

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

GERAÇÃO DE SOLUÇÕES *BENCHMARK* E AVALIAÇÃO DE MODELOS DE
RADIAÇÃO TÉRMICA EM PROCESSOS DE COMBUSTÃO

por

Fabiano Cassol

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, junho de 2013

GERAÇÃO DE SOLUÇÕES *BENCHMARK* E AVALIAÇÃO DE MODELOS DE
RADIAÇÃO TÉRMICA EM PROCESSOS DE COMBUSTÃO

por

Fabiano Cassol
Mestre em Engenharia

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Antônio José da Silva Neto, UERJ

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira, UFRGS

Profa. Dra. Maria Luiza Sperb Indrusiak, UNISINOS

Prof. Dr. Rogério José Marczac
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 20 de junho de 2013

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, Francis França, que sempre possui boas ideias, grandes conselhos e proporciona ótimas oportunidades.

Agradeço aos colegas do GESTE, Rogério Brittes em primeiro lugar, depois agradeço na ordem do mais próximo até aquele que só diz “e ae” no corredor. Um “viva!” aos entusiastas da turbulência.

Agradeço a toda família, que, mesmo sem entender do que se trata o assunto da tese, sempre perguntou como está o trabalho.

Ao pessoal do Texas pela receptividade. Aos colegas da UT Austin, ao Dr. Ezekoye, ao Dr. Overholt. *Never stray too far from Texas in your heart.*

Todos os amigos, que direta ou indiretamente contribuem significativamente.

Agradeço ao CNPq pela bolsa de doutorado e a CAPES pela bolsa de doutorado sanduíche.

RESUMO

Em processos de combustão, uma determinação precisa dos parâmetros envolvendo transferência de calor influencia diretamente os demais fenômenos envolvidos. Dentre os mecanismos de transferência de calor presentes na combustão a radiação térmica é predominante, mas sua correta determinação impõe uma elevada complexidade, principalmente quando se trata da solução de meios participantes. O cálculo envolve propriedades de absorção que variam com a temperatura e o comprimento de onda, sendo então necessária a utilização de modelos espectrais para obter bons resultados com um baixo tempo computacional. Para o cálculo da transferência radiante, existem diversos modelos espectrais, desde modelos de simples implementação, como, por exemplo, o GG (gás cinza) e o WSGG (soma-ponderada-dos-gases-cinza), até modelos com um grau elevado de detalhamento, como o SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais) e o CW (número de onda cumulativa). Como os modelos com maior grau de detalhamento são de complexa implementação, alguns autores preferem empregar modelos simplistas, como o GG (gás cinza), apenas por questões de conveniência, mesmo em detrimento da qualidade dos resultados. Uma forma de executar o cálculo da radiação térmica sem simplificações é levar em conta as absorções em cada comprimento de onda, sendo esses cálculos denominados integração linha-por-linha (LBL), por executar o cálculo da transferência radiante em cada linha de absorção, o que gera resultados *benchmark*, podendo ser utilizados para avaliar os diversos modelos existentes. Este trabalho tem por objetivo verificar e sintetizar a aplicação dos modelos espectrais, em configurações envolvendo concentração e temperatura não uniformes, onde são realizados cálculos em um meio contendo CO₂, H₂O e fuligem. São avaliados os modelos GG, WSGG, SLW e CW. Dentre os modelos avaliados, o que apresenta os melhores resultados para as condições apresentadas é o modelo WSGG. De forma a aprimorar o modelo WSGG, uma nova implementação para a solução de misturas é apresentada, a qual apresenta correlações para o H₂O e para o CO₂ geradas individualmente, possibilitando misturas com qualquer razão de concentração, mostrando que o modelo apresenta bons resultados em diversas situações e é uma boa opção para a solução de problemas de combustão.

Palavras-chave: Radiação Térmica; Modelos Espectrais; Combustão, WSGG.

ABSTRACT

In combustion processes a good determination of the heat transfer parameters are of great importance because of its direct influence in the computation of the chemical reactions rate in the process and, consequently, in the formation of the combustion products. Among the processes of heat transfer in combustion, thermal radiation is predominant, and their determination can be a very complex task, especially with participating medium. The analysis involves absorption properties that vary with the temperature and wavelength, and therefore it is necessary to use spectral models to ensure good results with low computational time. There are several spectral models developed along the years, since the simplistic models such as the GG (gray gas) and WSGG (weighted-sum-of-gray-gases), to more advanced methods such as the SLW (spectral line weighted-sum-of-gray-gases) and CW (cumulative wavenumber). Due advanced models are in general a hard task to implement, the option is to use simplified models, for example the GG, even working with considerably errors. In order to quantify these solutions, for temperature and concentration conditions of the absorbing species, it is necessary to implement the radiation heat transfer taking into account the absorption at each wavelength through line-by-line (LBL) integration, being this solution the exact one, or, the benchmark solution, which it is used to evaluate the spectral models. In this study, the LBL integration is carried out to evaluate some of the existing models in a non-isothermal and inhomogeneous medium containing CO₂, H₂O and soot. The work involves the GG, WSGG, SLW and CW spectral models. For the presented cases, the best results occur with WSGG model. In order to improve the WSGG model a new implementation for the mixture solution is presented, which solves the correlations for H₂O and CO₂ generated individually, enabling mixtures containing any concentration ratio, showing the good agreement of the spectral model at any condition, being the WSGG a good option to solve combustion problems.

Keywords: Radiation Heat Transfer; Spectral Models; Combustion; WSGG.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão Bibliográfica.....	1
1.2	Motivação	8
1.3	Organização do trabalho	10
2	SISTEMA DE EQUAÇÕES DA RADIAÇÃO TÉRMICA	11
2.1	Energia Emitida por uma Superfície.....	11
2.2	Energia do Corpo Negro	13
2.3	Radiação em um Meio Participante	15
2.4	Atenuação da Intensidade Devido à Absorção e ao Espalhamento	17
2.5	Aumento da Intensidade Devido a Emissão e ao Espalhamento	19
2.6	Equação da Transferência Radiante.....	24
2.7	Método das Ordenadas Discretas.....	25
2.8	Relações Gerais.....	25
2.9	Seleção das Ordenadas Discretas.....	28
2.10	Solução da Equação Radiante Utilizando Ordenadas Discretas e Diferenças Finitas 29	
3	PROPRIEDADES RADIANTES DOS GASES E DA FULIGEM.....	31
3.1	Integração Linha-por-Linha (LBL).....	33
3.1.1	Simplificações para a Integração LBL	34
3.2	Modelos Espectrais	37
3.2.1	O modelo GG	37
3.2.2	O modelo WSGG	37
3.2.3	O modelo SLW.....	39
3.2.4	O modelo CW.....	42
3.3	Propriedades Radiantes da Fuligem.....	46
3.3.1	Absorção e espalhamento para uma única esfera.....	48
3.3.2	Propriedades radiantes para uma nuvem de partículas.....	49
3.3.3	Propriedades radiantes de partículas da combustão	49
3.3.5	Propriedades radiantes da fuligem	50
3.4	Misturas de Espécies Químicas	53
3.5	Misturas de Gases e Partículas.....	57
3.6	Uma Nova Proposição para a Solução de Misturas Através do Modelo WSGG	58
3.6.1	Determinação dos Coeficientes da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza.....	59
3.6.2	Independência das Correlações da Fuligem em relação à Fração Volumétrica	64
3.6.3	Mistura de Gases no Modelo WSGG pelo Novo Método Proposto	65
4	RESULTADOS.....	70
4.1	Resultados Para a Solução LBL.....	70
4.1.1	Refinamento de malha.....	72
4.2	Resultados Utilizando o Modelo de Gás Cinza	72
4.3	Resultados Utilizando o Modelo WSGG.....	75

4.4	Resultados Utilizando o Modelo SLW	77
4.5	Resultados Utilizando o Modelo CW	80
4.7	Resultados para Meios Contendo Apenas a Fuligem	87
4.8	Análise entre a Solução LBL e os Modelos CW, SLW, WSGG e GG para Meios Envolvendo Mistura de Gases Participantes e Fuligem	89
4.9	Análise Entre as Soluções WSGG	100
4.10	Tempos Computacionais	106
5	CONCLUSÕES.....	108
5.1	Proposta de Continuidade	111
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	113
	APÊNDICE A - Resultados para o Modelo de Gás Cinza (GG).....	118
	APÊNDICE B - Resultados para o Modelo Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza (WSGG). Convencional.....	122
	APÊNDICE C - Resultados para o Modelo da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza Baseado em Linhas Espectrais (SLW).	126
	APÊNDICE D - Resultados para o Modelo da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza Baseado em Linhas Espectrais (SLW). Solução Através da Aproximação de Escala.	130
	APÊNDICE E - Resultados para o Modelo Número de Onda Cumulativo (CW).	134
	APÊNDICE F - Resultados para o Modelo Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza (WSGG). Nova Proposta.....	138
	APÊNDICE G - Resultados para o Modelo Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza (WSGG). Método Direto.	142

