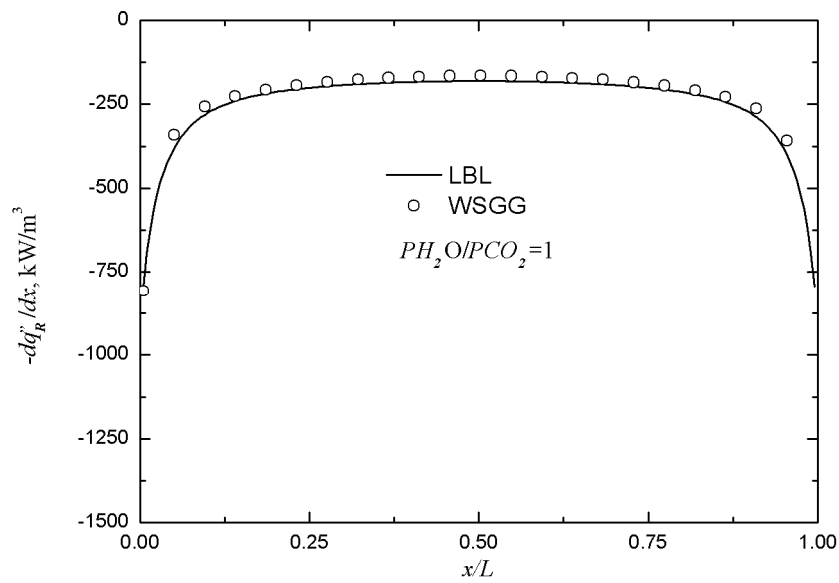


Figura 5.7 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

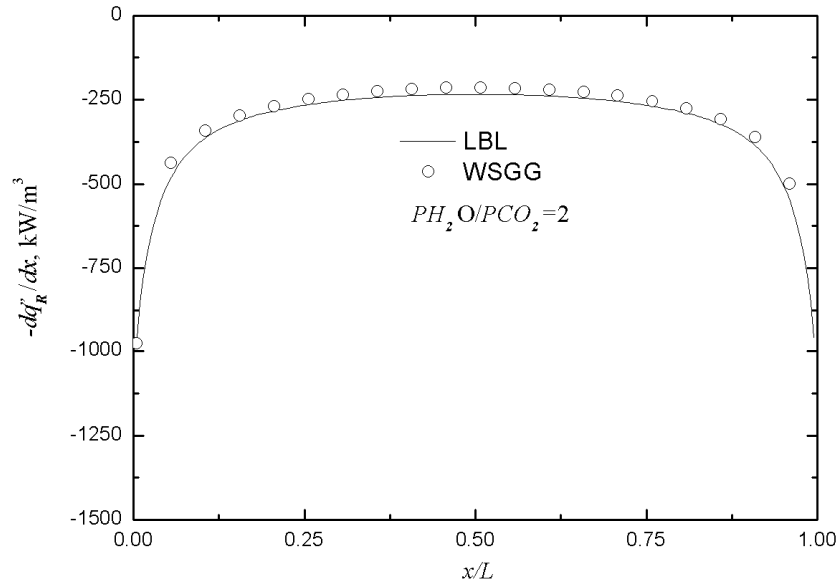


Figura 5.8 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante entre o modelo WSGG e o LBL com temperatura e pressões parciais homogêneas para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

Nas secções que seguem serão estudados diversos casos com perfis temperatura e concentração distintos. Abaixo seguem as equações que descrevem cada perfil de temperatura e concentração que foram adotados neste estudo.

$$T(x) = 400 \text{ K} + (1400 \text{ K}) \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.3)$$

$$T(x) = 400 \text{ K} + (1400 \text{ K}) \text{sen}^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (5.4)$$

$$T(x) = \begin{cases} 920 \text{ K} + (880 \text{ K}) \text{sen}^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) & \text{se } x \leq L/4 \\ 1100 \text{ K} + (700 \text{ K}) \cos\left|\frac{4x}{L} - 1\right| & \text{se } x > L/4 \end{cases} \quad (5.5)$$

$$T(x) = 1600 - 800 \left(\frac{2x}{L} - 1\right)^2 \quad (5.6)$$

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,9\left(\frac{x}{L}\right) + 0,9\left(\frac{x}{L}\right)^2 \quad (5.7)$$

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,133 + 0,1\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.8)$$

A tabela 5,1 apresenta as principais características dos perfis adotados em cada caso estudado.

Tabela 5.1 – tabela com esquemática com as características dos perfis de temperatura e concentração adotados.

| | Temperatura | | | | | Concentração | | | | |
|--------|-------------|------------|-----|-----------|-----|--------------|-----------|-----|-----------|-----|
| | Equação | Isotérmico | | Simétrico | | Equação | Homogêneo | | Simétrico | |
| | | Sim | Não | Sim | Não | | Sim | Não | Sim | Não |
| Caso A | 5.3 | | x | x | | - | x | | x | |
| Caso B | 5.4 | | x | x | | - | x | | x | |
| Caso C | 5.5 | | x | | x | - | x | | x | |
| Caso 1 | 5.6 | | x | x | | 5.7 | | x | x | |
| Caso 2 | 5.6 | | x | x | | 5.8 | | x | | x |
| Caso 3 | 5.3 | | x | x | | 5.8 | | x | | x |
| Caso 4 | 5.4 | | x | x | | 5.8 | | x | | x |
| Caso 5 | 5.5 | | x | | x | 5.8 | | x | | x |

5.2 Perfis de temperatura não isotérmico e concentração homogênea

Esta secção considera que entre as placas há um meio homogêneo e não isotérmico. Três perfis de temperatura distintos onde os dois primeiros são perfis simétricos e o terceiro é um perfil assimétrico.

Abaixo seguem as equações que as descrevem os perfis de temperatura adotados, todas em unidades de K.

Caso A

$$T(x) = 400 \text{ K} + (1400 \text{ K}) \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.9)$$

Caso B

$$T(x) = 400 \text{ K} + (1400 \text{ K}) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)^2 \quad (5.10)$$

Caso C

$$T(x) = \begin{cases} 920 \text{ K} + (880 \text{ K}) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)^2 & \text{se } x \leq L/4 \\ 1100 \text{ K} + (700 \text{ K}) \cos\left|\frac{4x}{L} - 1\right| & \text{se } x > L/4 \end{cases} \quad (5.11)$$

A Figura a seguir representa os perfis de temperatura adotados.

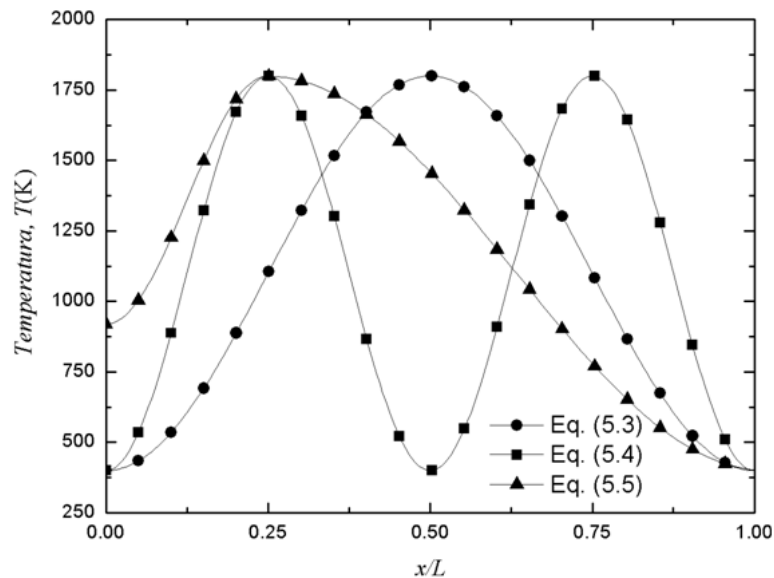


Figura 5.9 Perfis de temperatura utilizados para testar o modelo WSGG.

Brittes et al. , 2012, utilizaram estes perfis para testar a confiabilidade dos métodos de solução CW e SLW. Os resultados do divergente do fluxo de calor obtidos por estes modelos foram comparados com a solução *benchmark* linha por linha (LBL). Os perfis de temperatura

representados pelas Eq. (5.3) a (5.5) também foram utilizados em outros trabalhos como Cassol et al., 2012a e Cassol et al., 2012b.

O meio participante considerado é uma mistura gasosa composta com 10% de CO_2 e 20% de H_2O (o do meio corresponde a um gás inerte tal como o nitrogênio). Conforme a teoria do gás ideal, a razão entre a pressão parcial de cada espécie em relação à pressão total é o equivalente à sua concentração molar, assim $Y_{\text{CO}_2} = 0,1$ e $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$, ou seja, uma proporção de $P_{\text{H}_2\text{O}}/P_{\text{CO}_2} = 0,2$.

A distância entre as placas é de $L=1$ m. Para o perfil de temperatura da Eq. (5.3), a temperatura do meio em contato com as duas paredes é de 400 K, atingindo o valor máximo no ponto médio entre as duas placas planas. No caso do perfil da Eq. (5.4), em que a temperatura do meio em contato com as paredes também é de 400 K, há dois pontos de temperatura máxima de 1800 K, em $x/L = 0,25$ and $0,75$. Para o perfil da Eq. (5.5) as temperaturas do meio em contato com as paredes da direita ($x/L = 0$) e da esquerda ($x/L = 1,0$) são 920 K e de 400 K para as paredes esquerda e direita, respectivamente. A temperatura máxima alcançada a um quarto do da distância entre as placas, $x/L = 0,25$, é de 1800 K.

Os resultados são apresentados em termos do fluxo de calor por radiação, em unidades de W/m^2 , e do termo fonte radiante, que é igual ao divergente do fluxo de calor, porém com o sinal oposto. O termo fonte radiante representa fisicamente que a perda líquida de energia radiativa em um dado volume de controle, correspondendo à energia emitida menos a absorvida.

As Figuras 5.10 a 5.12 mostram os resultados para o fluxo de calor obtidos para as distribuição de temperatura dada pelas Eqs. (5.3) a. (5.5), respectivamente.

Para todos os perfis de temperatura avaliados no caso 1, o fluxo de calor por radiação é positivo nas regiões médias entre as paredes, o que indica que o ganho da radiação a partir das regiões de maior temperatura do meio supera a perda de radiação para as superfícies. A Figura 5.13 mostra que o termo fonte radiante é negativo a meia distância entre as placas, por isso o ganho de energia radiativa é menor do que a perda nessa localização. Nas Figuras 5.10 e 5.11 observa-se que o fluxo de calor por radiação é zero em $x/L = 0,5$ devido simetria do perfil de temperatura empregado não ocorre para na Figura 5.15 pelo perfil aximétrico. A Tabela 5.1 resume os erros máximos e médios obtidos com a comparação entre os modelos WSGG e LBL, para o termo fonte radiante e para o fluxo de calor por radiação.

Os erro máximos encotrandos não ultrapassam 4,5% para o termo fonte radiante e 5,01% para o fluxo de calor por radiação . Sendo que na média os erros ficam por volta de 2

% para o termo fonte radiante e para o fluxo de calor por radiação não ultrapassam o valor de 3,5%.

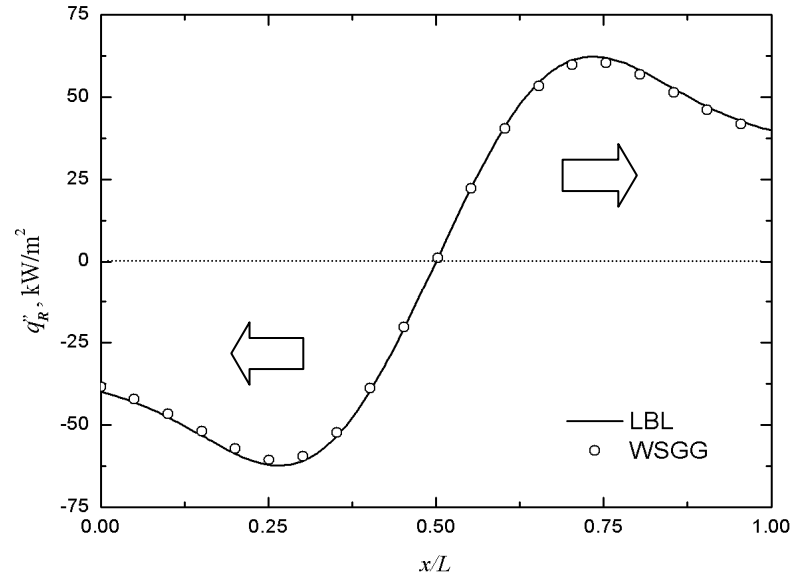


Figura 5.10 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação para modelo WSGG com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.3).

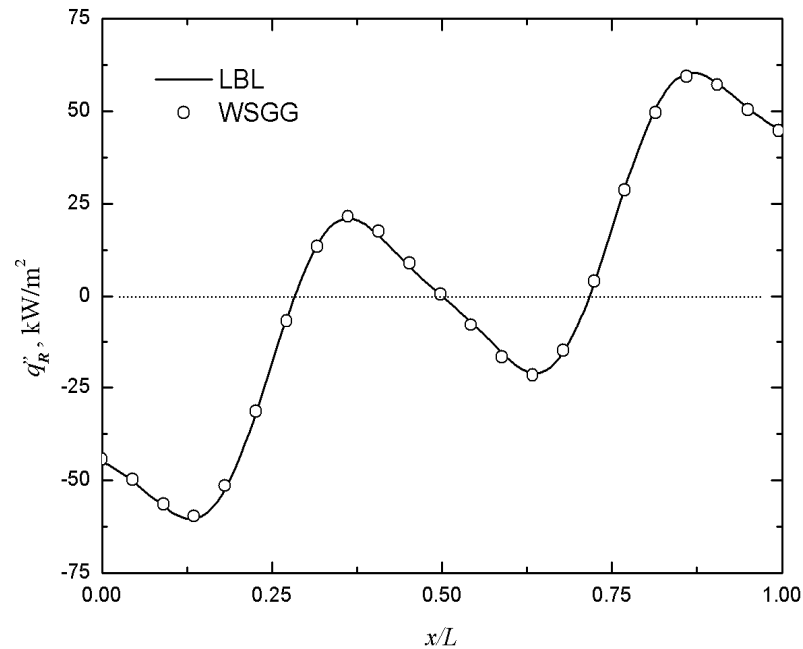


Figura 5.11 – Resultados para Fluxo de calor do modelo WSGG comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.4).

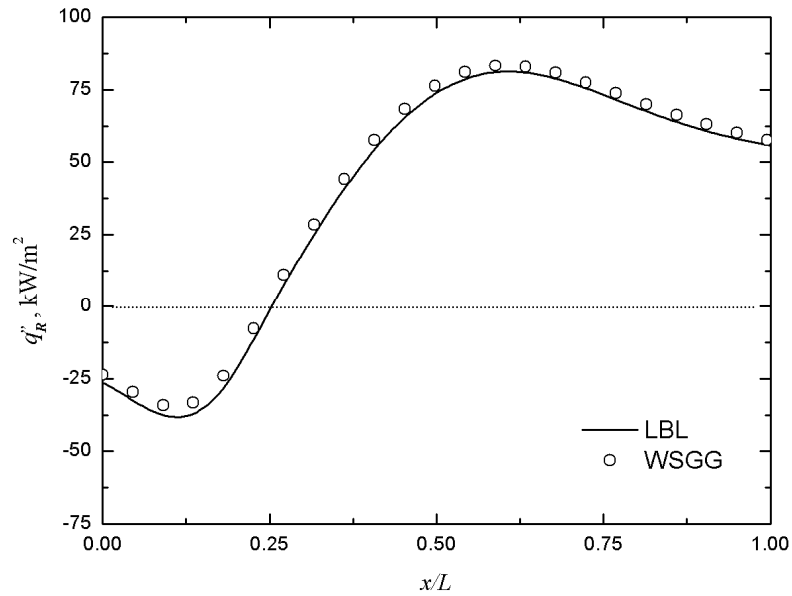


Figura 5.12 – Resultados obtidos para fluxo de calor por radiação com modelo WSGG comparado a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.5).

Da mesma forma as Figuras 5.13 a 5.15 mostram as soluções obtidas para o termo fonte radiante para as Eqs. (5.3) a (5.5), respectivamente.

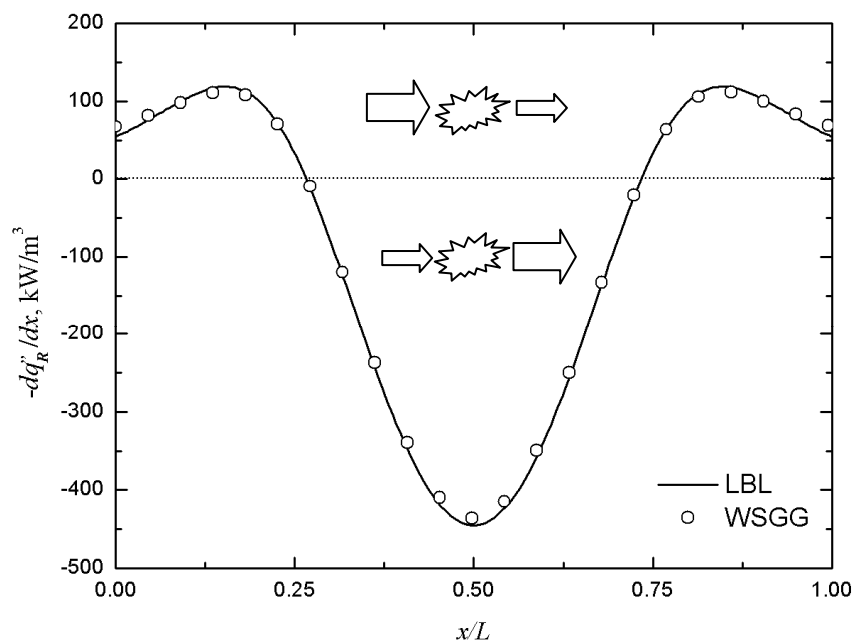


Figura 5.13 – Comparação do termo fonte radiante obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.3)

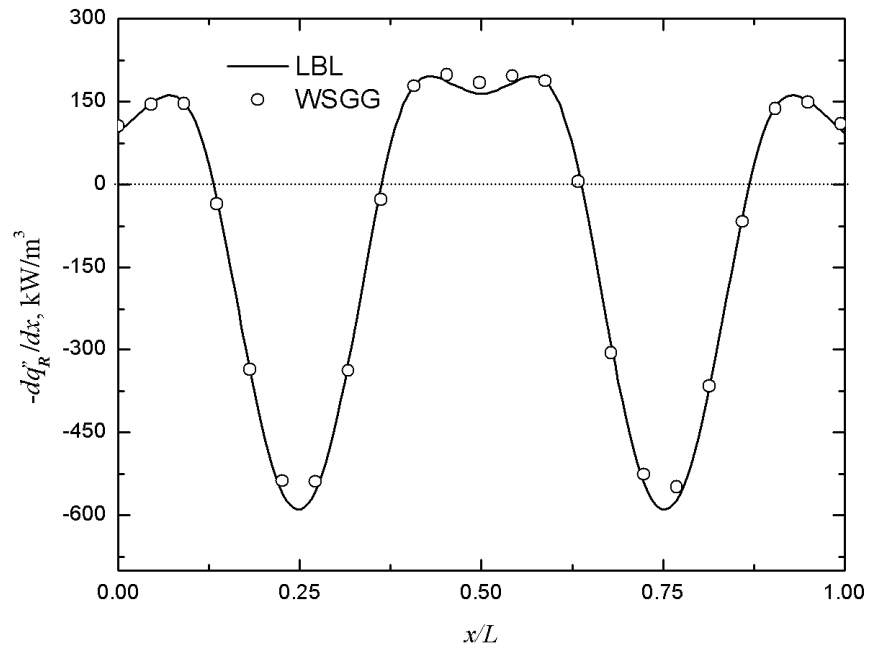


Figura 5.14 – Comparação do termo fonte radiante obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.4).

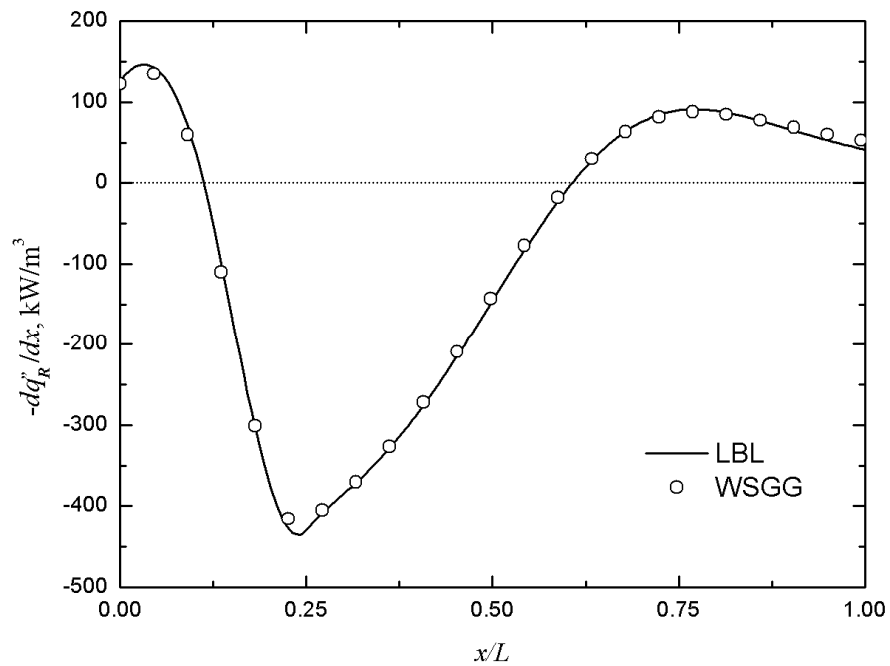


Figura 5.15 – Comparação do termo fonte radiante obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para a distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.5).

Tabela 5.2 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (*benchmark*).

| Avaliação do erro no cálculo do termo fonte radiante | | | | |
|--|---------------------|----------------|---------|---------------------------|
| Equação | δ_{\max} (%) | x/L | T (K) | δ_{med} (%) |
| 5.3 | 2,95% | 0 e 1 | 400 | 1,21% |
| 5.4 | 4,40% | 0,346 e 0,653 | 1343 | 1,88% |
| 5.5 | 2,91% | 0,115 | 1308 | 1,14% |
| Avaliação do erro no cálculo do fluxo de calor por radiação | | | | |
| Equação | γ_{\max} (%) | x/L | T (K) | γ_{med} (%) |
| 5.3 | 2,41% | 0 e 1 | 400 | 1,67% |
| 5.4 | 1,84% | 0,412 e 0,5879 | 1343 | 1,02% |
| 5.5 | 5,01% | 1 | 1308 | 3,41% |

5.3 Perfil não isotérmico de temperatura e não homogêneo de concentração

5.3.1 Caso 1:

Para os casos estudados nesta seção é considerado que entre as placas há um meio não isotérmico com concentração não uniforme. Para o caso 1, é adotado um perfil parabólico para a temperatura onde o meio em contato com as placas tem temperatura igual a 800 K, enquanto na posição média entre placas a temperatura é máxima e igual a 1600 K como apresentado na Figura 5.16. Abaixo segue a equação de temperatura adotada:

$$T(x) = 1600 - 800 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (5.12)$$

Para as pressões parciais, considera-se um perfil parabólico. Apesar da concentração não ser homogênea tomou-se o cuidado para a razão das pressões parciais P_{H_2O}/P_{CO_2} ser mantida constante e dentro dos patamares para a qual as correlações foram geradas. As razões de pressão parcial utilizadas neste caso são de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. As equações utilizadas para determinar a variação de P_{H_2O} e P_{CO_2} ao longo do caminho seguem abaixo:

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,9 \left(\frac{x}{L} \right) + 0,9 \left(\frac{x}{L} \right)^2 \quad (5.13)$$

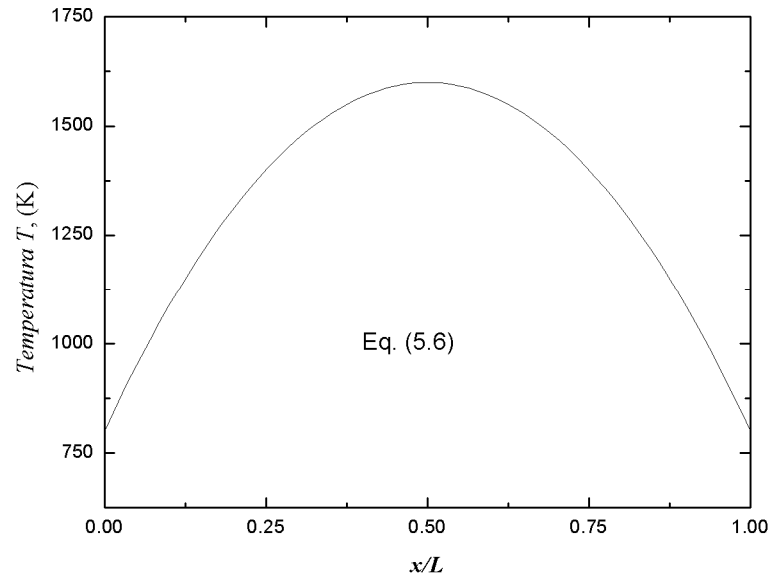


Figura 5.16 Perfil de temperatura dado pela Eq.(5.6).

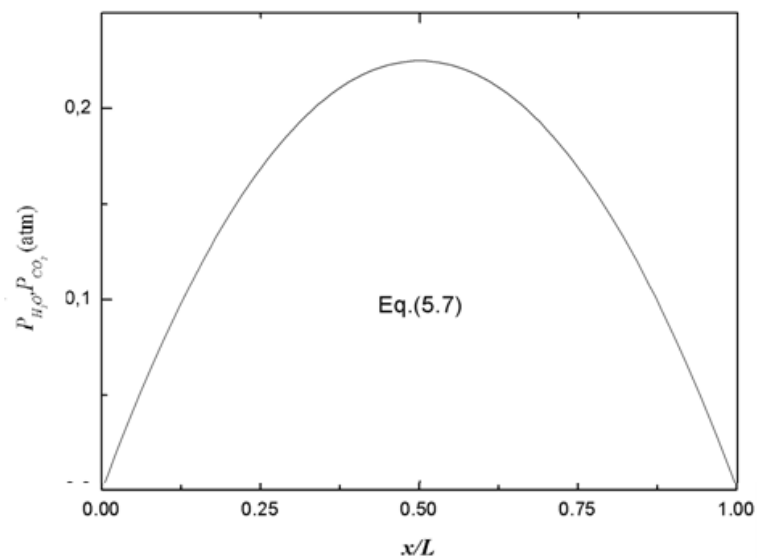


Figura 5.17 Perfil de concentração dado pela Eq.(5.7).

Para o caso onde a pressão parcial $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ a Eq. (5.7) é multiplicada por 2.

A pressão parcial máxima avaliada é de 0,23 atm, e se localiza a meia distância entre placas, enquanto que próximo às paredes a pressão parcial é de 0,04 atm.

Para verificação da influência da distância entre placas sobre o resultado obtido com o modelo WSGG, são gerados resultados para $L = 1,0$ m e $L = 2,0$ m, que são apresentados em termos do fluxo de calor por radiação, em unidades de W/m^2 e do termo fonte radiante, dado em W/m^3 . As Figuras 5.16 a 5.20 mostram os resultados obtidos através da distribuição de temperatura dada pela Eq. (5.6) e pela variação de concentração dada pela Eq. (5.7).

As figuras que seguem mostram os resultados obtidos para o fluxo de calor por radiação e para o divergente do termo fonte.

Observa-se que para ambas as razões de pressão parcial o aumento da distância entre as placas implicou em um aumento da transferencia de calor devido ao aumento da espessura optica do meio como apresentado nas Figuras 5.18 e 5,19. As Figuras 5.20 e 5.21 apresentam os resultados para o termo fonte radiante

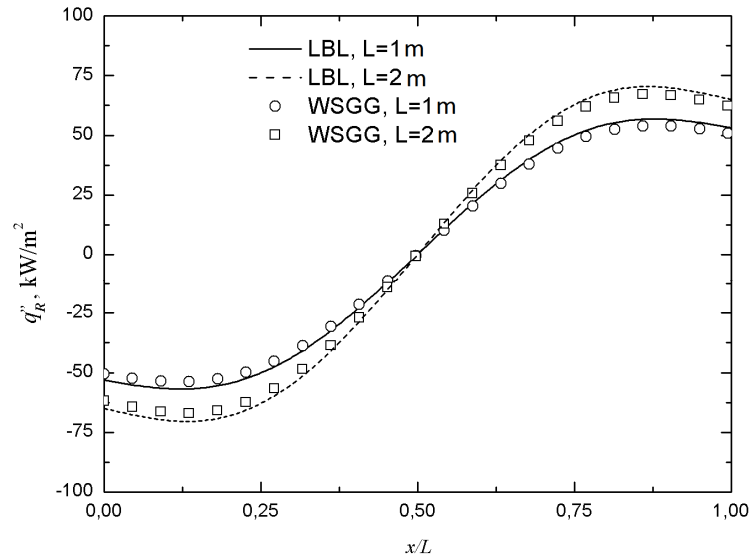


Figura 5.18 – Resultados para o fluxo de calor por radiação com o modelo WSGG comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$:

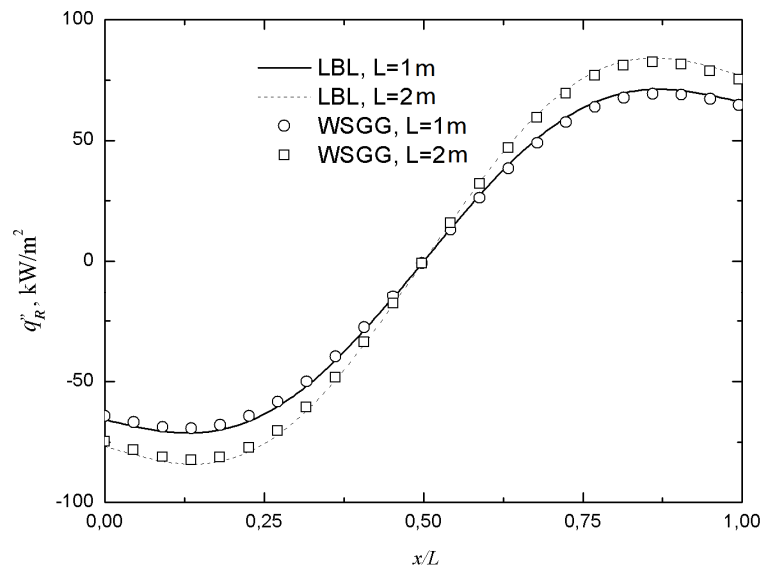


Figura 5.19 – Resultados para o fluxo de calor por radiação com o modelo WSGG comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$;:

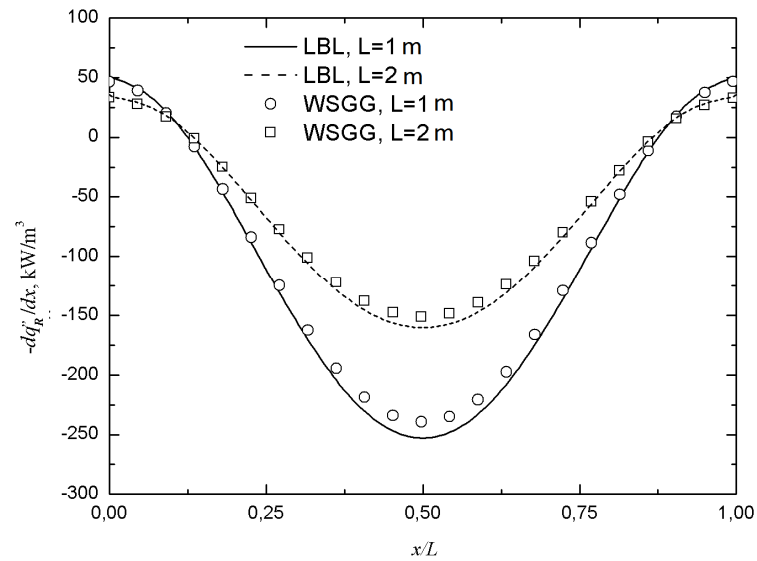


Figura 5.20 – Resultados para do termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

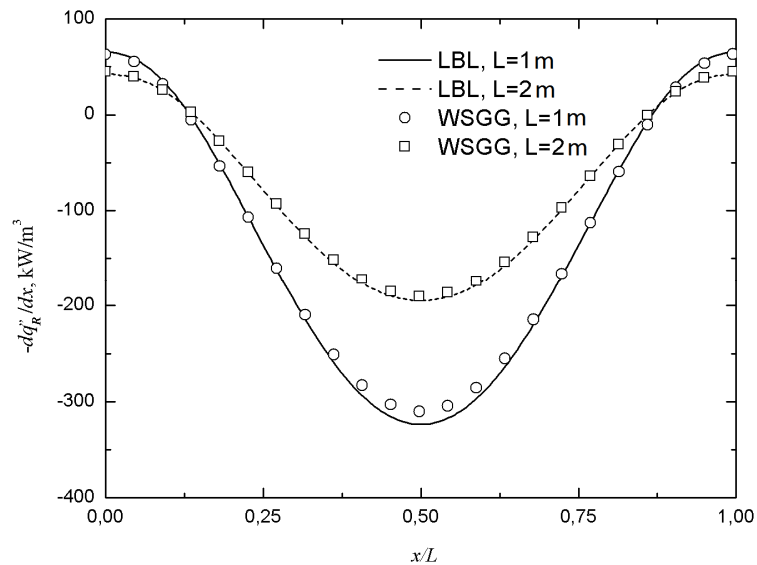


Figura 5.21 – Resultados para do termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

Para todas as avaliações deste caso, o termo fonte radiante apresentou erro máximo na região mediana entre as placas onde ocorre a temperatura e pressões parciais máximas. Observa-se que aumentando-se a distância entre as placas o erro tende a diminuir. Da mesma forma ao aumentar a razão das pressões parciais os erros encontrados também diminuíram. Provavelmente isto ocorre pela maior influência do vapor de água na emitância total.

A Tabela 5.3 apresenta os erros máximos e médios obtidos com a comparação entre os modelos WSGG e LBL, para o divergente do fluxo de calor radiante e para o fluxo de calor por radiação.

Os números mostram um acordo satisfatório entre o modelo WSGG e a solução LBL, com erros máximos que não ultrapassam 5,56 % e erros locais dentro do 3,72%.

Tabela 5.3 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com a solução LBL (*benchmark*).

| Avaliação do erro no cálculo do termo fonte radinate | | | | | |
|---|---------------------|---------------------|---------------|---------|---------------------------|
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | δ_{\max} (%) | x/L | T (K) | δ_{med} (%) |
| 1 | 1 | 5,28% | 0,5 | 1600 | 2,48% |
| 2 | 1 | 5,56% | 0,5 | 1600 | 2,28% |
| 1 | 2 | 4,07% | 0,5 | 1600 | 1,64% |
| 2 | 2 | 2,16% | 0,5 | 1600 | 1,02% |
| Avaliação do erro no cálculo fluxo de calor por radiação | | | | | |
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | γ_{\max} (%) | x/L | T (K) | γ_{med} (%) |
| 1 | 1 | 5,09% | 0,125 e 0,875 | 1151 | 3,72% |
| 2 | 1 | 4,73% | 0,15e 0,85 | 1151 | 3,63% |
| 1 | 2 | 2,84% | 0,23 e 0,76 | 1151 | 2,17% |
| 2 | 2 | 2,32% | 0 e 1 | 1151 | 1,58% |

5.3.2 Caso 2

Da mesma forma que no caso anterior, é considerado que o meio participante entre placas é não isotérmico e não homogêneo. O mesmo perfil de temperatura do caso 1 é adotado e as razões parciais são mantidas constantes no meio. Para as pressões parciais é adotado um perfil cossenoidal, abaixo seguem as equações de temperatura e concentração:

$$T(x) = 1600 - 800 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (5.6)$$

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,133 + 0,1 \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) \quad (5.14)$$

A Figura abaixo representa o comportamento da pressão parcial ao longo do caminho dada pela Eq. (5.8).

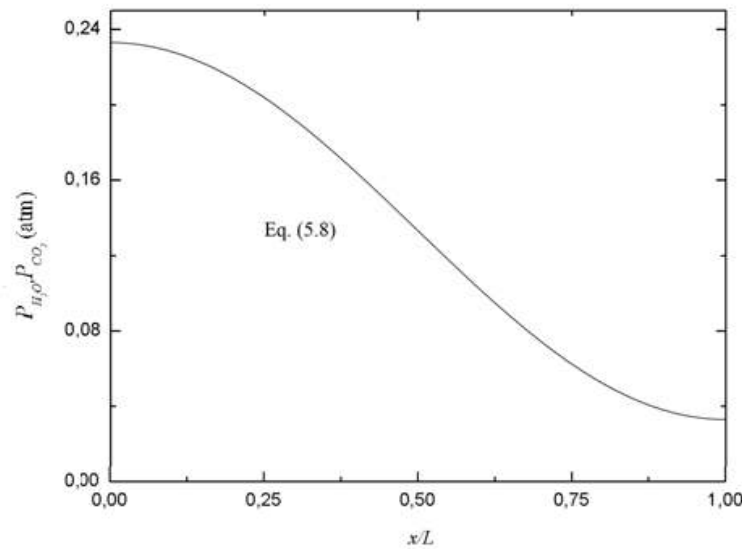


Figura 5.22 Perfil de concentração dado pela Eq.(5.8).

Os resultados obtidos são avaliados para distâncias entre placas iguais a $L=1\text{m}$ e $L=2\text{m}$. As razões de pressões parciais também são avaliadas para $P_{H_2O}/P_{CO_2}=1$ e $P_{H_2O}/P_{CO_2}=2$, para o caso da razão da pressão parcial igual a 2 a Eq. (5.8) é apenas multiplicada por 2. As pressões parciais atingem seu máximo próximo à parede esquerda $x/L=1$ com um valor de 0,23 atm, enquanto o valor mínimo é de 0,03 atm, sendo observado próximo à parede direita.

As Figuras 5.23 e 5.24 mostram os resultados obtidos para o fluxo de calor por radiação enquanto que as Figuras 5.25 e 5.26 representam os resultados obtidos para o termo fonte radiante.

Diferentemente do caso anterior, o fluxo de calor por radiação não é zero na região mediana entre as placas, apesar de apresentar um perfil de temperatura simétrico como no caso 1. Isto ocorre pelo perfil assimétrico de concentração que contribuiu para uma melhor transferência de calor na parede esquerda devido a maior concentração de espécies químicas nesta região.

Os erros estão organizados na Tabela 5.4 para as diferentes pressões parciais e distâncias entre placas adotadas.

Assim como o fluxo de calor o erro máximo para termo fonte radiante também é deslocado para a esquerda. Da mesma forma que no caso 1, observa-se que, ao aumentar a razão das pressões parciais, o erro tende a diminuir sensivelmente.

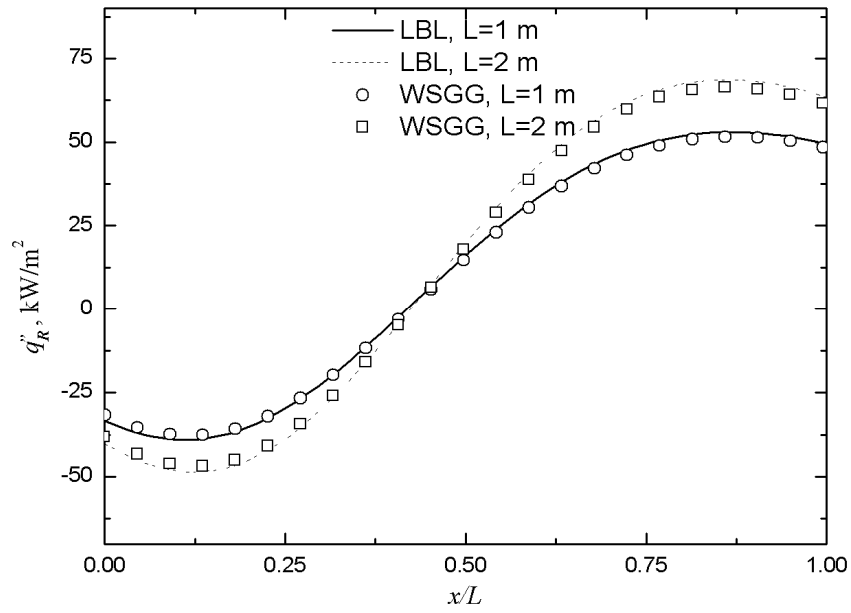


Figura 5.23 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

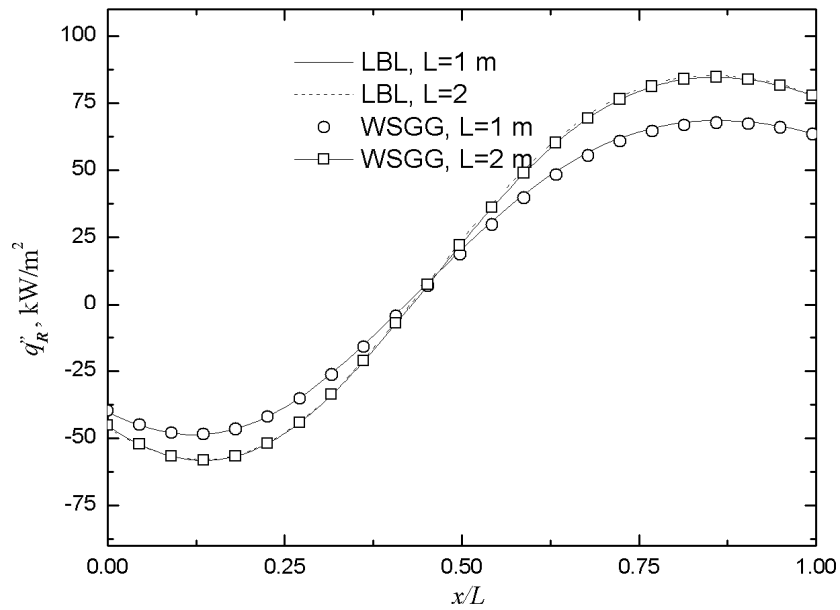


Figura 5.24 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

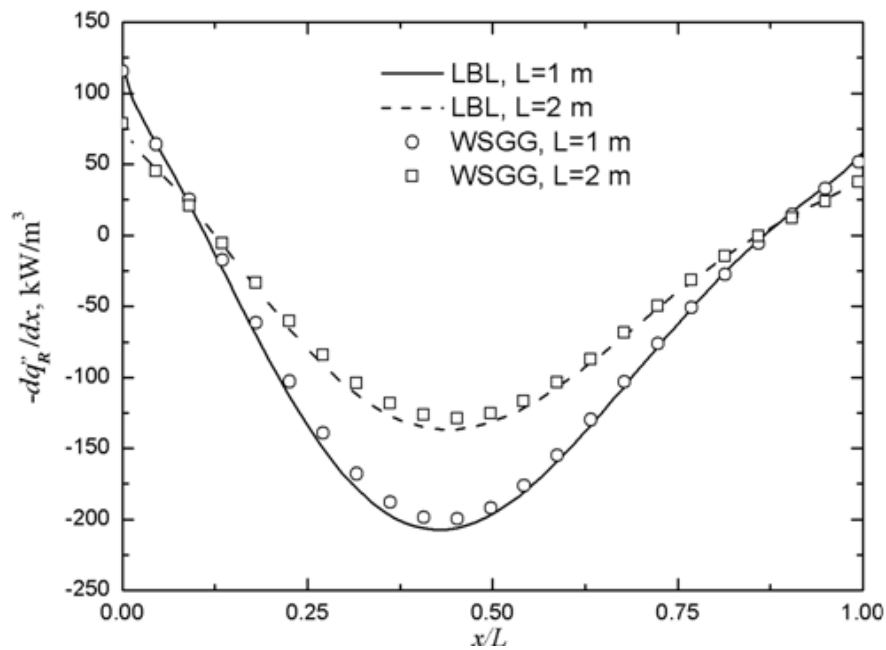


Figura 5.25 – Resultados para termo fonte obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