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Intensidade de radiação do elemento de área dA através do ângulo sólido $d\omega$ [Siegel e Howell, 2002].....	12
Figura 2.2 – Absortância espectral direcional do CO ₂ ao longo do comprimento de onda [Siegel e Howell, 2002].....	16
Figura 2.3 - Intensidade incidente sobre um elemento de espessura dS que absorve e espalha radiação [Siegel e Howell, 2002].....	18
Figura 2.4 - Geometria utilizada para a dedução do aumento da intensidade de radiação [Siegel e Howell, 2002].....	20
Figura 2.5 - Espalhamento da intensidade de radiação incidente dentro do ângulo sólido $d\omega_i$ para a direção (θ, φ) [Siegel e Howell, 2002].....	22
Figura 2.6 - Espalhamento de energia na direção S [Siegel e Howell, 2002].	23
Figura 2.7 – Meio radiante em um sistema bidimensional dividido em diversos volumes de controle [Siegel e Howell, 2002].	27
Figura 2.8 - Ordenadas discretas aplicadas a um problema unidimensional.....	29
Figura 3.1 – Espectro obtido para 10% de H ₂ O à 1000 K.....	33
Figura 3.2 – Comparativo entre diferentes configurações de passo para diferentes passos de temperatura utilizando o CO ₂ de acordo com o banco de dados HITEMP 2010.....	35
Figura 3.3 – Relações lineares para o Espectro do H ₂ O à 1000 K. (a) Comparativo do H ₂ O de 100% para 10%. (b) Comparativo do H ₂ O de 20% para 10%.	36
Figura 3.4 – Comparativo entre diferentes configurações de pontos espectrais para o CO ₂ utilizando o banco de dados HITEMP 2010.	36
Figura 3.4 - Partes do espectro em que a função ALB é calculada.	40
Figura 3.5 - Método κ -correlacionado.	41
Figura 3.6 - Forma esquemática do número de onda cumulativo [Solovjov e Webb, 2002]...	43
Figura 3.8 - Guia para identificar dependência do espalhamento da radiação [Modest, 1993].	48
Figura 3.9 – Coeficiente de absorção para a fuligem com concentração 1×10^{-6} . Relações utilizando a Equação 5.4, Siegel e Howell, 2002, e a Equação 5.6, Chang e Charalampopoulos, 1990.....	53
Figura 3.10 – Comparação dos valores de emitância para o CO ₂	62

Figura 3.11 – Comparação dos valores de emitância para o H ₂ O.	63
Figura 3.12 – Comparação dos valores de emitância para a fuligem.	63
Figura 4.1 – Configuração da geometria para duas placas planas infinitas.	70
Figura 4.2 – Termo fonte radiante para 100% H ₂ O utilizando cálculos LBL. Verificação entre os resultados utilizando HITEMP 2010. Valor do fluxo radiante na parede - Presente trabalho: 29,75 kW/m ² ; Chu et al., 2011, 29,78 kW/m ²	71
Figura 4.3 – Diferentes configurações de malha para um meio composto por 10% de CO ₂ e 90% de N ₂ . Valor do termo fonte radiante; na parede: 12,13 kW/m ³ (50 elementos), 11,93 kW/m ³ (100 elementos), 11,83 kW/m ³ (200 elementos); no centro: 150,85 kW/m ³ (50 elementos), 147,84 kW/m ³ (100 elementos), 146,20 kW/m ³ (200 elementos).	72
Figura 4.4 – Coeficiente de absorção do modelo de gás cinza comparado com a distribuição espectral real. (a) 10% de CO ₂ a 1600 K e 1,0 atm ($\kappa = 0,0086 \text{ cm}^{-1}$). (b) 20% de H ₂ O a 1600 K e 1,0 atm ($\kappa = 0,0038 \text{ cm}^{-1}$).	73
Figura 4.5 – Termo fonte radiante para o modelo GG comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO ₂ . (b) Meio participante com 20% de H ₂ O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	74
Figura 4.6 – Fluxos radiantes obtidos pelos modelo GG e pela solução LBL. Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	74
Figura 4.7 – Termo fonte radiante para o modelo WSGG comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO ₂ . (b) Meio participante com 20% de H ₂ O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	76
Figura 4.8 – Fluxo de calor radiante para o modelo WSGG comparando com a solução LBL. Meio participante com 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	76
Figura 4.9 – Termo fonte radiante para o modelo SLW comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO ₂ . (b) Meio participante com 20% de H ₂ O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	78
Figura 4.10 – Fluxo de calor radiante para o modelo SLW comparando com a solução LBL. Meio participante com 10% de CO ₂ . (b) Meio participante com 20% de H ₂ O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	79
Figura 4.11 – Termo fonte radiante para o modelo CW comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO ₂ . (b) Meio participante com 20% de H ₂ O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$	81

Figura 4.12 – Fluxo de calor radiante para o modelo CW comparando com a solução LBL. Meio participante com 10% de CO ₂ . (b) Meio participante com 20% de H ₂ O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.....	82
Figura 4.13 – Perfis de temperatura desenvolvidos para avaliar os modelos espectrais.	84
Figura 4.14 – (a) Estrutura de uma chama laminar difusiva. (b) Distribuição de temperatura e dos produtos da combustão. [adaptado de Turns, 2006].	85
Figura 4.15 – Meio participante composto por fuligem, $f_v=1\times 10^{-5}$, utilizando os modelos GG, WSGG e SLW comparados com a solução LBL. Perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. (a) Termo fonte radiante [erro médio de 2,25 % (GG), 3,62 % (WSGG) e 4,07 % (SLW)].	88
(b) Fluxo de calor radiante [erro médio de 7,96 % (GG), 5,88 % (WSGG) e 9,97 % (SLW)].	88
Figura 4.16 – Meio participante composto por fuligem, $f_v=1\times 10^{-5}$, utilizando os modelos GG, WSGG e SLW comparados com cálculos LBL. Perfil de temperatura dado pela Equação 4.2. (a) Termo fonte radiante [erro médio de 3,71 % (GG), 2,20 % (WSGG) e 3,93 % (SLW)].	88
(b) Fluxo de calor radiante [erro médio de 10,12 % (GG), 3,23 % (WSGG) e 8,46 % (SLW)].	88
Figura 4.17 – Meio participante composto por fuligem, $f_v=1\times 10^{-5}$, utilizando os modelos GG, WSGG e SLW comparados com cálculos LBL. Perfil de temperatura dado pela Equação 4.3. (a) Termo fonte radiante [erro médio de 2,07 % (GG), 2,05 % (WSGG) e 2,69% (SLW)].	89
(b) Fluxo de calor radiante [erro médio de 4,82 % (GG), 4,07 % (WSGG) e 7,01 % (SLW)].	89
Figura 4.18 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante. Meio homogêneo composto por 10% no CO ₂ e 20% no H ₂ O. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.....	90
Figura 4.19 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante. Meio homogêneo composto por 10% no CO ₂ e 20% no H ₂ O. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.....	91

Figura 4.20 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante. Meio homogêneo composto por 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O, com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3. .92	92
Figura 4.21 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante. Meio homogêneo composto por 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O, com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3. .94	94
Figura 4.22 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante. Meio não homogêneo composto por 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O, com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L = 1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.97	97
Figura 4.23 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante. Meio não homogêneo composto por 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O, com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L = 1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.98	98
Figura 4.24 - Termo fonte radiante para as diversas implementações do modelo WSGG comparando com a solução LBL. Meio participante com concentração homogênea; mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. (a) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.3. 101	101
Figura 4.25 – Fluxo de calor radiante para as diversas implementações do modelo WSGG comparando com a solução LBL. Meio participante com concentração homogênea; mistura de 10% de CO ₂ e 20% de H ₂ O. (a) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.3. 102	102
Figura 4.26 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante no modelo WSGG. Meio composto por 10% e CO ₂ e 20% de H ₂ O, com concentração de fuligem aumentando gradativamente. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.103	103

Figura 4.27 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante utilizando o modelo WSGG. Meio composto por 10% de CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. Perfil de temperatura conforme Equação 6.1.....	104
Figura 4.28 – (a) Campo de temperatura e seu erro relativo para o modelo WSGG convencional. (b) Fração mássica do H_2O e CO_2 . [Centeno et al., 2012].....	105

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Valores dos coeficientes para o modelo WSGG. $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013].	39
Tabela 3.2 - Coeficientes de absorção para o modelo de gás cinza. Adaptado de Cassol et al., 2012.	54
Tabela 3.3 - Valores dos coeficientes do CO_2 para o modelo WSGG.	61
Tabela 3.4 - Valores dos coeficientes do H_2O para o modelo WSGG.	62
Tabela 3.5 - Valores dos coeficientes para o modelo WSGG. Fuligem. $f_v = 1,0$.	63
Tabela 4.1 - Indicação do modelo espectral que apresenta o melhor resultado para o termo fonte radiante e fluxo de calor radiante. Distância entre as placas planas de 1,0 m. Meio participante com concentração homogênea e pressão total de 1,0 atm.	95
Tabela 4.2 - Comparação entre os erros médios do termo fonte radiante em meio homogêneo. Distância entre as placas planas de 1,0 e 0,2 m. Valores em porcentagem.	96
Tabela 4.3 - Comparação entre os erros médios do termo fonte radiante em meio não homogêneo. Distância entre as placas planas de 1,0 e 0,2 m. Valores em porcentagem.	99
Tabela 4.4 - Comparação entre os erros médios do termo fonte radiante em meio homogêneo e não homogêneo. Distância entre as placas planas de 0,2 e 1,0 m. Valores em porcentagem.	106
Tabela 4.5 - Tempos computacionais para os modelos espectrais.	107
Tabela A.1 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.	118
Tabela A.2 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	119
Tabela A.3 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	120

Tabela A.4 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	121
Tabela B.1 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.	122
Tabela B.2 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	123
Tabela B.3 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	124
Tabela B.4 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	125
Tabela C.1 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.	126
Tabela C.2 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	127
Tabela C.3 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	128
Tabela C.4 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	129
Tabela D.1 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.	130
Tabela D.2 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	131

Tabela D.3 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	132
Tabela D.4 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	133
Tabela E.1 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.	134
Tabela E.2 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	135
Tabela E.3 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	136
Tabela E.4 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	137
Tabela F.1 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração uniforme.	138
Tabela F.2 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	139
Tabela F.3 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	140
Tabela F.4 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	141
Tabela G.1 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.	142