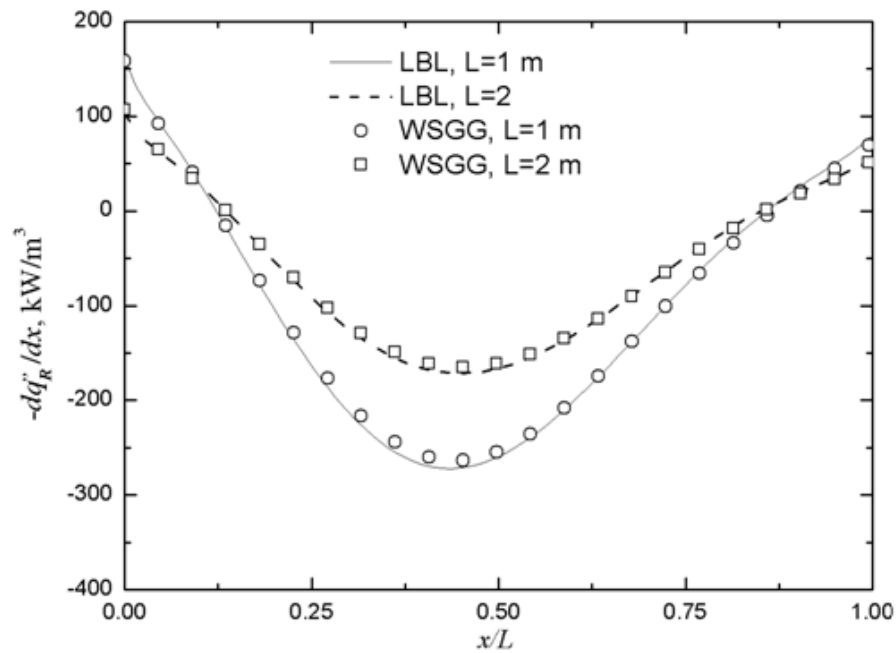


Figura 5.26 – Resultados para termo fonte obtidos com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para e $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

Tabela 5.4 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com a solução LBL (*benchmark*).

| Avaliação do erro no cálculo do termo fonte radiante | | | | | |
|--|---------------------|---------------------|-------|-------|---------------------------|
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | δ_{\max} (%) | x/L | T (K) | δ_{med} (%) |
| 1 | 1 | 4,84% | 0,24 | 1377 | 2,10% |
| 2 | 1 | 5,65% | 0,38 | 1551 | 2,15% |
| 1 | 2 | 3,32% | 0,35 | 1524 | 1,49% |
| 2 | 2 | 2,94% | 0,41 | 1575 | 1,32% |
| Avaliação do erro no cálculo do fluxo de calor por radiação | | | | | |
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | γ_{\max} (%) | x/L | T (K) | γ_{med} (%) |
| 1 | 1 | 3,62% | 0,045 | 938 | 2,59% |
| 2 | 1 | 4,15% | 0,814 | 1284 | 2,97% |
| 1 | 2 | 2,74% | 0,655 | 1520 | 1,65% |
| 2 | 2 | 2,43% | 0,608 | 1562 | 1,29% |

5.3.3 Caso 3

Como no caso anterior, neste é considerado um meio não homogêneo e não isotérmico entre as placas. Os perfis de temperaturas adotados são mesmo da seção 5.2 representados pela Eq (5.3) e reescrita abaixo.

$$T(x) = 400K + (1400K) \text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right)^2 \quad (5.3)$$

As razões de pressão parcial avaliadas são iguais a 1 e 2 e descritas pela Eq (5.8), reescrita abaixo, para todos os perfis de temperatura apresentados anteriormente.

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,133 + 0,1 \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) \quad (5.8)$$

São adotadas distâncias entre placas de 0,5 m, 1,0 m e 2,0 m a fim de avaliar a influência deste parâmetro sobre os resultados obtidos com o modelo WSGG. As Figuras 5.27 e 5.28 apresentam os resultados para o fluxo de calor radiante para razões de pressões parciais de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e 2 respectivamente.

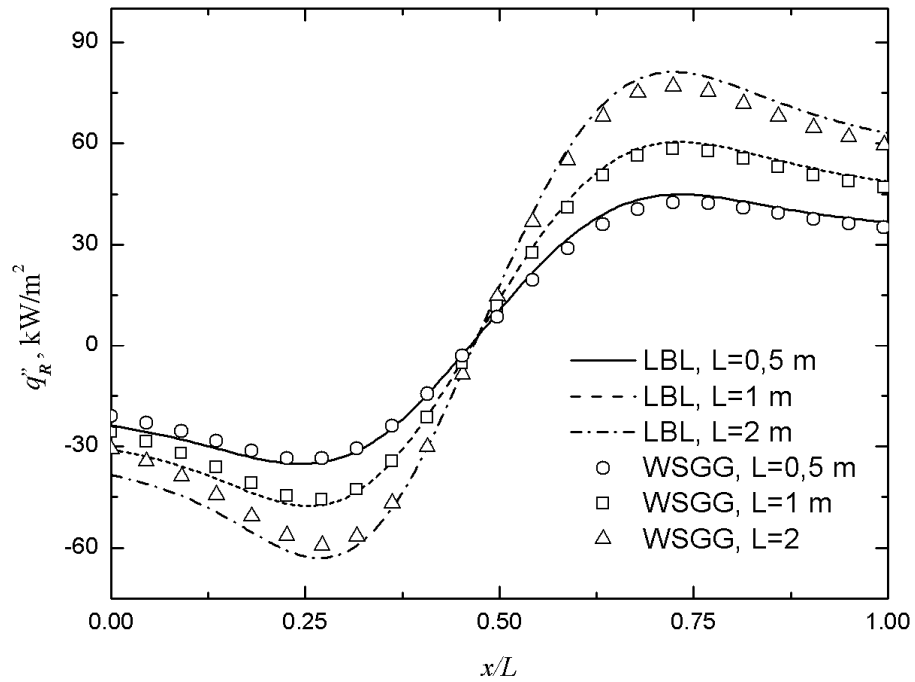


Figura 5.27 – Resultados para o fluxo de calor radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

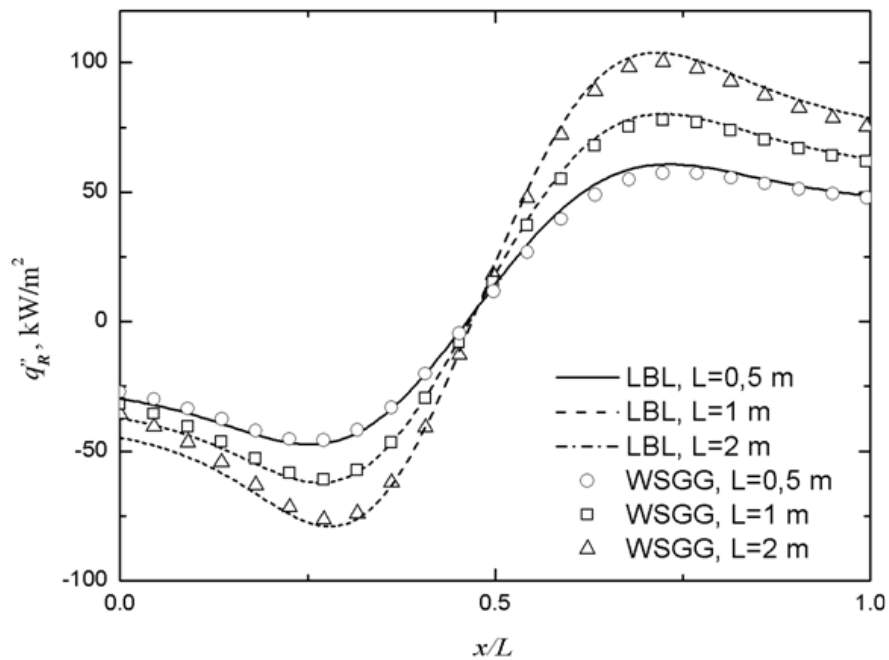


Figura 5.28 – Resultados para o fluxo de calor por radiação obtido com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

As Figuras 5.29 e 5.30 apresentam os resultados para o termo fonte radiante para razões de pressões parciais de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e 2 respectivamente.

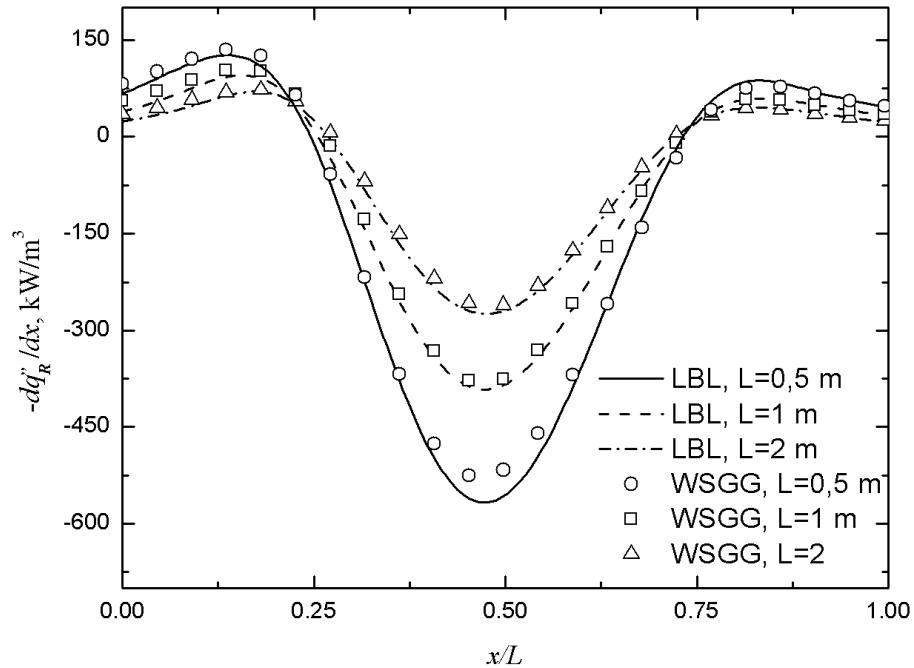


Figura 5.29 - Resultados para o termo fonte radiante obtido com o modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

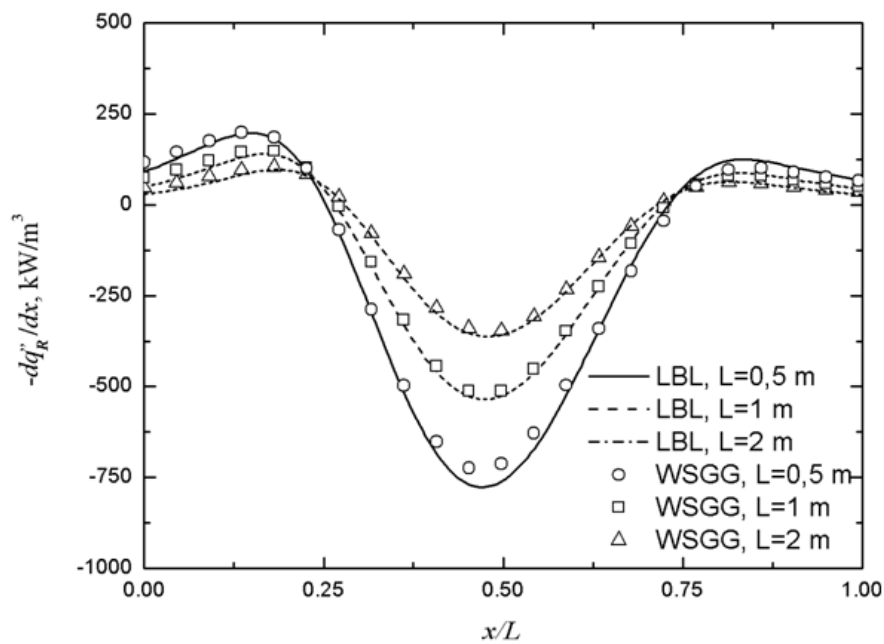


Figura 5.30 - Resultados para o termo fonte radiante obtidos através da solução LBL e comparados com o método WSGG para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$

Para esta configuração, foi observado um erro máximo de 7,76% para o divergente do fluxo radiante na região mediana entre placas e para o comprimento $L = 0,5$ m. Ao se aumentar a distância entre placas, observou-se o deslocamento do erro máximo para a esquerda em $x/L = 0,27$ para $L = 1,0$ m e $x/L = 0,36$ para $L = 2$ m, onde a concentração de espécies participantes é maior.

Apesar de em alguns casos os erros máximos locais apresentarem valores relativamente altos, na média, erros apresentados são relativamente pequenos atestando a confiabilidade do modelo WSGG para a condição de concentração e temperatura não uniforme.

Tabela 5.5 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (*benchmark*).

| Avaliação do erro no cálculo do termo fonte radiante | | | | | |
|--|---------------------|-------------------|-------|---------|-------------------|
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | δ max. (%) | x/L | T (K) | δ med. (%) |
| 0,5 | 1 | 7,76% | 0,502 | 1799,9 | 2,75% |
| 1 | 1 | 4,76% | 0,276 | 1215,5 | 1,97% |
| 2 | 1 | 5,30% | 0,362 | 1552,3 | 2,29% |
| 0,5 | 2 | 6,22% | 0,502 | 1799,9 | 2,53% |
| 1 | 2 | 4,56% | 0,015 | 403,14 | 1,91% |
| 2 | 2 | 5,61% | 0,337 | 1462,68 | 2,13% |
| Avaliação do erro no cálculo do fluxo de calor por radiação | | | | | |
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | γ max.(%) | x/L | T (K) | γ med. (%) |
| 0,5 | 1 | 6,55% | 0,633 | 1568 | 3,91% |
| 1 | 1 | 8,56% | 0 | 400 | 3,40% |
| 2 | 1 | 9,36% | 0 | 400 | 4,57% |
| 0,5 | 2 | 6,57% | 0,638 | 1535 | 3,14% |
| 1 | 2 | 6,75% | 0 | 400 | 2,47% |
| 2 | 2 | 8,52% | 0 | 400 | 3,15% |

5.3.4 Caso 4

As Figuras 5.29 a 5.32 mostram a comparação entre as soluções através do WSGG e da integração LBL para o perfil de temperatura descrito pela Eq.(5.4). A Eq. (5.8) descrevem

os perfis de concentração de H_2O e CO_2 sendo que para a razão $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ a Eq. 5.8 multiplicada por dois para P_{H_2O}

$$T(x) = 400K + (1400K) \text{sen}\left(\frac{2\pi x}{L}\right)^2 \quad (5.4)$$

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,133 + 0,1 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.8)$$

Pela observação das Figuras 5.33 e 5.34 e comparando com a Figura 5.14 pode-se perceber a contribuição da concentração das espécies química para o termo fonte radiante.

Verifica-se que, para essas configurações, os erros máximos não se alteram significativamente com o aumento da distância entre placas e da razão das pressões parciais. Também é possível perceber que, para a distância entre placas iguais a 0,5 m, o erro máximo é de 6,38% para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e de 5,71% para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$ ambas localizadas na posição $x/L = 0,246$. Os demais casos estudados apresentaram seus erros máximos próximos à meia distância entre placas.