Tabela G.2 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.	143
Tabela G.3 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	144
Tabela G.4 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.	145

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ALB	Função distribuição das linhas de absorção do corpo negro
CW	Modelo do número de onda cumulativo
FSCK	Modelo da distribuição- κ que considera todo o espectro
GG	Modelo do gás cinza
HITEMP	Banco de dados espectrais calculado à temperatura de 1000 K
HITRAN	Banco de dados espectrais calculado à temperatura ambiente
LBL	Linha-por-Linha
MCW	Modelo do número de onda cumulativo modificado
RTE	Equação da transferência radiante
SLW	Modelo WSGG baseado em linhas espectrais
WSGG	Modelo da soma ponderada dos gases cinza

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Absortância, m^{-1}
a_0	Coefficiente de ponderação correspondente à janela transparente, adimensional
a_{CO_2}	Coefficiente de ponderação para o CO_2 , adimensional
a_{H_2O}	Coefficiente de ponderação para o H_2O , adimensional
a_j	Coefficiente de ponderação para ao j -ésimo gás cinza, adimensional
a_M	Coefficiente de ponderação para a mistura, adimensional
A	Área, m^2
b_j	Coefficientes do modelo WSGG
c	Constante do combustível para as propriedades da fuligem, adimensional
C	Valor qualquer da seção transversal de absorção, $m^2/molécula$
C_1	Primeira constante de Planck, $0,5955 \times 10^8 \text{ W} \cdot \mu\text{m}^4/m^2$
C_2	Segunda constante de Planck, $1,4387 \times 10^4 \mu\text{m} \cdot \text{K}$
C_j	Seção transversal de absorção na posição j , $m^2/molécula$
\tilde{C}_j	Seção transversal de absorção suplementar na posição j , $m^2/molécula$
C_η	Seção transversal de absorção, $m^2/molécula$
D_{ij}	Número de onda do gás cinza fracional, m^{-1}
e	Poder emissivo, W/m^2
e_b	Poder emissivo do corpo negro, W/m^2
$e_{\eta,b}$	Poder emissivo espectral do corpo negro, W/m^2
E_k	Energia no estado inferior, m^{-1}
f_v	Fração volumétrica, adimensional
F	Função distribuição ALB, adimensional
H	Intervalo em C_η para o modelo CW, m^{-1}
I	Intensidade radiante, W/m^2
I_b	Intensidade radiante do corpo negro, W/m^2
$I_{b,w}$	Intensidade radiante do corpo negro na parede, W/m^2
I_j	Intensidade radiante do gás cinza j , W/m^2
I_m	Intensidade radiante na direção m , W/m^2
I_η	Intensidade radiante espectral no número de onda, W/m^2
I_η^+	Intensidade radiante espectral para $\mu > 0$, W/m^2

I_{η}^{-}	Intensidade radiante espectral para $\mu < 0$, W/m ²
$I_{\eta,b}$	Intensidade radiante espectral do corpo negro, W/m ²
$I_{\eta,e}$	Intensidade radiante espectral emitida, W/m ²
$I_{\eta,s}$	Intensidade radiante espectral espalhada, W/m ²
I_{λ}	Intensidade radiante espectral no comprimento de onda, W/m ²
J_{ij}	Intensidade de radiação do gás cinza fracional W/m ²
$J_{ij,b}$	Intensidade de radiação de corpo negro fracional, W/m ²
k	Índice de absorção, adimensional
K	Coeficiente de extinção, m ⁻¹
K_{η}	Coeficiente de extinção espectral, m ⁻¹
L	Distância entre dois pontos, m
m	Índice complexo de refração, adimensional
$\text{máx} q''_{R,LBL} $	Valor máximo absoluto do fluxo de calor, W/m ²
$\text{máx} \dot{q}_{R,LBL} $	Valor máximo absoluto do termo fonte radiante, W/m ²
n	Parte real no índice complexo de refração, adimensional
n_T	Coeficiente de auto-alargamento, adimensional
N	Densidade molar ou número de Loschmidt, moléculas/m ³
p	Pressão, atm
p_{loc}	Pressão parcial na condição local, atm
p_{ref}	Pressão parcial no estado termodinâmico de referência, atm
P_n	Polinômio de Legendre, adimensional
q''_R	Fluxo de calor radiante, W/m ²
$q''_{R,\eta}$	Fluxo de calor radiante espectral para número de onda, W/m ²
$q''_{R,\lambda}$	Fluxo de calor radiante espectral para comprimento de onda, W/m ²
\dot{q}_R	Termo fonte radiante, W/m ³
$\dot{q}_{R,\eta}$	Termo fonte radiante espectral para número de onda, W/m ³
$\dot{q}_{R,\lambda}$	Termo fonte radiante espectral para comprimento de onda, W/m ³
Q	Soma das funções de partição
r	Posição radial, m; Raio, m
r_w	Posição de referência na parede, m
R	Razão de espaço livre-comprimento de onda, adimensional

s_i	Intensidade da linha espectral i
S	Localização espacial, m; Comprimento característico, m
S^*	Localização espacial em um estado de referência, m
T	Temperatura, K
T_b	Temperatura de corpo negro, K
T_g	Temperatura do gás, K
T_{loc}	Temperatura na condição local, K
T_m	Temperatura do meio participante, K
T_{ref}	Temperatura no estado termodinâmico de referência, K
T_w	Temperatura na parede, K
u_{ij}	Função que descreve o estado termodinâmico de um gás
v_{luz}	Velocidade da luz, $2,9979 \times 10^8$ m/s
v_{ij}	Função que descreve o comportamento espectral de um gás
V	Volume, m ³
V_w	Volume de controle na parede, m ³
x	Posição espacial, m; Parâmetro de tamanho, adimensional
Y	Fração molar da espécie química, adimensional
Y_{loc}	Fração molar da espécie química na condição local, adimensional
Y_{ref}	Fração molar da espécie química no estado termodinâmico de referência, adimensional
w	Função do número de onda cumulativo

Símbolos Gregos

α	Constante de ajuste para a absorção da fuligem, adimensional
α_i	Valor do número de onda para o modelo CW, m ⁻¹
β_i	Valor do número no modelo CW, m ⁻¹
γ_i	Meia largura de linha espectral i , m
δ	Erro para o cálculo do fluxo de calor radiante, %
Δ_i	Intervalo espectral no modelo CW, m ⁻¹
ε	Emissividade, adimensional; Emitância, adimensional
ε_w	Emissividade na parede, adimensional

ε_η	Emitância espectral, adimensional
η	Número de onda, m^{-1}
θ	Ângulo, rad
κ	Coefficiente de absorção, m^{-1}
K_{CO_2}	Coefficiente de absorção para o CO_2 , m^{-1}
K_{H_2O}	Coefficiente de absorção para o H_2O , m^{-1}
κ_j	Coefficiente de absorção do gás cinza j , m^{-1}
κ_M	Coefficiente de absorção para a mistura, m^{-1}
κ_η	Coefficiente de absorção espectral, m^{-1}
κ_p	Coefficiente de absorção dependente da pressão, atm m^{-1}
$\kappa_{p,\eta}$	Coefficiente de absorção espectral dependente da pressão, atm m^{-1}
λ	Comprimento de onda, m
μ	Nós da quadratura gaussiana, adimensional
μ_m	Nós da quadratura gaussiana para a direção m , adimensional
σ	Coefficiente de Stefan-Boltzmann, $5,67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$; Coefficiente de espalhamento, m^{-1}
σ_η	Coefficiente de espalhamento espectral, m^{-1}
$\sigma_{\eta,p}$	Coefficiente de espalhamento espectral dependente da pressão, atm m^{-1}
ϕ	Representa a dependência espacial da seção transversal de absorção
ψ	Representa a dependência espectral da seção transversal de absorção
τ	Espessura óptica, adimensional
τ_η	Espessura óptica espectral, adimensional
v_i	Diferença de energia entre o estado inicial e final
ζ	Erro no cálculo do termo fonte radiante, %
φ	Ângulo, rad
Φ	Função de fase, adimensional
ω	Ângulo sólido, sr
ω_i	Ângulo sólido na direção de incidência, sr
ω_s	Ângulo sólido na direção do espalhamento, sr
Ω	Fator de ponderação da quadratura gaussiana, adimensional

Subíndices

<i>b</i>	Condição para o corpo negro
<i>CO₂</i>	Condição para o dióxido de carbono
<i>e</i>	Condição de emissão
<i>f</i>	Condição para fuligem
<i>g</i>	Condição para gás
<i>H₂O</i>	Condição para vapor d'água
<i>i</i>	Condição para incidindo
<i>loc</i>	Estado local
<i>LBL</i>	Condição para integração linha-por-linha
<i>máx</i>	Condição para o valor máximo
<i>modelo</i>	Condição para o modelo espectral
<i>M</i>	Condição de mistura
<i>p</i>	Valor obtido em função da pressão
<i>ref</i>	Estado de referência
<i>total</i>	Condição em termos totais
<i>w</i>	Condição para parede;
<i>η</i>	Dependência espectral com relação ao número de onda
<i>λ</i>	Dependência espectral com relação ao comprimento de onda

1 INTRODUÇÃO

O papel estratégico da eficiência energética na queima de combustíveis, além das restrições ambientais devido ao aquecimento global, justifica o interesse crescente no estudo e aplicação dos diversos fenômenos envolvidos no processo de combustão. De acordo com Santos, 1991, e Strapasson, 2004, a queima de combustíveis é responsável por cerca de 80% de toda a energia no mundo; portanto, melhorar sua eficiência em cerca de 5 a 20% equivale a economizar energia no nível das contribuições das outras formas de energia.

Dentro do contexto da eficiência energética, estudos envolvendo o fenômeno da transferência de calor (que é um fenômeno diretamente ligado ao processo de combustão e na geração de energia térmica) são de grande importância, pois identificam novas metodologias para os cálculos, ou da mesma forma identificam limitações dos diversos modelos matemáticos, que só assim poderão ser corrigidos. Em suma, o bom entendimento da solução matemática da transferência de calor auxilia na otimização dos projetos e garante a evolução tecnológica dos processos.

Na combustão, em decorrência das altas temperaturas, a principal forma de transferência de calor é a radiação térmica. No interior de uma câmara de combustão, tanto as paredes quanto o meio (gases e partículas provenientes das reações químicas) participam das trocas térmicas. As trocas radiantes de calor no meio podem envolver determinações que dependem do espectro radiante, onde modelos espectrais são necessários para a solução. São várias as opções de modelos espectrais para a solução do problema, entretanto, estudos detalhados a respeito das características de cada um ainda são inexistentes, ficando a garantia da melhor solução a cargo do modelo espectral com maior grau de detalhamento.

1.1 Revisão Bibliográfica

Novos trabalhos na área de combustão continuam sendo desenvolvidos, envolvendo, por exemplo, soluções da transferência de calor no meio participante ou soluções das reações químicas envolvidas. Analisando estudos como o realizado por Mossi et al., 2010, que avaliou a diferença do campo de temperaturas e a formação de CO₂, H₂O e fuligem, acoplando diferentes modelos espectrais de radiação, é possível perceber que a diferença nos fluxos de transferência de calor influenciam significativamente as reações químicas. A relação entre a radiação térmica e o escoamento de fluidos foi estudado por Edge et al., 2011, onde se

verificou que com o aumento da quantidade de fuligem, devido às diferenças térmicas, o perfil de velocidades do escoamento podia ser significativamente alterado. Relações de concentração de fuligem e a influência nas trocas radiantes foram estudadas por Borjini et al., 2007, onde se concluiu que a concentração da fuligem afetava consideravelmente a transferência de calor no interior da câmara de combustão. Assim, a determinação precisa da transferência radiante é fundamental no cálculo global do processo, que envolve uma cadeia de processos interligados. Hernandez et al., 2013, estudou os efeitos do aumento na concentração de fuligem em uma chama difusiva, com um grande detalhamento nos mecanismos químicos, relatando que, ao acoplar a radiação térmica, um dos efeitos da fuligem correspondia à diminuição de incidência da radiação térmica no meio gasoso, diminuindo os campos de temperatura, o que conseqüentemente resultava em uma diminuição na geração da própria fuligem. Deve-se observar que, se a temperatura da partícula é menor do que a temperatura do meio, o fluxo de calor nas paredes decrescerá porque a radiação é absorvida pelas partículas frias. Se a temperatura da partícula é maior que a temperatura do meio, o fluxo de calor nas paredes aumentará porque o meio e as partículas emitem mais radiação térmica na direção da parede. Uma conclusão sobre o efeito da concentração do meio participante sobre a temperatura dependerá de cada caso estudado.

Sabe-se que a taxa de transferência de calor aumenta com o aumento da temperatura e esse fato tem sido atribuído ao aumento da condutividade térmica dos gases e principalmente ao aumento na transferência de calor por radiação. Entretanto, mesmo com sua grande importância, avanços concretos no modelamento da radiação térmica em gases participantes ocorreram apenas nas últimas décadas, por razão da sua natureza espectral não linear, o que atribui grande complexidade. Em sua forma mais geral, o equacionamento engloba sistemas diferenciais e integrais, onde para a solução é necessário levar em conta variações de temperatura, concentração do meio e comprimento de onda.

Métodos para a solução do problema radiante têm evoluído ao longo dos anos, principalmente com o avanço das tecnologias computacionais. Podem-se citar o método das radiosidades, *ray tracing*, método das zonas, método das aproximações P-N, método de dois-fluxos e o método das ordenadas discretas. Modelos envolvendo a transferência radiativa, com solução utilizando o método das ordenadas discretas (*discrete-ordinates method* – DOM), foram propostos inicialmente por Chandrasekhar, 1960, e, ao longo dos anos, por Lewis e Miller, 1984, Fiveland, 1984 e 1987, Kock et al., 1994, Chalhoub, 2002, Li et al., 2004, dentre outros, mostrando que, para o problema de integração espacial, o método das

ordenadas discretas é viável e vantajoso para a estabilidade numérica, e, principalmente para a solução de casos envolvendo o fenômeno de espalhamento radiante.

Por outro lado, o desenvolvimento de modelos espectrais para o detalhamento do fenômeno da radiação térmica tem se desenvolvido lentamente, onde podemos observar modelos como o de gás cinza (GG) onde não há detalhamento do espectro, modelos com pouco nível de detalhamento, como, por exemplo, o modelo WSGG (soma-ponderada-dos-gases-cinza), e modelos com um maior detalhamento, como, por exemplo, o SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais), o modelo FSCK (distribuição- κ que considera todo o espectro), e o modelo CW (número de onda cumulativo). O gás cinza é considerado o primeiro modelo para a solução do problema espectral e é baseado em um valor médio para a absorção ao longo de todo o espectro. É largamente utilizado, mas não existe uma referência a respeito de sua origem. O modelo WSGG foi proposto por Hottel e Sarofim, 1967, aprimorado por Modest, 1991, e ao longo dos anos foi largamente implementado (Bressloff, 1999, Yu et al., 2000, e Hua et al., 2005), sendo também desenvolvidas diversas atualizações para as correlações propostas, tentando acompanhar o desenvolvimento dos bancos de dados espectrais. Atualizações nas correlações podem ser encontradas em Galarça et al., 2008, ou em Krishnamoorthy, 2010, sendo a atualização mais recente das correlações encontrada em Dorigon et al., 2013. O método SLW foi proposto por Denison e Webb, 1993, onde foi aplicado inicialmente para um meio participante composto apenas por H₂O, e posteriormente em Denison e Webb, 1995a, aplicado ao CO₂. Uma metodologia para misturas de gases é apresentada em Denison e Webb, 1995b, possibilitando a solução do H₂O e CO₂ em um mesmo sistema. Problemas radiantes resolvidos pelo modelo SLW são encontrados em Solovjov e Webb, 2000, 2001 e 2011. O modelo FSCK foi inicialmente desenvolvido por Modest e Zhang, 2002, com base na teoria do κ -correlacionado, e pode ser encontrado em diversos trabalhos presentes na literatura. O modelo CW foi o último modelo espectral desenvolvido dentre os citados, tendo sido proposto por Solovjov e Webb, 2002, e segundo os autores possui uma excelente aproximação no valor do termo fonte radiante. Entretanto, o modelo CW apresenta problemas na determinação do fluxo de calor radiante, pois o modelo não é conservativo. Galarça et al., 2011, resolveram o problema da determinação do fluxo de calor radiante e denominaram a correção para o modelo como MCW (número de onda cumulativo modificado), entretanto o tempo computacional para a solução tornou-se ainda mais elevado, o que restringe sua utilização.

Por diversos fatores, mas principalmente devido à complexidade da dependência espectral na radiação, vários autores simplificam a modelagem do meio participante considerando-o cinza. Contudo, muitos processos de combustão geram gases como o dióxido de carbono e vapor d'água, onde a modelagem espectral é muito importante, pois o coeficiente de absorção varia significativamente ao longo do número de onda. O modelo WSGG executa a modelagem desses gases não cinza através da consideração de um número finito de gases cinza, sendo essa uma simplificação mais representativa do processo. Alguns trabalhos indicam um erro aproximado de 5-10% no modelo WSGG comparado com a integração linha-por-linha (LBL). Entretanto, a indicação foi estabelecida para alguns casos particulares, principalmente em baixas temperaturas, o que leva a crer que para aplicações mais realísticas, com gradientes de temperatura e de concentrações do meio participante elevados, esses erros possam ser ainda maiores.

Diferente do modelo WSGG, os modelos SLW e CW resolvem o espectro através de funções distribuição. No modelo SLW a função representa frações da energia de corpo negro, e no modelo CW, uma função de passo Heaviside, cuja integração resolve a absorção ao longo de um determinado intervalo de número de onda. Segundo Solovjov e Webb, 2011, para o modelo SLW, quanto maior o número de seções de absorção mais precisa será a solução do problema, sendo que com um número de seções tendendo ao infinito, a solução se aproximará da solução exata.

A presença de gás e particulado em um mesmo sistema é muito comum na engenharia, como, por exemplo, na combustão de carvão, combustão incompleta de gases gerando quantidade excessiva de fuligem, combustão em motores de foguetes com combustível sólido, etc. Com a presença de gás, fuligem, cinza em suspensão e demais partículas, uma modelagem completa do processo requer um esforço computacional ainda maior. Em misturas contendo gás e particulado e considerando um meio não cinza, os fatores necessários para uma estimativa da radiação ainda não estão totalmente estabelecidos, visto que o fenômeno passa a ser dependente da densidade das partículas, do tamanho e forma, distribuição, temperatura e concentração das mesmas. As várias partículas encontradas nos processos de combustão de carvão podem ser classificadas como carbonáceas (carvão e fuligem), e não-carbonáceas (cinzas). Partículas esféricas e homogêneas de carvão e dos produtos da combustão do carvão possuem propriedades de espalhamento que são significativamente diferentes. As propriedades do meio particulado (carvão, cinzas em suspensão e fuligem) são de difícil obtenção e estas mudam para cada caso visto que são dependentes da composição

química do combustível. Tabelas e formulações podem ser encontradas em Modest, 1993, e em alguns estudos para tipos particulares de carvão, como em Mengüç et al., 1994, e em Im e Ahluwalia, 1990.