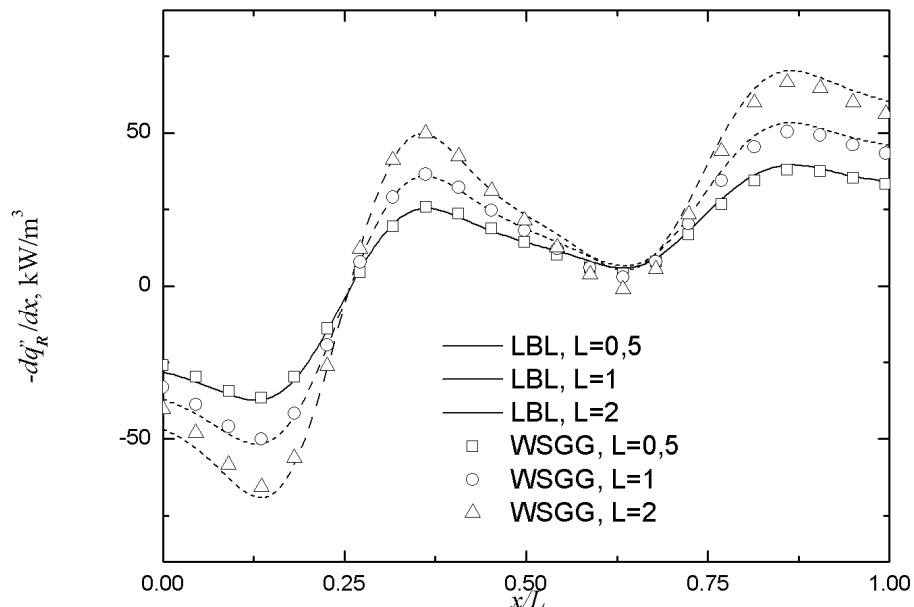


Figura 5.31 – Comparação dos resultados para o fluxo de calor por radiação do modelo WSGG com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

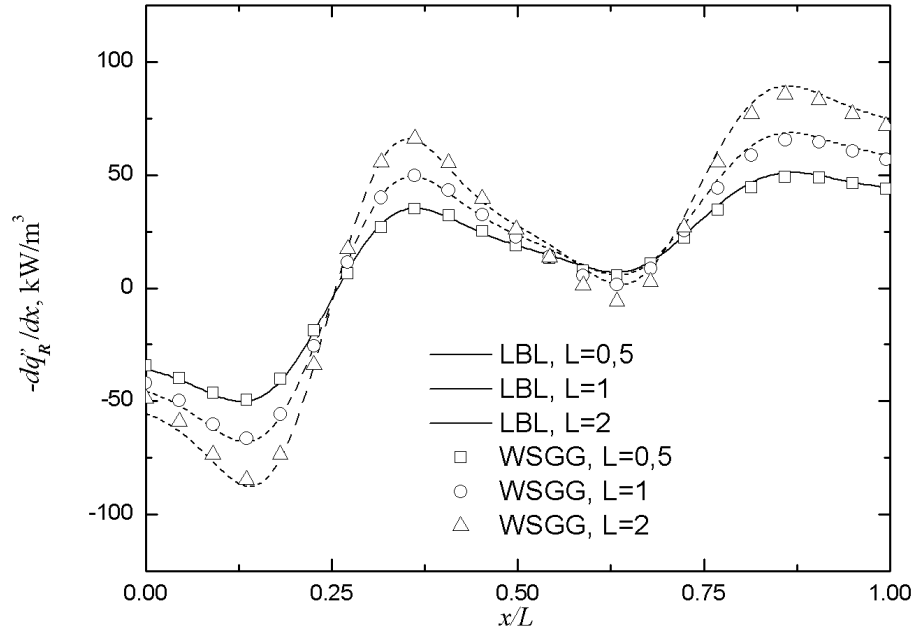


Figura 5.32 Comparação dos resultados para o fluxo de calor por radiação do modelo WSGG com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

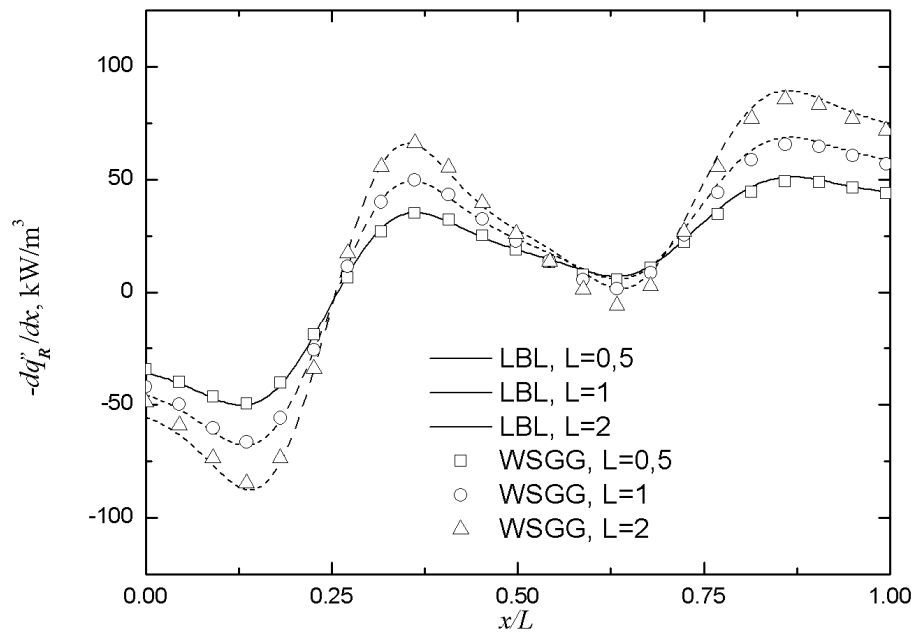


Figura 5.33 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

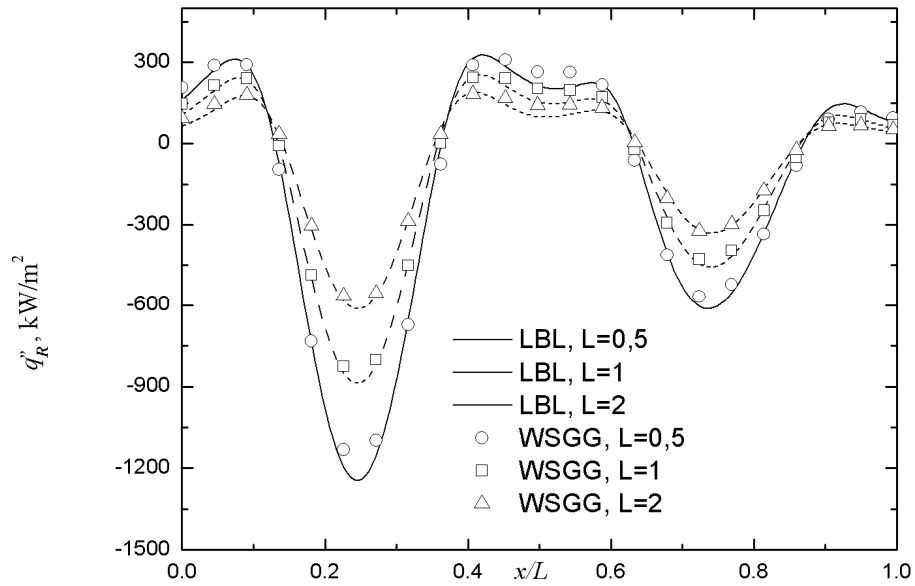


Figura 5.34 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados com a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

Tabela 5.6 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (*benchmark*).

| Avaliação do erro no cálculo termo fonte radiante | | | | | |
|--|---------------------|---------------------|-------|--------|---------------------------|
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | δ_{\max} (%) | x/L | T (K) | δ_{med} (%) |
| 0,5 | 1 | 6,38% | 0,246 | 1800 | 2,76% |
| 1 | 1 | 5,04% | 0,543 | 498 | 2,30% |
| 2 | 1 | 5,95% | 0,502 | 400 | 2,08% |
| 0,5 | 2 | 5,71% | 0,246 | 1799 | 2,42% |
| 1 | 2 | 5,77% | 0,507 | 403,14 | 2,17% |
| 2 | 2 | 6,97% | 0,507 | 403,14 | 2,24% |
| Avaliação do erro no cálculo do fluxo de calor por radiação | | | | | |
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | γ_{\max} (%) | x/L | T (K) | γ_{med} (%) |
| 0,5 | 1 | 5,68% | 0,598 | 866,94 | 2,76% |
| 1 | 1 | 7,30% | 0 | 400 | 3,70% |
| 2 | 1 | 9,19% | 0 | 400 | 4,55% |
| 0,5 | 2 | 4,53% | 0,809 | 1616 | 2,09% |
| 1 | 2 | 7,10% | 0,608 | 909 | 3,08% |
| 2 | 2 | 8,92% | 0,608 | 952 | 3,83% |

5.3.5 Caso 5

As figuras que seguem confrontam os resultados obtidos com o modelo WSGG em comparação com a solução LBL. A Eq. (5.5), reescrita abaixo, descreve o perfil de temperatura enquanto que a Eq. (5.8) descreve as pressões parciais de H_2O e CO_2

$$T(x) = \begin{cases} 920K + (880K) \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)^2 & \text{se } x \leq L/4 \\ 1100K + (700K) \cos\left(\frac{4x}{L} - 1\right) & \text{se } x > L/4 \end{cases} \quad (5.5)$$

$$P_{CO_2}(x) = P_{H_2O}(x) = -0,133 + 0,1 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.8)$$

São gerados resultados para distâncias L iguais a 0,5 m, 1,0 m e 2,0 m a fim de avaliar a influência desse parâmetro sobre os resultados obtidos com o modelo WSGG. Também são avaliados os resultados para proporções de pressões parciais iguais a $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e 2.

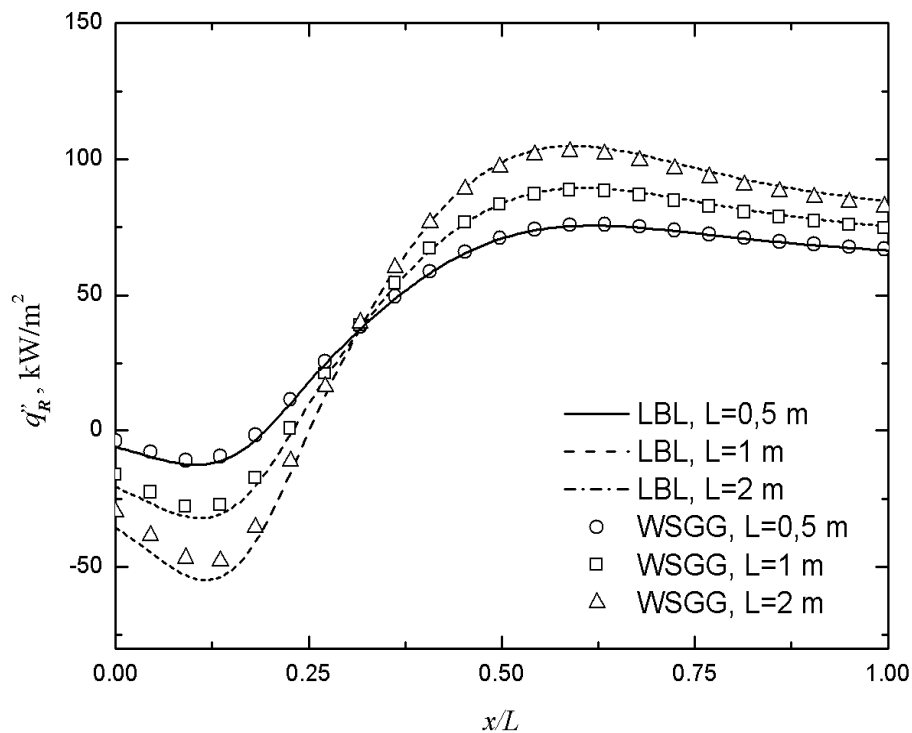


Figura 5.35 – Resultados para o fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

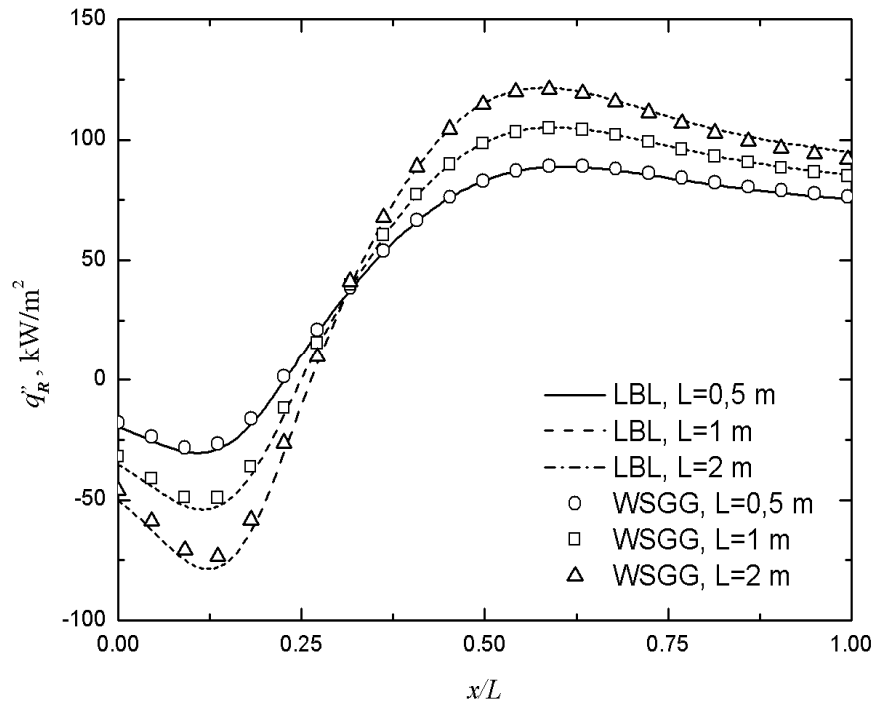


Figura 5.36 – Resultados para o fluxo de calor por radiação obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

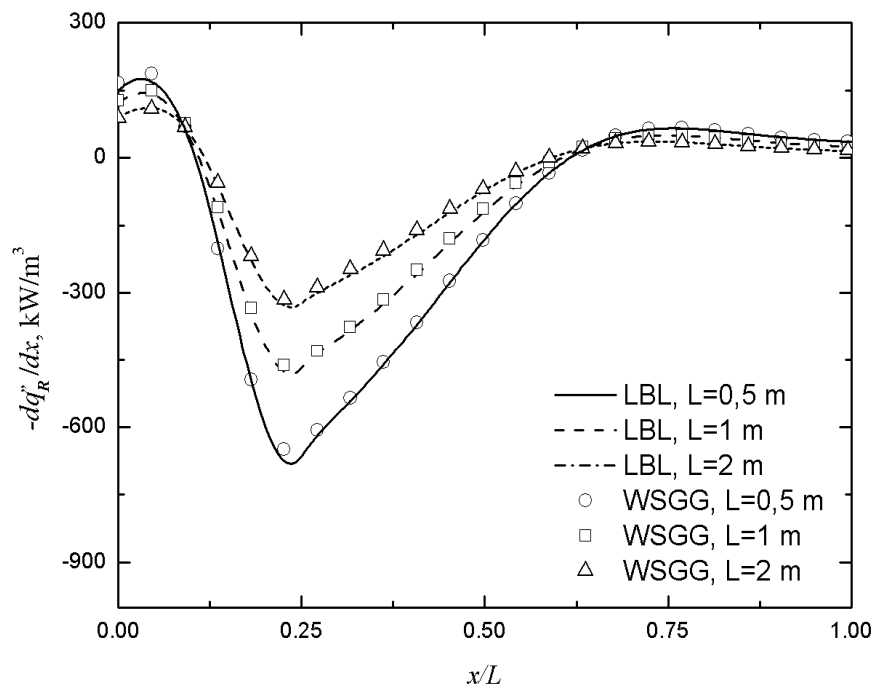


Figura 5.37 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$.

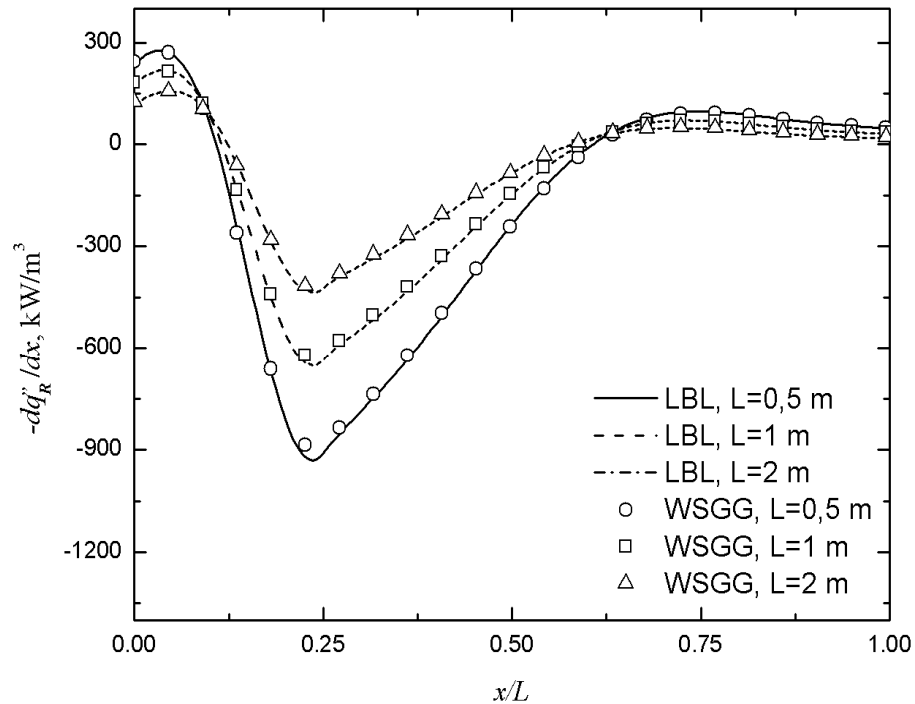


Figura 5.38 – Resultados para o termo fonte radiante obtidos através do modelo WSGG e comparados a solução LBL para $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$.

Tabela 5.7 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (*benchmark*).

| Avaliação do erro no cálculo do termo fonte radiante | | | | | |
|--|---------------------|---------------------|-------|-------|---------------------------|
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | δ_{\max} (%) | x/L | T (K) | δ_{med} (%) |
| 0,5 | 1 | 3,78% | 0,231 | 1787 | 0,84% |
| 1 | 1 | 3,18% | 0,231 | 1787 | 1,21% |
| 2 | 1 | 4,04% | 0,241 | 1797 | 1,36% |
| 0,5 | 2 | 3,81% | 0,231 | 1787 | 0,88% |
| 1 | 2 | 3,23% | 0,231 | 1787 | 0,83% |
| 2 | 2 | 2,84% | 0,241 | 1797 | 1,08% |
| Avaliação do erro no cálculo do fluxo de calor por radiação | | | | | |
| L | P_{H_2O}/P_{CO_2} | γ_{\max} (%) | x/L | T (K) | γ_{med} (%) |
| 0,5 | 1 | 2,97% | 0,814 | 630 | 1,03% |
| 1 | 1 | 4,94% | 0,743 | 795 | 1,74% |
| 2 | 1 | 5,81% | 1 | 402 | 2,71% |
| 0,5 | 2 | 2,63% | 0,507 | 1441 | 1,15% |
| 1 | 2 | 3,44% | 1 | 402 | 1,18% |
| 2 | 2 | 3,88% | 1 | 402 | 1,68 % |

Os resultados obtidos com o modelo WSGG para o divergente apresentaram uma concordância satisfatória com a solução LBL. O erro máximo observado foi de 4,04% para o caso com proporção de pressão parcial $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1$ e distância entre placas $L = 2$ m. Em todos os casos estudados com este perfil de temperatura os erros máximos concordam em com as máximas temperaturas.

5.4 Perfis de temperatura e de pressão parcial obtidos de uma câmara cilíndrica

Uma vez que grande parte da motivação para o estudo da transferência de calor por radiação em meios participantes advém de processos de combustão em fornalhas, o presente trabalho estende a análise para perfis de temperatura e pressões parciais advindas da simulação da combustão de metano em uma cavidade cilíndrica. Os perfis foram baseados nos encontrados em uma câmara de combustão típica, para a qual Centeno et. al, 2012, apresentaram a solução para o problema da transferência de calor através de procedimentos de cálculo interativo que envolveram a combustão, convecção e radiação.

Os perfis de temperatura e pressão advêm de cortes no eixo de simetria da câmara e de cortes radiais a uma distância de 0,312 m, 0,912m e 1,312m no eixo de simetria conforme Figura 5.39.

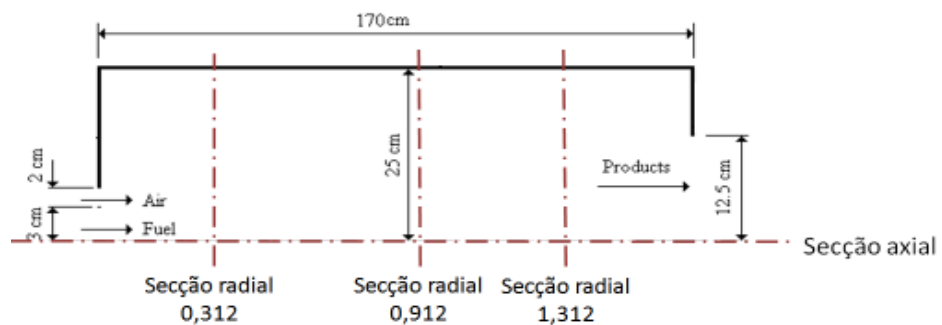


Figura 5.39 – Câmara de combustão com os respectivos cortes onde foram obtidos os perfis de temperatura e pressões parciais.

5.4.1 Seção axial

A Fig. 5.40 apresenta o corte axial do campo de temperatura, enquanto que, na Figura 5.41 representa as pressões parciais do dióxido de carbono e do vapor da água. É interessante ressaltar que a proporção de pressão parcial ao longo do trajeto assume valores que vão desde

$P_{H_2O}/P_{CO_2} = 1,86$ a $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 65,24$ tendo como valor médio a proporção de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 8,1$. Apesar dos coeficientes do modelo WSGG terem sido obtidos para uma proporção máxima de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$, é conveniente avaliar a eficácia do método para condições em que essa razão não se mantém.

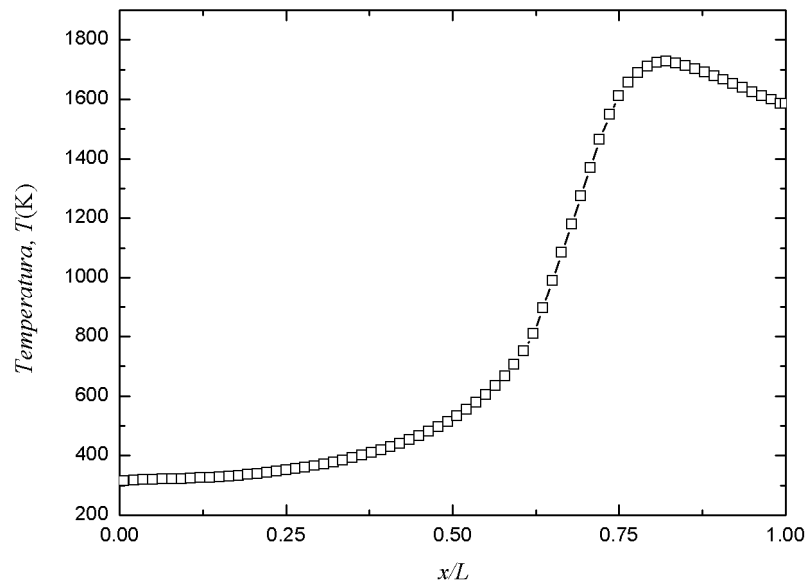


Figura 5.40 – Perfil de temperatura obtido para o corte axial na câmara de combustão estudada por Centeno et. al., 2012.

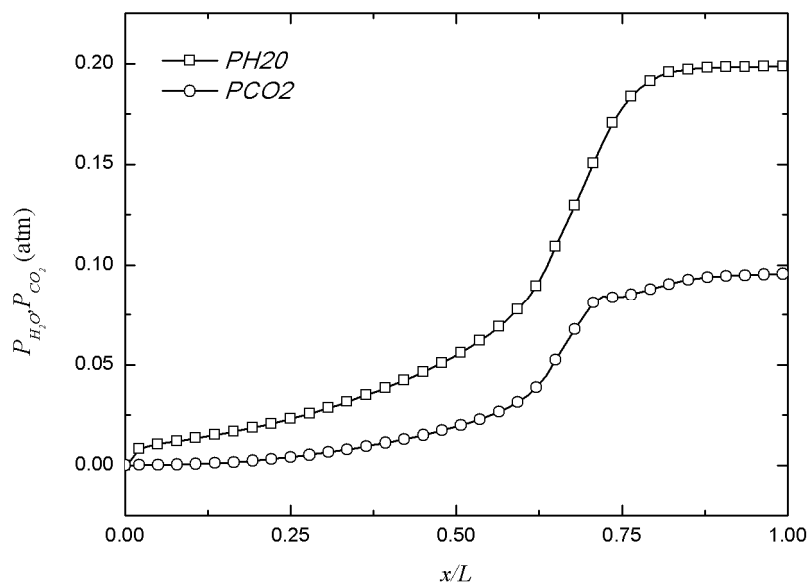


Figura 5.41 – Perfis para as pressões parciais de vapor da água e gás carbônico obtidos para o corte axial na câmara de combustão estudada por Centeno et. al., 2012.

Observa-se, na Figura 5.42 uma boa concordância de resultados para o fluxo de calor por radiação, em relação à solução LBL sendo que o erro máximo obtido com esse perfil foi de 6,49% e o erro médio de 2,32%. Os resultados para o fluxo de calor entre os dois modelos apresentando um erro máximo de 4,3% e um erro médio de 4,3%.

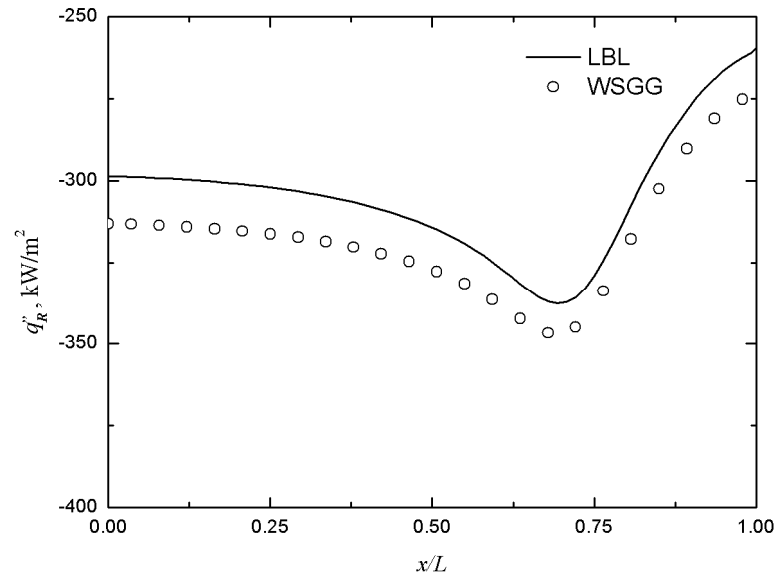


Figura 5.42 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção axial da câmara de combustão.

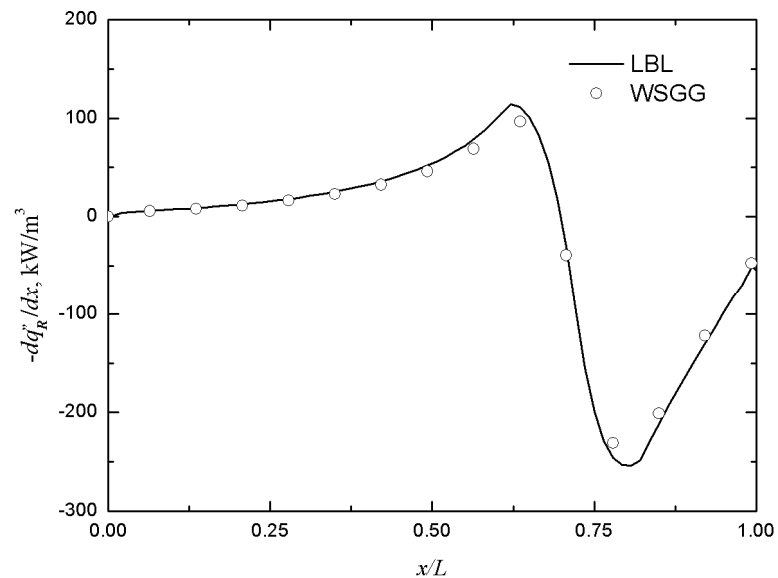


Figura 5.43 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção axial da câmara de combustão.

5.4.2 Secção radial a uma distância axial de 0,312 m

A proporção de pressão parcial média obtida para o corte radial a uma distância axial de 0,312 m é de 3,23 e atinge um valor máximo de 8,34 na região central da câmara $x/L = 0$. Por limitação do modelo WSGG, são utilizados os coeficientes para a razão entre as pressões parciais $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. As Figura 5.42 representa a variação de temperatura ao longo do caminho enquanto que a Figura 5.43 representa as pressões parciais das espécies químicas.

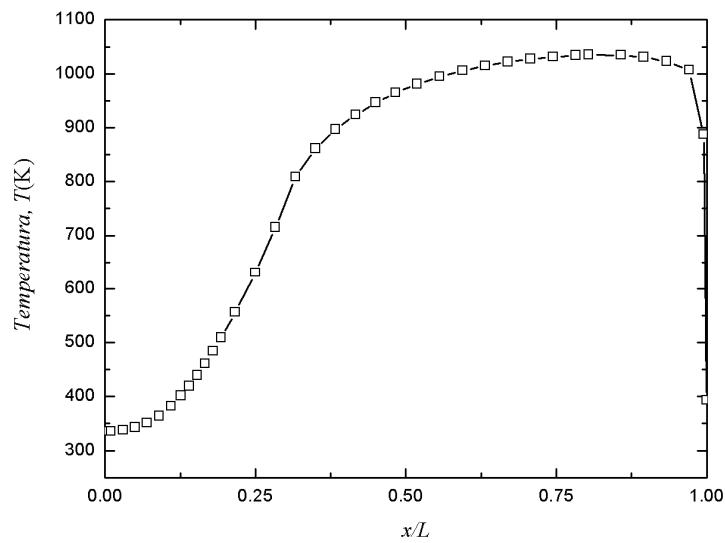


Figura 5.44 – Perfil de temperatura obtido através do corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,312 m.