A fuligem representa uma parcela significativa nas trocas radiantes mesmo em baixas concentrações, onde a intensidade de radiação pode se tornar predominante frente aos gases presentes no meio. As propriedades radiantes da fuligem não estão disponíveis em um banco de dados padronizado (no caso dos gases, os bancos de dados HITRAN ou HITEMP são referências), e por conta disso a determinação do coeficiente de absorção em muitos casos é dada por correlações que podem variar de acordo com a situação a ser estudada. Alguns trabalhos que apresentam relações para o espectro da fuligem e a influência da mesma no meio são Yagi e Iino, 1961, Lee e Tien, 1981, Smith et al., 1987, e Chang e Charalampopoulos, 1990, mostrando que as relações podem ser apresentadas de forma diferente por cada autor.

De forma a simplificar a solução espectral dos gases, modelos espectrais são aplicados. Como citado anteriormente, diversos são os modelos espectrais existentes, mas poucas são as conclusões obtidas acerca dos limites de aplicabilidade de cada um. Alguns trabalhos têm surgido para auxiliar no mapeamento dos modelos espectrais, mas os dados ainda são ou muito generalistas ou muito específicos. Uma abordagem tradicional da radiação térmica em processos de combustão pode ser encontrada em Klason et al., 2008, que trata da combustão de biomassa em leito fluidizado fixo. O trabalho aborda o fato de que, para uma determinação precisa do campo de temperaturas no leito, é necessária uma boa determinação da cinética química e das taxas de mistura dos voláteis e do ar no processo. Este trabalho também enfatiza que a correção na determinação das reações químicas depende de uma boa determinação do campo de temperaturas. Para isso, é requerido um modelo de transferência de calor radiante que envolva a solução adequada do meio participante. Cita-se ainda que em muitos casos da literatura uma solução baseada apenas na espessura óptica do meio gera bons resultados para chamas laminares e em casos particulares com a formação de NO_x , mas, com a formação de CO_2 , o resultado perde acurácia. Em seu trabalho, Klason et al., 2008, aplicou o modelo GG e o modelo SLW, comparando com dados experimentais, utilizando como método de solução da equação radiante o método de aproximação P1, para analisar dois leitos fluidizados, um de pequena e outro de grande escala, ambos em três dimensões. A fluidodinâmica e a química da combustão foram solucionadas juntamente com a transferência de calor radiante. Todos os efeitos dos diferentes métodos de cálculo do problema para a

determinação dos campos de temperatura foram analisados, dando uma maior atenção ao método de solução do problema espacial da radiação do que a respeito dos modelos espectrais. As análises mostraram que a utilização do modelo SLW é preferível ao GG, mas não foi possível ter uma ideia geral a respeito das distribuições da fuligem e particulado, não sendo tratado também da origem das correlações para o GG.

As formas de verificação dos modelos variam de acordo com cada autor. Por exemplo, aqueles que buscam uma aplicação final geralmente demonstram através de casos específicos como a solução de câmaras de combustão, combustão em propulsão de foguetes ou até mesmo turbinas. Do ponto de vista dos autores que trabalham com os modelos espectrais, as soluções são em grande parte em uma única dimensão, com perfil de temperatura e concentração dos gases previamente especificados. Entretanto as soluções unidimensionais devem representar situações que serão próximas de situações reais, com a finalidade de resolver problemas com maior complexidade, como, por exemplo, resolvendo perfis de temperatura com gradiente de temperatura acentuado ou prevendo diversas concentrações para o meio participante. No entanto, o que geralmente acontece é as verificações e comparações dos modelos ocorrerem para perfis de temperatura uniforme, variações baixas de temperaturas (se as temperaturas forem relativamente uniformes, isto implica que as mesmas linhas espectrais contribuem para a transferência radiante, sendo que o resultado não sofre grande influência de simplificações ou aproximações devido às mudanças no espectro com o estado termodinâmico) e testes para cada espécie química individualmente (sem resolver misturas).

Os primeiros testes realizados no modelo SLW (Denison e Webb, 1993) foram feitos apenas com concentrações de H_2O , abordando perfis com temperatura uniforme (parede fria e temperatura do meio em 1000 K) e com variação cossenoidal, variando o ΔT em 100, 500 e 1000 K. O resultado com $\Delta T = 1000$ K já demonstra um aumento no erro na solução nas regiões de maior temperatura em contraste com a solução possuindo $\Delta T = 100$ K. Para o CO_2 (Denison e Webb, 1995a), os testes foram realizados com temperatura uniforme, e um único teste com um perfil de temperatura cossenoidal ($\Delta T = 1000$ K), onde foi apresentada uma diferença significativa em relação aos resultados LBL. Para a mistura de CO_2 e H_2O (Denison e Webb, 1995b), a validação é baseada em três perfis de temperatura, sendo uma com temperatura uniforme, a segunda e a terceira com temperatura não uniforme, com a distância entre as placas de 3,0 m. Sabe-se que, com temperatura uniforme e valores altos de espessura óptica (um artifício para aumentar a espessura óptica sem aumentar a concentração do meio é

aumentar a distância entre as placas planas), os resultados dos modelos tendem a se aproximar do resultado LBL, por a intensidade radiante se aproximar da intensidade radiante do corpo negro.

Na primeira apresentação do modelo CW (Solovjov e Webb, 2002), foram realizados testes de validação com um perfil parabólico com $\Delta T = 1000$ K e concentração uniforme de CO_2 ao longo das duas placas planas distantes de 1,0 m. Um perfil de temperatura com variação abrupta para o CO_2 também foi apresentado, mostrando boas soluções, e uma verificação com uma mistura de H_2O , CO_2 , CO e fuligem também foi apresentada, entretanto o perfil de temperatura para a mistura era uniforme. Testes envolvendo métodos para mistura através do modelo CW foram apresentados em Solovjov e Webb, 2005, considerando uma mistura de H_2O , CO_2 e fuligem, onde os principais testes foram feitos em um meio com temperatura uniforme. Um perfil com variações bruscas de temperatura foi apresentado, mas para este perfil a mistura era apenas de gases, sem fuligem. Um perfil de temperatura cossenoidal, com $\Delta T = 1000$ K e distância entre as placas igual a 3,0 m, complementou os exemplos resolvidos.

Muitos testes e situações podem ser criados para verificar modelos ou metodologias, entretanto verifica-se nos artigos que não existe uma homogeneidade nas verificações, visto que diferentes testes são realizados para diferentes modelagens, impossibilitando concluir, por exemplo, se um determinado perfil de temperatura apresenta a mesma acurácia para CO_2 , H_2O , fuligem e misturas envolvendo as espécies químicas.

De maneira geral, o modelo WSGG apresenta bons resultados para as mais diferentes situações (Dorigon et al., 2013, Duciak, 2013, Dorigon, 2012, Tanin et al., 2012). Entretanto, uma limitação do modelo é a impossibilidade de variar as razões de concentração dos gases depois de as correlações já terem sido geradas, sendo que alguns esforços já foram dispendidos para a solução deste problema (Tanin et al., 2012). Para ajustar os valores dos coeficientes do WSGG para um caso de oxi-combustão a partir dos casos de razão de concentração da combustão de metano e óleo combustível, Rehfeldt et al., 2011, utilizou um termo de correção baseado na fração molar do CO_2 e H_2O . A verificação para os novos valores dos coeficientes foi realizada apenas em função da comparação das emissividades. Os resultados mostraram que os dados eram confiáveis apenas para valores acima de 1500 K, além de estarem limitados a um caso específico de câmara de combustão.

Com o objetivo de aumentar a possibilidade de aplicação dos coeficientes no modelo WSGG, Johansson et al., 2011, propôs relações que possibilitam variações da razão de

concentração do meio participante, aplicadas a uma faixa que varia de 0,125 a 2,0. O caminho encontrado foi criar correlações tanto para a solução dos coeficientes de absorção (através de uma relação linear) quanto para os pesos (mantendo a relação polinomial). Logo, além de variar com a temperatura, também está prevista a variação da razão entre a concentração das espécies químicas. Os resultados envolvendo a metodologia foram apresentados para verificações com razões de 0,125, 0,5, 1,0 e 2,0, o que assegura uma boa aplicabilidade. Entretanto, os resultados foram comparados com o modelo SNB – *statistical narrow band*, que não garante uma acurácia nas avaliações (atualmente a melhor solução espectral é através da integração LBL). Além de os casos apresentados serem muito específicos, não ilustrando capacidades gerais de solução, a faixa de aplicação ainda continua restrita (razões de 0,125 a 2,0), sendo necessário gerar novas correlações caso ocorram razões de concentração não previstas do meio participante.

Smith et al., 1987, propuseram para a mistura de gás e fuligem uma equação onde os valores das absorções eram somados e os pesos multiplicados, formando uma nova matriz que corresponde a $A \times B$, sendo A o número de gases cinza nas correlações dos gases (CO_2 e H_2O) e B o número de gases cinza nas correlações da fuligem. A nova matriz estendeu o número de equações para a solução da intensidade de radiação, o que aumentou o tempo computacional para a solução do problema. As soluções apresentaram uma boa acurácia e o método permite utilizar qualquer número de substâncias químicas para resolver o problema. Um fator negativo é que não foi prevista a separação das correlações do CO_2 e H_2O , não havendo possibilidade de variar as razões das pressões parciais entre esses gases.

Dos modelos espectrais desenvolvidos ao longo dos anos, alguns se estabeleceram naturalmente devido a sua facilidade de implementação, como é o caso do modelo WSGG, outros geram bons resultados, mas possuem uma complexa metodologia de solução. Entretanto, ainda existem questionamentos a respeito da real acurácia dos modelos para as diferentes situações de aplicação, havendo a necessidade de uma síntese sobre a adequabilidade de emprego dos diferentes métodos em diferentes condições.