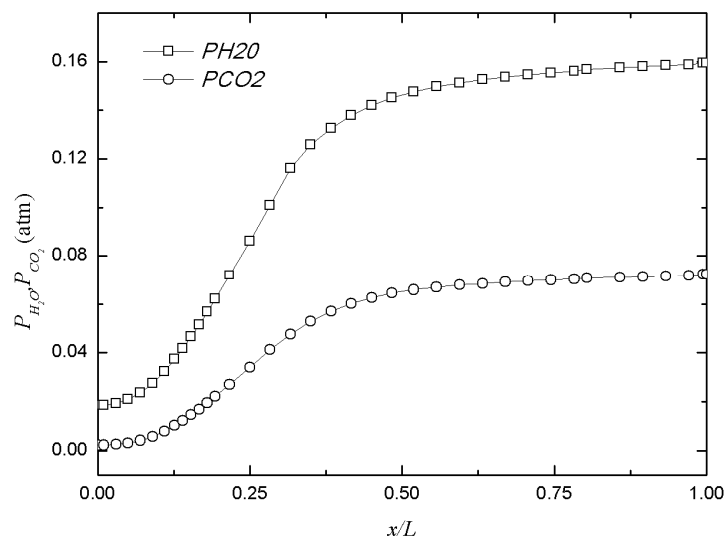


Figura 5.45 – Perfis de pressões parciais de CO_2 e H_2O no corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,312 m.

Pela avaliação da Figura 5.46 fica claro que o fluxo de calor por radiação é positivo a uma distância $x/L=0,75$, indicando que o ganho da radiação a partir das regiões maiores temperaturas do meio supera a perda de radiação. A Figura 5.47 mostra que o termo fonte radiante é negativo a uma distância $x/L=0,25$, por isso o ganho de energia radiativa é menor do que a perda nessa localização.

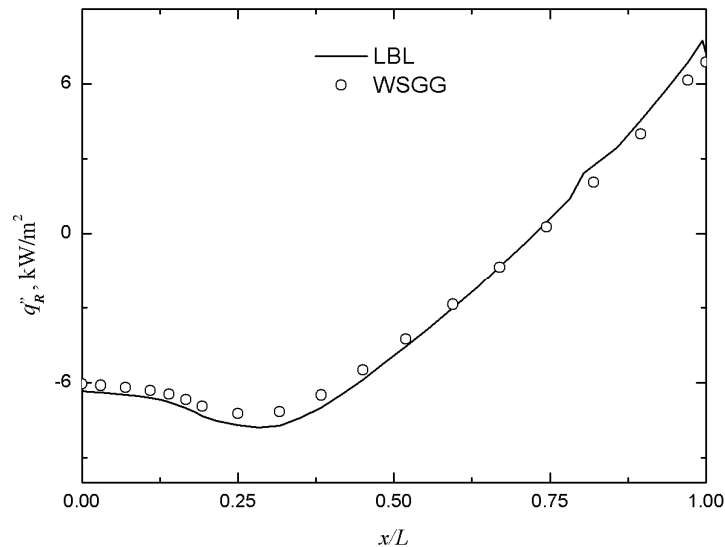


Figura 5.46 – Comparação dos resultados do fluxo de calor por radiação para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,312 m da câmara de combustão.

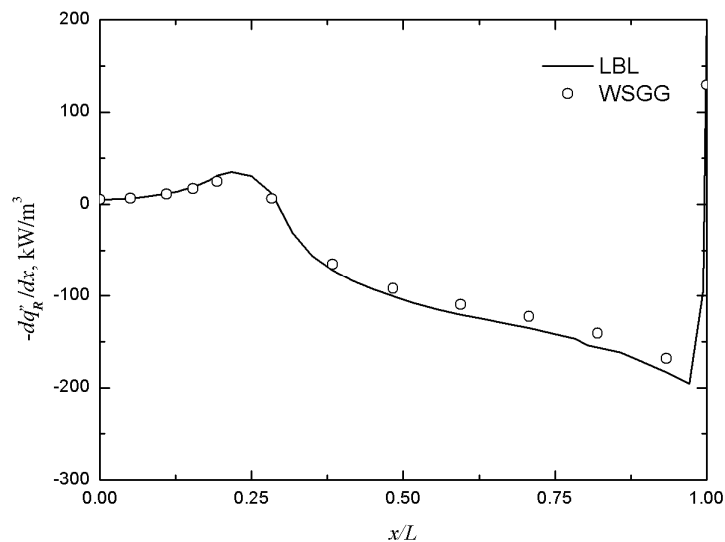


Figura 5.47 – Comparação dos resultados do termo fonte radiante para o modelo WSGG com relação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,312 m da câmara de combustão.

Os resultados obtidos apresentaram uma boa concordância em relação à solução LBL, tanto para o divergente do fluxo radiante, como para o fluxo de calor. Os erros médios obtidos com estes perfis foram de 4,41% para o divergente e 4,58% para o fluxo de calor.

O erro máximo para o divergente apresenta um valor considerável, porém pontual, de 8,98 % a uma distância $x/L=1$, provavelmente ocasionado pela queda brusca de temperatura verificada nesta região. O erro máximo encontrado para o fluxo de calor é de 9,64%, o que está dentro do esperado para a situação avaliada.

5.4.3 Seção radial a uma distância axial de 0,912 m

Os perfis de temperatura e de pressões parciais das espécies químicas desta seção são bem semelhantes aos obtidos a distância axial 0,312 m, porém com maior variação entre as temperaturas mínima e máxima. Os valores de pressões parciais também são maiores do que no caso anterior.

A máxima razão de pressão parcial deste perfil é $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2,71$ e a razão média é de $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2,35$, portanto os coeficientes utilizados para obter os resultados são para a razão de pressão parcial igual a $P_{H_2O}/P_{CO_2} = 2$. A Fig. 5.48 e 5.49 apresenta os perfis de temperatura e concentração parcial da seção radial estudada respectivamente.

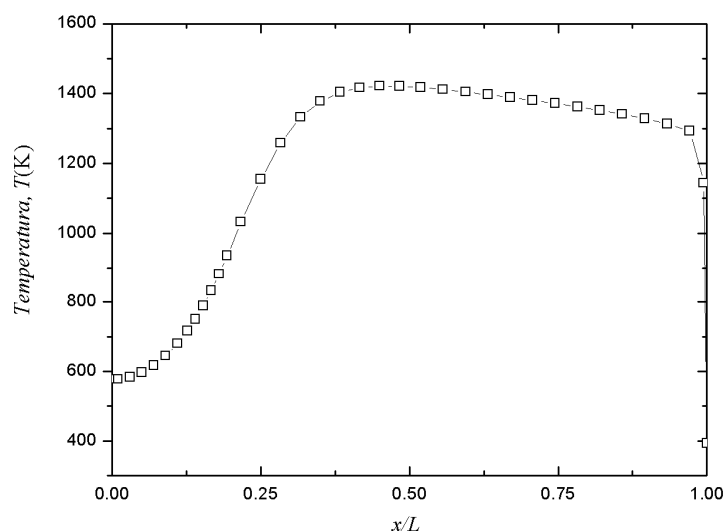


Figura 5.48 – Perfil de temperatura obtido em um corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,912 m.

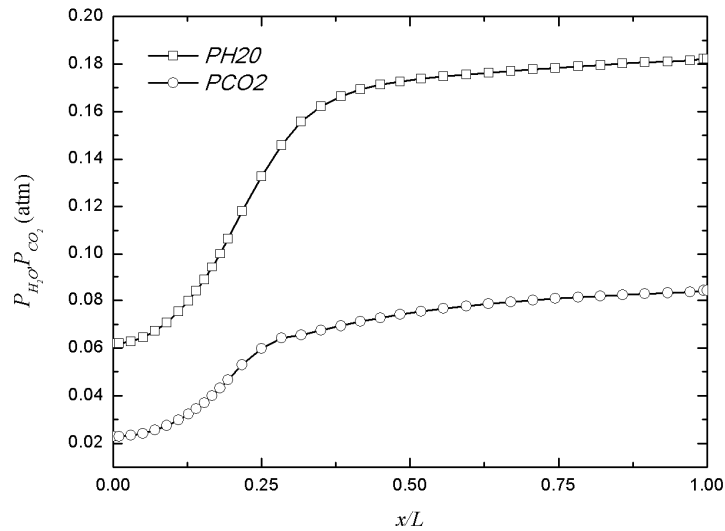


Figura 5.49 – Perfis das pressões parciais de CO_2 e H_2O em um corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 0,912 m.

Próximo ao centro da câmara até uma distância $x/L = 0,25$, onde as temperaturas são mais amenas, a perda de energia é maior do que o ganho, como pode ser percebido na Figura 5.50. O fluxo de calor até este ponto decai para então começar a subir de forma aproximadamente linear. Com este aumento linear no fluxo radiante, decorre que o divergente se mantém aproximadamente constante deste $x/L = 0,325$ até próximo à parede da câmara.

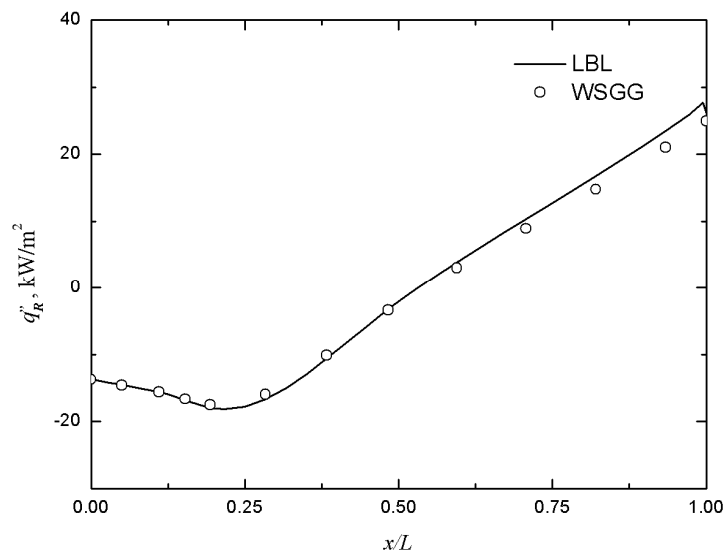


Figura 5.50 – Resultados para o fluxo de calor por radiação do modelo WSGG em comparação a solução LBL para a seção radial a uma distância axial de 0,912m da câmara de combustão.

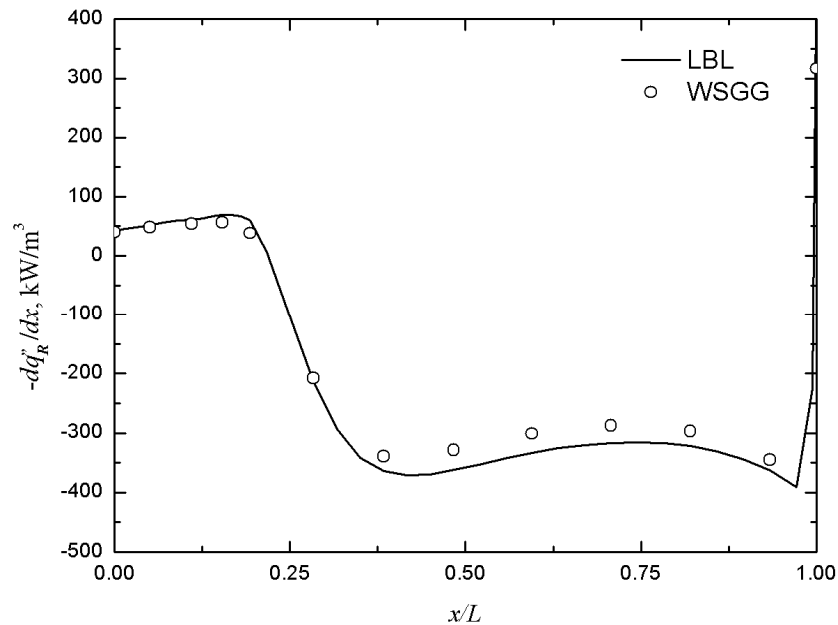


Figura 5.51 –Resultados para o termo fonte radiante do modelo WSGG em comparação a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 0,912m da câmara de combustão.

Como esperado, os erros máximos, tanto para o fluxo com 6,03 %, quanto para o divergente com 6,39%, ocorreram próximo à parede da câmara, $x/L=1$, onde a temperatura apresenta uma queda brusca, como pode ser percebido na Figura 5.48. O erro médio por sua vez ficou na ordem dos 3,63% para o fluxo e 3,39% para o divergente.

5.4.4 Secção radial a uma distância axial de 1,312 m

O perfil de temperatura no final da câmara de combustão apresenta um perfil mais homogêneo, com temperatura média em torno de 1561 K e máxima de 1750 K. As pressões parciais e de CO₂ e H₂O também variam pouco ao longo da câmara com médias de 0,09 e 0,19 atm respectivamente. As Figuras 5.52 e 5.53 representam o perfil de temperatura e pressão parcial das espécies químicas respectivamente.

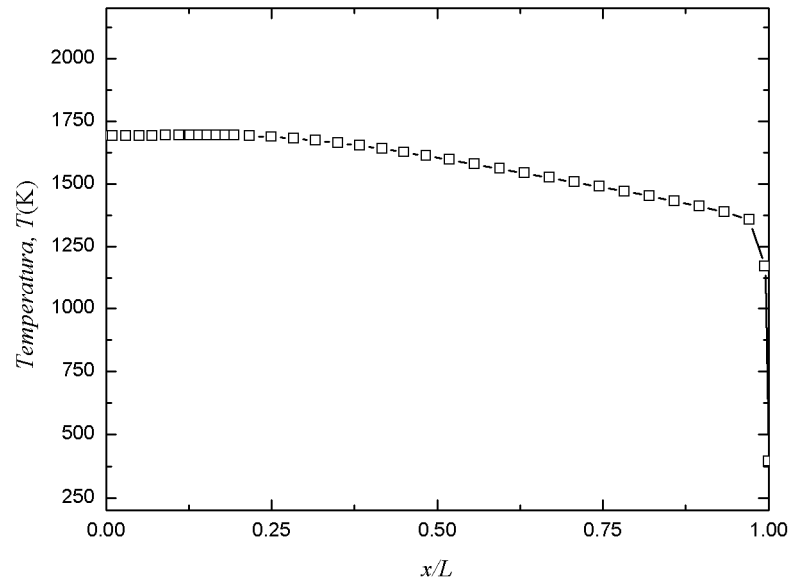


Figura 5.52 – Corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 1,312 m para o perfil de temperatura.

Como esperado para este caso, o método WSGG apresentou um bom comportamento com relação aos valores obtidos tanto para o fluxo de calor, quanto para o divergente. Os erros máximos e médios ficaram em torno de 4,36 % e 3,73% para o fluxo de calor, e de 3,38% e 2,3% para os erros máximo e médio do divergente do fluxo radiante.