1.2 Motivação

A solução da equação da transferência de calor radiante envolve diversos parâmetros, referentes à emissão, à absorção e ao espalhamento da radiação. A consideração dos parâmetros envolvidos (se a radiação será espalhada ou apenas absorvida, por exemplo)

depende da situação em análise. Gases polares, como o vapor de água e o dióxido de carbono, apenas absorvem e emitem radiação, sendo desnecessário considerar o espalhamento. Para o meio particulado, onde temos a fuligem, este além de absorver também espalha radiação térmica, mas o espalhamento radiante para a fuligem considerando uma fração volumétrica de até $1,0 \times 10^{-2}$ pode ser negligenciado [Modest, 1993; Brewster e Tien, 1982].

O detalhamento dos efeitos radiantes sempre é pertinente para a análise do fenômeno da combustão, pois quanto maior o detalhamento, maior será a precisão do resultado. Entretanto, conhecer de antemão o nível de detalhamento realmente necessário para o cálculo dos efeitos radiantes é de grande valia. Por conta disso, é requerido um estudo extensivo de casos e a síntese dos resultados, o que ainda não foi feito na literatura.

Como critérios para a escolha de um modelo apropriado para a modelagem da radiação térmica, de acordo com a situação envolvida, ainda não está completamente compreendida, o presente trabalho pretende gerar um conjunto de soluções *benchmark*, ou seja, obtidas por integração linha-por-linha, e analisar diferentes situações com a presença de gases participantes (CO_2 , H_2O) e fuligem através de diferentes modelos espectrais presentes na literatura. Para as análises, serão utilizados os modelos GG, WSGG, SLW e CW que representam uma variedade de modelos com baixo, médio e elevado grau de detalhamento. A escolha do meio participante justifica-se por serem o CO_2 e o H_2O produtos comuns em todos os processos de combustão, e da mesma forma, a presença da fuligem também representa participação relevante no processo e adiciona um meio participante com propriedades espectrais que variam linearmente.

Os resultados serão obtidos para condições compatíveis com as encontradas em processos de combustão, tanto no que tange gradientes de temperatura e de concentrações das espécies químicas. Essas condições são reconhecidamente as que impõem as maiores dificuldades para os modelos de radiação. Espera-se, como uma das principais contribuições deste trabalho, uma síntese das condições nas quais os diferentes modelos podem ser aplicados e dos erros esperados nesses casos. Como os modelos serão avaliados em diversas situações, o presente estudo também poderá direcionar o desenvolvimento de novos modelos espectrais, visando às situações para as quais os atuais ainda não conduzem a bons resultados.

Como forma de aprimorar o modelo WSGG, será incluída no presente trabalho uma metodologia de mistura dos gases CO_2 e H_2O . Como é sabido, o modelo WSGG baseia-se em razões fixas dos gases, o que limita sua aplicação a um meio não homogêneo com razões de concentração não uniformes. De forma a contribuir para o aperfeiçoamento do modelo, é

proposto um método onde as correlações podem ser geradas individualmente e a mistura dos gases se processa posteriormente, no momento da solução das intensidades radiantes. Diferente de outras propostas para misturas envolvendo o modelo WSGG, a quantidade de equações para a solução da intensidade radiante permanece a mesma, mantendo o mesmo tempo computacional independente do número de gases na mistura, mas ainda mantendo a acurácia da solução.

1.3 Organização do trabalho

Após este capítulo introdutório, o Capítulo 2 apresenta as equações do transporte radiante, usadas para calcular o termo fonte radiante e o fluxo de calor radiante, assim como os métodos numéricos utilizados para resolver as equações apresentadas. Entre eles, estão o método das ordenadas discretas e o método das diferenças finitas. Para que sejam resolvidas essas equações, é necessário modelar o coeficiente de absorção dos gases resultantes do processo de combustão. Assim, no Capítulo 3 são apresentados os principais modelos usados na literatura para a modelagem do coeficiente de absorção. São discutidos os detalhes usados no cálculo LBL e nos modelos GG, WSGG, SLW e CW. No Capítulo 3, também são apresentadas as propriedades da fuligem e como são feitas as considerações para misturas de gás e particulado. No Capítulo 4, são apresentados os resultados, onde são feitas as comparações entre os modelos de radiação apresentados no Capítulo 3. Finalizando, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões e propostas de continuidade para o presente trabalho.

2 SISTEMA DE EQUAÇÕES DA RADIAÇÃO TÉRMICA

A transferência de calor por radiação pode ser compreendida como o transporte de energia térmica através de ondas eletromagnéticas, emitidas por um meio sólido, líquido ou gasoso ou através do conceito de fótons. O esforço na modelagem espectral de gases participantes é justificado pela complexa variação das propriedades radiantes para esses meios, sendo que algumas particularidades da radiação podem ser mencionadas, como a não linearidade em relação à temperatura, devido à sua dependência da quarta potência, ou o efeito de auto-alargamento espectral para o vapor d'água. A não linearidade da temperatura implica que em altas temperaturas a radiação tende a ser dominante em relação aos outros mecanismos de transferência de calor. O fenômeno de auto-alargamento implica que com mudanças na pressão parcial, o H₂O sofre alterações desproporcionais na sua absorção. Outro fato relevante é o de que a radiação se transmite no vácuo, o que resulta em trocas de energia mesmo na ausência de um meio entre a fonte e o receptor.

De modo a compreender como ocorrem os processos de propagação da radiação térmica, bem como as formas como se comportam superfícies e meios participantes, é necessário compreender os vários conceitos envolvidos na transferência radiante, dentre os quais se destacam a intensidade de radiação emitida, absorvida, espalhada e as simplificações impostas ao meio.

2.1 Energia Emitida por uma Superfície

Para calcular a taxa de energia radiante emitida, considera-se inicialmente uma área infinitesimal dA , em uma temperatura T , centrada na origem de um plano cartesiano xyz , que emite radiação em um intervalo de comprimento de onda $d\lambda$, através de um ângulo sólido $d\omega$, conforme ilustra a Figura 2.1. A taxa de energia radiante que deixa a superfície é então:

$$d^3 q_{R,\lambda}''(\theta, \varphi, T) d\lambda = I_\lambda(\theta, \varphi, T) dA \cos \theta d\omega \quad (2.1)$$

onde $q_{R,\lambda}''$ é o fluxo de calor radiante em um determinado comprimento de onda, I_λ é a intensidade direcional espectral, o ângulo sólido é considerado como $d\omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, θ e φ indicam o direcionamento da intensidade radiante.

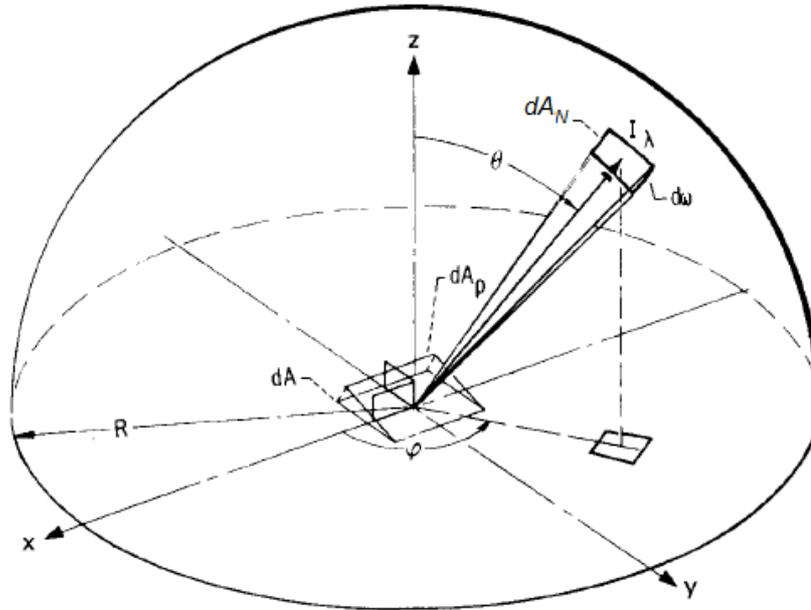


Figura 2.1. Intensidade de radiação do elemento de área dA através do ângulo sólido $d\omega$ [Siegel e Howell, 2002].

Assim, a intensidade de radiação que deixa a superfície dA , é dada por:

$$I_\lambda(\theta, \varphi, T) = \frac{d^3 q_{R,\lambda}''(\theta, \varphi, T) d\lambda}{dA \cos\theta d\omega} \quad (2.2)$$

Pelas Equações 2.1 e 2.2, é possível perceber a dependência da radiação em relação aos ângulos de emissão (θ e φ). Através da integração da equação da intensidade radiante, em função dos ângulos e em função do comprimento de onda, é possível encontrar resultados em termos totais. Para computarmos totalmente a energia radiante que provém de uma superfície, além da fração emitida pela superfície de acordo com sua temperatura, temos a fração de energia refletida. A soma da parte emitida com a parte refletida de energia é chamada de radiosidade.

As relações utilizadas referentes à radiação emitida pela superfície podem ser usadas da mesma forma para a radiação que incide sobre a mesma. A intensidade da radiação

incidente é relacionada a um importante fluxo radiante, a irradiação, que totaliza a radiação incidente de todas as direções.

2.2 Energia do Corpo Negro

Para compreender as características radiantes das superfícies, é importante abordar as características do corpo negro. Como um absorvedor perfeito e um emissor perfeito, o corpo negro é uma superfície ideal, que serve de padrão contra o qual as propriedades radiantes das superfícies reais são comparadas. O corpo negro apresenta as seguintes propriedades:

I. Absorve toda a energia radiante incidente, independente do comprimento de onda e da direção;

II. Para uma dada temperatura e um certo comprimento de onda, nenhuma superfície emite mais energia radiante que o corpo negro;

III. O corpo negro é um emissor difuso, ou seja, a radiação emitida independe da direção.

A partir de dados experimentais e valendo-se dos fundamentos termodinâmicos, Max Planck deduziu a equação que descreve a intensidade de radiação espectral do corpo negro em uma dada temperatura e em um dado comprimento de onda. A intensidade de radiação indica a radiação emitida, e o termo “espectral” é utilizado para denotar a dependência entre o comprimento de onda e a intensidade da radiação. Esta equação é conhecida como “distribuição de Planck”, e apresenta a seguinte forma:

$$I_{\eta,b}(T) = \frac{2 C_1 \eta^3}{\exp\left(\frac{C_2 \eta}{T}\right) - 1} \quad (2.3)$$

onde C_1 e C_2 são constantes de radiação e valem, respectivamente, $0,5955 \times 10^8 \text{ W} \cdot \mu\text{m}^4/\text{m}^2$ e $1,4387 \times 10^4 \mu\text{m} \cdot \text{K}$, η refere-se ao número de onda, que corresponde ao inverso do comprimento de onda, ou, $1/\lambda$, e o subíndice b refere-se ao corpo negro.

Reescrevendo a equação da emissão do corpo negro na forma de poder emissivo, que implica na emissão em todas as direções, temos:

$$e_{\eta,b}(T) = \frac{2\pi C_1 \eta^3}{\exp\left(\frac{C_2 \eta}{T}\right) - 1} \quad (2.4)$$

De outra forma, através da Lei de Stefan-Boltzmann, é possível obter a energia radiante emitida por um corpo negro, apenas em função da temperatura, integrando a Equação 2.4 em função do comprimento de onda. O resultado é expresso como:

$$e_b(T) = \sigma T^4 \quad (2.5)$$

onde $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$. Este é o poder emissivo total do corpo negro, que representa o fluxo de radiação, emitido por uma superfície unitária em uma dada temperatura absoluta T . Ainda, através desta relação, pode-se obter a intensidade de radiação total associada à emissão do corpo negro, dada por:

$$I_b(T) = \frac{1}{\pi} \sigma T^4 \quad (2.6)$$

Uma propriedade importante da superfície é a emissividade, que consiste na relação entre o poder emissivo real da superfície e o poder emissivo do corpo negro, dado pela seguinte equação:

$$\varepsilon(T) = \frac{e(T)}{e_b(T)} \quad (2.7)$$

A emissividade é um parâmetro de emissão para superfícies, sendo que no caso de um meio gasoso ou particulado (meio participante), esse parâmetro é denominado emitância. A emitância total ε corresponde ao quanto um meio participante é capaz de emitir energia, comparada com a energia emitida pelo corpo negro. A emitância espectral ε_η corresponde à mesma propriedade, porém em um determinado número de onda, tendo assim uma dependência no espectro radiante. A emitância total é a integração em todo o espectro da intensidade de radiação emitida por um meio participante comparada ao poder emissivo total de um corpo negro, na forma:

$$\varepsilon(T) = \frac{\int_0^{\infty} I_{\eta,b} \varepsilon_{\eta}(T) d\eta}{\int_0^{\infty} I_{\eta,b} d\eta} \quad (2.8)$$

Utilizando a Lei de Kirchhoff (onde temos que a emitância é igual a absorptância, $\varepsilon_{\eta} = \alpha_{\eta}$) e substituindo a absorptância espectral por $[1 - \exp(-\kappa_{\eta}S)]$ obtém-se a seguinte equação para a emitância total:

$$\varepsilon(T) = \pi \frac{\int_0^{\infty} I_{\eta,b} [1 - \exp(-\kappa_{\eta}S)] d\eta}{\sigma T^4} \quad (2.9)$$

onde κ_{η} é o coeficiente de absorção do meio participante dado em m^{-1} e S é o caminho percorrido pela radiação, dado em m.

2.3 Radiação em um Meio Participante

Considera-se como meio participante toda a substância que influencia o transporte radiante entre superfícies. O meio participante pode absorver, emitir ou espalhar energia radiante, dependendo das suas propriedades, sendo os gases polares, como o monóxido e o dióxido de carbono, o metano e o vapor d'água alguns exemplos. Ar e gases monoatômicos, ou apolares, são transparentes à radiação térmica em temperaturas usuais de engenharia. Para os gases a modelagem radiante apresenta complicações pelo fato de que, ao contrário da radiação a partir de um sólido ou de um líquido, que é distribuída continuamente em função do comprimento de onda, a radiação é emitida em intervalos de comprimento de onda específicos, denominados bandas. A Figura 2.2 mostra essa tendência para a absorptância do dióxido de carbono. Além disso, a radiação em gases não é um fenômeno de superfície, mas sim um fenômeno volumétrico.

As irregularidades presentes na absorptância dos gases decorrem dos vários tipos de transição de energia que ocorrem nos mesmos, que são compostos de moléculas, átomos, íons e elétrons livres, cada qual com níveis diferentes de energia. Sob o ponto de vista atômico, o processo de radiação pode ser entendido através do conceito dos fótons, a unidade básica de

radiação. Emissão e absorção ocorrem quando fótons são liberados e capturados, respectivamente, provocando transições de energia.

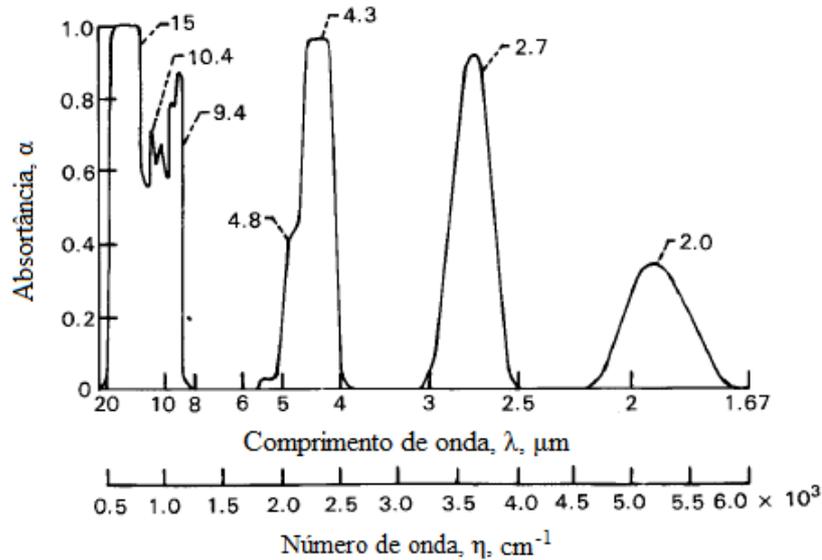


Figura 2.2 – Absortância espectral direcional do CO₂ ao longo do comprimento de onda [Siegel e Howell, 2002].

Podem ocorrer quatro tipos de transição de energia: *bound-bound*, *bound-free*, *free-bound* e *free-free*. No primeiro caso, o fóton é absorvido ou emitido por um átomo ou molécula e não se verifica recombinação de íons e elétrons, mas sim um salto quântico de energia de um estado de vibração, rotação ou eletrônico para outro. Uma vez que essas variações de energia ocorrem aos saltos, os coeficientes de absorção e emissão são funções que variam abruptamente com o comprimento de onda. A absorção resultante da transição *bound-free* ocorre quando o átomo absorve energia suficiente para causar ionização, de modo que o íon e o elétron ficam livres para assumir qualquer energia cinética. Do contrário, quando o elétron e o íon se combinam, ocorre emissão *free-bound*, onde não há saltos quânticos de energia e os coeficientes de absorção e emissão variam continuamente no espectro. Por fim, a transição *free-free* é observada quando um elétron interage eletricamente com um íon, liberando ou capturando o fóton. Também nesse último caso, os coeficientes variam suavemente com o comprimento de onda. A radiação em problemas de engenharia geralmente envolve gases que participam com transições nos estados de vibração ou rotação (*bound-bound*) e que, desse modo, têm coeficientes de absorção que variam bruscamente com o comprimento de onda.

2.4 Atenuação da Intensidade Devido à Absorção e ao Espalhamento

Considera-se a radiação espectral de intensidade I_η que incide sobre um elemento de volume com uma espessura dS , onde o mesmo absorve e espalha radiação, como mostrado na Figura 2.3. Conforme a radiação cruza através de dS , a intensidade radiante é reduzida devido à absorção do meio e ao espalhamento. Através de observações, constatou-se que a alteração na intensidade radiante em um meio participante é dependente da magnitude da intensidade naquele ponto e de um coeficiente de proporcionalidade K_η , o qual depende das propriedades locais do meio. A diferença de intensidade entre dois pontos é então determinada por:

$$dI_\eta = -K_\eta(S)I_\eta dS \quad (2.10)$$

onde K_η é também conhecido como coeficiente de extinção espectral do meio e S é a coordenada espacial. Este coeficiente é uma propriedade física e é uma função da temperatura T , pressão P , fração molar Y e número de onda η da radiação incidente, $K_\eta = K_\eta(T, P, Y)$. Integrando a Equação 2.10 sobre um comprimento finito de caminho S , temos:

$$\int_{I_\eta(0)}^{I_\eta(S)} \frac{dI_\eta}{I_\eta} = -\int_0^S K_\eta(S) dS \quad (2.11)$$

onde $I_\eta(0)$ é a intensidade na origem do caminho e $I_\eta(S)$ é a intensidade no final do caminho. O resultado da integração fornece:

$$I_\eta(S) = I_\eta(0) \exp \left[-\int_0^S K_\eta(S) dS \right] \quad (2.12)$$

A Equação 2.12 é denominada Lei de Bouguer. Esta equação mostra que, como uma consequência da proporcionalidade mostrada na Equação 2.10, a intensidade da radiação espectral ao longo de um caminho é atenuada exponencialmente conforme passa através de um meio que absorve e espalha (não incluindo a emissão local ou o espalhamento na direção

de S).