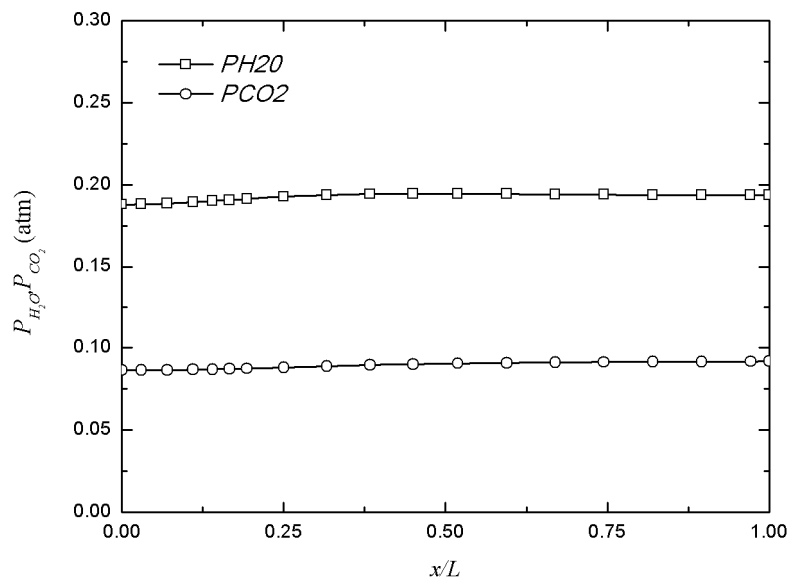


Figura 5.53 – Corte radial na câmara de combustão a uma distância axial de 1,312 m para os perfis das pressões parciais de CO₂ e H₂O.

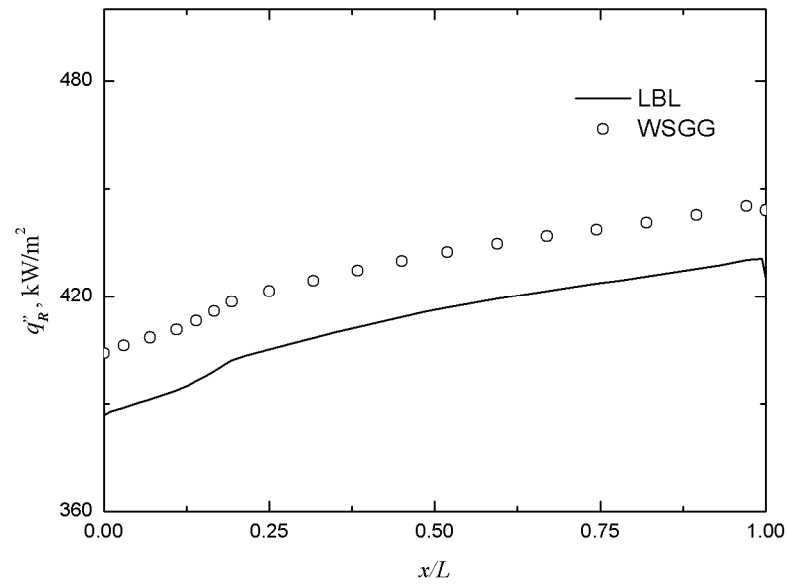


Figura 5.54 – Resultados do fluxo de calor por radiação com o modelo WSGG comparado a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 1,312 m da câmara de combustão.

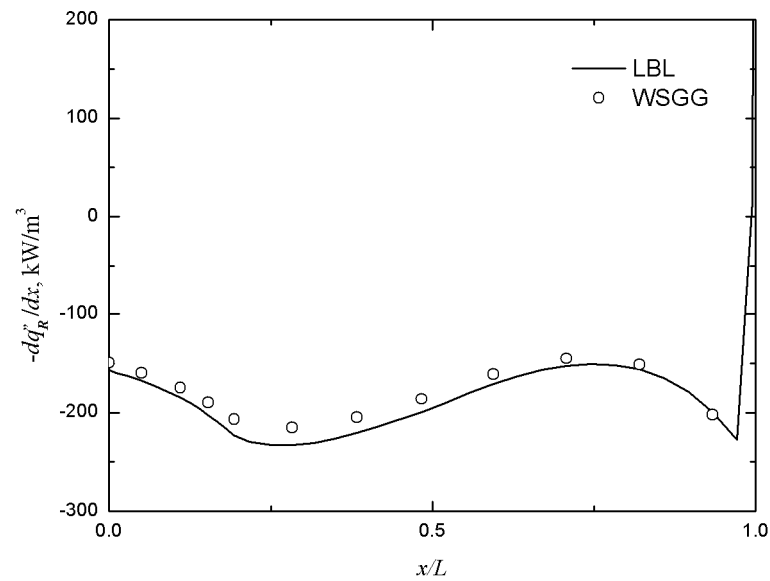


Figura 5.55 – Resultados do termo fonte radiante com modelo WSGG e comparado a solução LBL para a secção radial a uma distância axial de 1,312 m da câmara de combustão.

A Tabela 5.8 apresenta os erros médios e máximos para o divergente bem como a localização de sua ocorrência.

Tabela 5.8 – Erros médios e máximos obtidos pela solução WSGG quando comparados com o LBL (*benchmark*) das seções da câmara estudada.

| Avaliação do erro no cálculo do divergente do fluxo radiante | | | | | |
|---|-----------------------------|--------------------|--------|--------|--------------------|
| <i>SECÇÃO</i> | $(P_{H_2O}/P_{CO_2})_{med}$ | δ_{max} (%) | x/L | T (K) | δ_{med} (%) |
| AXIAL | 2,29 | 6,49% | 0,6212 | 808,6 | 2,32% |
| RADIAL A 0,312 | 2,23 | 8,98% | 1 | 393,15 | 4,41% |
| RADIAL A 0,912 | 2,35 | 6,39% | 1 | 393,15 | 4,39% |
| RADIAL A 1,312 | 2,16 | 3,38% | 1 | 393,15 | 2,30% |
| Avaliação do erro no cálculo do fluxo de calor por radiação | | | | | |
| Equação | $(P_{H_2O}/P_{CO_2})_{med}$ | γ_{max} (%) | x/L | T (K) | γ_{med} (%) |
| AXIAL | 2,29 | 4,30% | 0,05 | 318,97 | 3,74% |
| RADIAL A 0,312 | 2,23 | 9,64% | 0,3167 | 808,68 | 4,58% |
| RADIAL A 0,912 | 2,35 | 6,03% | 0,9712 | 1292,4 | 3,63% |
| RADIAL A 1,312 | 2,16 | 4,36% | 1,000 | 1386,4 | 3,73% |

O modelo WSGG se mostrou apropriado para resolver perfis de temperatura e concentração de espécies químicas comumente encontradas em problemas de engenharia. Apesar de alguns erros locais atingirem 8,98% para o divergente do fluxo radiante e de 9,64% para o fluxo de calor por radiação os erros médios ficaram por volta de 4% atestando a confiabilidade do modelo.

6 CONCLUSÕES

A simulação computacional mostra-se uma importante ferramenta para o desenvolvimento de tecnologias mais eficientes e menos poluentes de combustão. Para uma melhor confiabilidade nessas simulações, a troca por radiação não pode ser negligenciada, devido as altas temperaturas envolvidas e a presença de gases participantes.

A solução LBL é o que apresenta os melhores resultados, pois considera a integração em todo espectro. Entretanto o grande esforço computacional exigido por este método inviabiliza sua aplicação em problemas de engenharia. No entanto, esta metodologia tem vital importância na validação de resultados obtidos com outros modelos, pois é utilizado como resultado *benchmark*.

Ao contrário do método de solução LBL o modelo WSGG é provavelmente o mais utilizado, por apresentar uma grande versatilidade computacional. Este modelo toma como base algumas hipóteses simplificativas. Uma delas é o modelamento espectral adotado, que

considera a emitância e absorptância sendo compostas pela soma de frações de emitância e absorptância de gases cinza, que possuem coeficientes de absorção invariáveis. Dessa forma as únicas variáveis envolvidas no problema são os pesos da contribuição de cada um dos gases cinzas que depende única e exclusivamente da temperatura do meio.

Com a atualização do banco de dados do HITEMP 2010, novos coeficientes para o modelo WSGG foram criados por Dorigon, 2012. Com a intenção de validar estes coeficientes, este trabalho utiliza uma variedade de perfis de temperatura e pressões parciais são avaliadas e os resultados são comparados com a solução LBL. Por fim, os perfis advindos de quatro secções de uma câmara de combustão são utilizados para validar a confiabilidade dos coeficientes próximos de condições reais de combustão.

Foram analisados os resultados para um sistema unidimensional formado por duas placas planas perfeitamente negras. O meio participante é uma mistura gasosa de dióxido de carbono e de vapor da água, por serem produtos típicos da combustão de gases e óleos combustíveis.

Primeiramente foi feita uma avaliação considerando meios isotérmicos e homogêneos, condição para a qual o modelo WSGG foi desenvolvido. Os resultados do fluxo radiante e do termo fonte foram comparados com o método linha por linha e foi considerado satisfatório para esta condição

Posteriormente foi introduzida a dificuldade da variação da temperatura ao longo de caminho. Os resultados concordam bem com os obtidos pela solução LBL sendo que o erro máximo encontrado para os termos fonte radiante foi de 4,4%.

Um meio não homogêneo foi acrescentado aos cinco casos subsequentes. No entanto, a proporção entre as pressões parciais foi mantida constante ao longo do trajeto. Apesar de, em alguns casos, os erros máximos alcançarem valores em torno de 9% os erros médios verificados foram pequenos, atestando a confiabilidade do modelo.

Alterando-se a distância entre placas, não se verificou uma tendência do erro relacionada a ela, levando-se a concluir que esse fator não tem importância significativa sobre o erro.

Para os perfis obtidos através de secções da câmara de combustão cilíndrica, os resultados para o termo fonte e fluxo concordaram bem com os obtidos pela solução LBL. Os erros máximos ocorreram principalmente no início da câmara onde o gradiente de temperatura é mais acentuado. Os resultados apresentados pelo modelo WSGG surpreenderam, uma vez

que os coeficientes do modelo foram obtidos para pressões parciais distintas das utilizadas nos casos da câmara cilíndrica.

O trabalho mostrou que o WSGG se comporta muito bem em campos de temperatura e concentração não uniformes. Dessa forma, os coeficientes obtidos por Dorigon, 2012, podem ser usados para solução de problemas de engenharia, desde que respeitados alguns limites para proporção P_{H_2O}/P_{CO_2} e gradientes de temperatura não muito elevados.

6.1 Proposta de continuidade

Os desafios sugeridos para futuros trabalhos são:

- Testar o desempenho do modelo para outras condições, com mais perfis de temperatura e concentração advindos de câmaras de combustão.

- Utilizar os coeficientes obtidos por Dorigon, 2012, para simular uma câmara cilíndrica 2D e comparar o resultado com o LBL.

- Obter novos coeficientes para queima de outros produtos, que envolvam proporções diferentes das utilizadas neste trabalho.

- Realizar um estudo com relação à ordem do polinômio empregado, verificando sua independência com relação ao número de gases cinzas empregados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Al-Omari, S.A.B. On the sensitivity of soot and thermal radiation simulation results to the adopted PDF for temperature under highly sooting combustion conditions, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 33, p. 1273–1280, 2006.

Brittes, R.; Cassol, F; França F. H. R. Radiative heat transfer modeling with hitemp 2010 database using cw and slw methods, **14^o Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**. Rio de Janeiro - RJ, 2012.

Cassol, F; Brittes, R; França F. H. R. Ezekoye, O. A. Radiative heat transfer modeling using the cw and slw models in gas mixtures with soot, **Proceedings of the ASME 2012 International Mechanical Engineering Congress & Exposition**. Houston, Texas, USA. 2012 a.

Cassol, F; Brittes, R; França F. H. R. Soot particulate medium influence in radiation heat transfer using gray gas model, **14^o Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**. Rio de Janeiro - RJ, 2012 b.

Centeno, F. R.; França, F.H.R.; Cassol, F.; Silva, C.V. Evaluation of new wsgg model correlations on radiative source term in a 2d axisymmetric Turbulent diffusion flame, **14^o Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**. Rio de Janeiro - RJ, 2012.

Denison, M.K.; Webb B.W. A spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers, **Journal of Heat Transfer**, v. 115, p. 1004-1011, 1993a.

Denison, M.K.; Webb B.W. An absorption-line blackbody distribution function for efficient calculation of total gas radiative transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 50, p. 499-510, 1993b.

Denison, M.K.; Webb B.W. Development and application of an absorption-line blackbody distribution function for CO₂, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 38, p. 1813-1821, 1995a.

Denison, M.K.; Webb B.W. The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media, **Journal of Heat Transfer**, v. 117, p. 359-365, 1995b.

Denison, M.K.; Webb B.W. The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model for H₂O/CO₂ mixtures, **Journal of Heat Transfer**, v. 117, p. 788-792, 1995c.

Dorigon, L. J. Determinação dos coeficientes para o modelo da soma-poderada-dos-gases-cinzas a partir do banco de dados HITEMP 2010. Porto Alegre: **UFRGS/ Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica 2012**. Dissertação de mestrado.

Deshmukh, K.V.; Haworth, D.C.; Modest, M.F. Direct numerical simulation of turbulence–radiation interactions in homogeneous nonpremixed combustion systems, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 31, p. 1641-1648, 2007.

Galarça, M.M.; Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. Correlations for the Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model Using Data Generated From the Absorption-Line Blackbody Distribution Function, **12° Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**, Belo Horizonte-MG, 2008.

Galarça, M.M.; Mossi, A.; França, F.H.F. A Modification of the cumulative wavenumber method to compute the radiative heat flux in non-uniform media, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 112, p. 384-393, 2011.

Gamache, R.R.; Hawkins, R.L.; Rothman, L.S., Total internal partition sums in the temperature range 70–3000 K, Atmospheric linear molecules, **Journal of Molecular Spectroscopy**, v. 142, p. 205-219, 1990.

Hartmann, J.M.; Leon, R.L.; Taine, J. Line-by-line and Narrow-Band Statistical Model Calculations for H₂O, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 32, p. 119-127, 1983.

Hottel, H.C.; Sarofim, A.F. **Radiative Transfer**. McGraw-Hill Book Company, 1967.

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

Kangwanpongpan, T.; França F.H.R.; 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.

Killinger D, Plutov, D.V., Hitran-PC 4.0 – User Manual, University of South Florida, 2009. http://www.cas.usf.edu/lidarlab/hitran_pc.html, acessado em 29/01/2012.

Maurente, A. Método de Monte Carlo aplicado ao modelamento espectral de meios participantes através da utilização da função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção. Porto Alegre: **UFRGS/ Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica 2007**. Tese de doutorado.

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

Modest, M.F. The Weighted Sum of Gray Gas Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer, **Journal of Heat Transfer**, v. 113, p. 650-656, 1991.

Mossi, A. C. Modelagem da radiação térmica em chamas laminares da combustão de metano em ar. Porto Alegre: **UFRGS/ Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica 2011**. Tese de doutorado.

Narayanan, P.; Trouvé, A. Radiation-driven flame weakening effects in sooting turbulent diffusion flames, **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 32, p. 1481-1489, 2009.

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 and Radiative Transfer**, v. 111, p. 2130-2150, 2010.

Siegel, R.; Howell, J.R. **Thermal Radiation Heat Transfer**. Taylor & Francis, 4th edition, New York, 2002

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.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. A local-spectrum correlated model for radiative transfer in non-uniform gas media, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 73, p. 361-373, 2002.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. An efficient method for modeling radiative transfer in multicomponent gas mixtures with soot, **Journal of Heat Transfer**, v. 123, p. 450-457, 2001.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. SLW modeling of radiative transfer in multicomponent gas mixtures, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 65, p. 655-672, 2000.

Xue H.; Ho, J.C.; Cheng, Y.M. Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation, **Fire Safety Journal**, v. 36, p. 37-54, 2001.