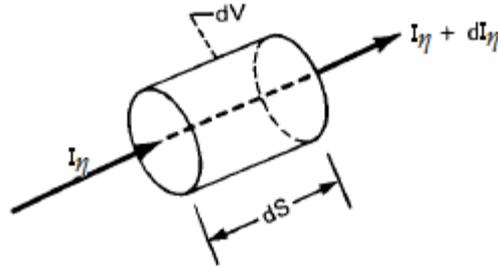


Figura 2.3 - Intensidade incidente sobre um elemento de espessura dS que absorve e espalha radiação [Siegel e Howell, 2002].

O coeficiente de extinção consiste de duas partes, o coeficiente de absorção $\kappa_\eta(T, P, Y)$ e o coeficiente de espalhamento $\sigma_\eta(T, P, Y)$:

$$K_\eta(T, P, Y) = \kappa_\eta(T, P, Y) + \sigma_\eta(T, P, Y) \quad (2.13)$$

Conforme apresentado em Smith et al., 1982, o coeficiente de extinção (e consequentemente os coeficientes de absorção e de espalhamento) pode ser escrito em função da pressão parcial das espécies participantes. Desta forma, tem-se:

$$K_{\eta,p} = \kappa_{\eta,p} + \sigma_{\eta,p} = \frac{K_\eta}{p} = \frac{\kappa_\eta}{p} + \frac{\sigma_\eta}{p} \quad (2.14)$$

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

Em meios em que o espalhamento pode ser negligenciado, ou seja, onde $\sigma_\eta \approx 0$, temos que $K_\eta = \kappa_\eta$, e a Equação 2.10 torna-se:

$$dI_\eta = -\kappa_\eta(S) I_\eta dS \quad (2.15)$$

Se adicionalmente κ_η não é função da posição, como é a situação em um meio com propriedades uniformes, tal como em situações isotérmicas e homogêneas, a Equação 2.12

simplifica-se em:

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0) \exp(-\kappa_{\eta} S) \quad (2.16)$$

Um coeficiente adimensional muito útil pode ser definido a partir do fator exponencial que aparece na Equação 2.12, denominado espessura óptica ou opacidade do caminho de comprimento S :

$$\tau_{\eta}(S) = \int_0^S K_{\eta}(S) dS \quad (2.17)$$

de tal forma que a Equação 2.12 torna-se:

$$I_{\eta}(S) = I_{\eta}(0) \exp[-\tau_{\eta}(S)] \quad (2.18)$$

onde $\tau_{\eta}(S)$ é função de todos os valores de K_{η} entre 0 e S . Como K_{η} é função de parâmetros locais P , T e Y , a espessura óptica também é função dessas condições ao longo do caminho. A espessura óptica é uma medida da habilidade de uma trajetória em atenuar a radiação de um dado comprimento de onda: uma espessura óptica elevada resulta em grande atenuação; uma pequena espessura óptica resulta em uma atenuação reduzida.

Para um meio com composição, temperatura e pressão uniformes, ou para um meio com K_{η} independente de T , P e Y , a Equação 2.17 torna-se:

$$\tau_{\eta}(S) = K_{\eta} S \quad (2.19)$$

Se $\tau_{\eta}(S) \gg 1$, o caminho S no meio é denominado opticamente espesso; se $\tau_{\eta}(S) \ll 1$, o caminho S no meio é opticamente fino.

2.5 Aumento da Intensidade Devido a Emissão e ao Espalhamento

Para a emissão de energia em um meio participante, é necessário considerar um volume elementar dV do meio, com um coeficiente de absorção κ_{η} , (conforme ilustra a Figura

2.4). Assume-se que dV esteja no centro da cavidade esférica, que a superfície é negra, possui raio R e está a uma temperatura uniforme T . O espaço entre dV e a superfície da cavidade está preenchido com um meio não-participante. A intensidade espectral incidente sobre a área dA_s (área que limita dV), emitida pela superfície dA , é equivalente a $I_\eta(0) = I_{\eta,b}(T)$, ou seja, igual a intensidade do corpo negro. A energia emitida por dA e absorvida por todo volume dV é encontrada pela integração sobre dV (sobre todos os elementos $dS dA_s$), de forma a obter $I_{\eta,b}(T) \kappa_\eta dV d\eta d\omega$. Para obtermos toda a energia incidente sobre dV a partir de toda a superfície da cavidade negra esférica, integra-se a intensidade sobre todos os ângulos sólidos, obtendo-se $4\pi \kappa_\eta I_{\eta,b}(T) dV d\eta$.

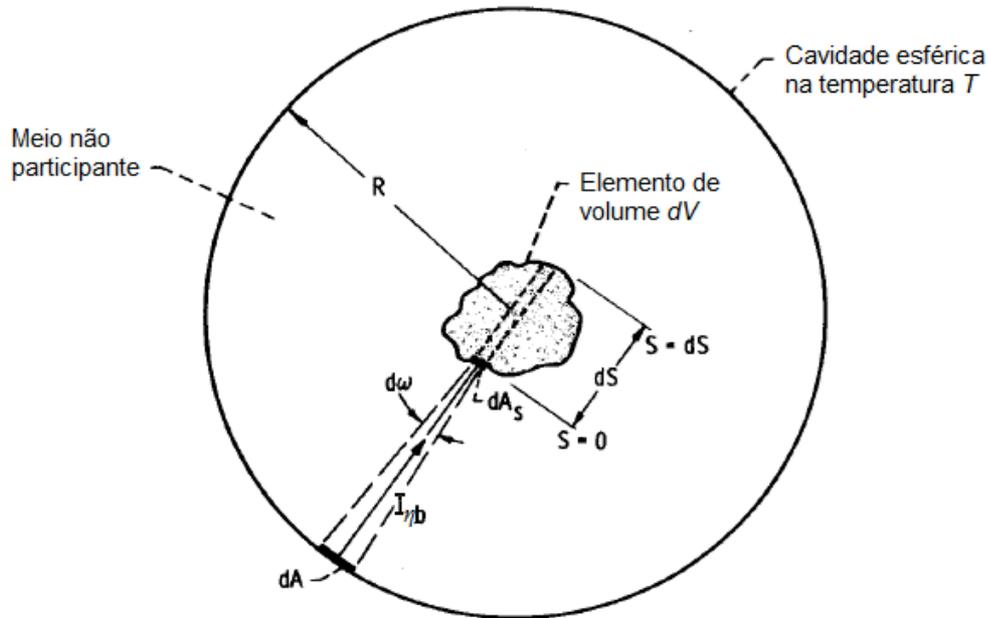


Figura 2.4 - Geometria utilizada para a dedução do aumento da intensidade de radiação [Siegel e Howell, 2002].

Para manter o equilíbrio no interior da cavidade, dV deve emitir energia igual àquela absorvida. Assim, a emissão espectral por um volume elementar isotérmico é dada por:

$$d^3 q_{R,\lambda}'' = 4\pi \kappa_\eta I_{\eta,b}(T) dV d\eta = 4\kappa_\eta e_{\eta,b}(T) dV d\eta \quad (2.20)$$

A Equação (2.20) é válida para volumes elementares dV suficientemente pequenos, de

tal forma que toda energia emitida dentro de dV escape antes de ser reabsorvida no próprio volume.

Para todas as condições consideradas, quando ocorre uma emissão de forma uniforme em todas as direções, a intensidade dI_η de radiação emitida por um elemento de volume para qualquer direção é obtida dividindo a Equação 2.20 por $4\pi d\eta$ e pela área da seção transversal dA_s , obtendo-se:

$$dI_{\eta,e}(T, P, Y) = \kappa_\eta(T, P, Y) I_{\eta,b}(T) dS \quad (2.21)$$

onde o subíndice e refere-se à parcela emitida.

Ao incidir sobre uma partícula, a radiação pode ser simplesmente redirecionada, ocasionando o fenômeno do espalhamento. Para determinar a intensidade espalhada, deve-se conhecer a distribuição direcional, a qual é dada por uma função de fase (Φ).

Considerando a radiação dentro do ângulo sólido $d\omega_i$ que é incidente sobre dA , conforme a Figura 2.5, a porção da intensidade incidente que é espalhada no intervalo dS é dada pela equação:

$$\frac{dI_{\eta,s}}{I_\eta} = \sigma_\eta(S) dS \quad (2.22)$$

onde o subíndice s refere-se à parcela espalhada. Podendo a Equação 2.22 ser reescrita na forma:

$$dI_{\eta,s} = \sigma_\eta I_\eta dS \quad (2.23)$$

Como mostrado na Figura 2.5, a intensidade radiante espalhada produz uma distribuição de intensidade em função dos ângulos θ e φ . A intensidade espalhada na direção θ - φ é definida como a energia espalhada naquela direção por unidade de ângulo sólido da direção espalhada e por unidade de área normal e ângulo sólido da radiação incidente:

$$dI_{\eta,s}(\theta, \varphi) \equiv \frac{\text{energia espectral espalhada na direção } (\theta, \varphi)}{d\omega_s dA d\omega_i d\eta} \quad (2.24)$$

A função de fase $\Phi(\theta, \phi)$ descreve a distribuição angular da intensidade espalhada. Ela relaciona a magnitude direcional de $dI_{\eta,s}(\theta, \phi)$ com a intensidade total espalhada dada por:

$$dI_{\eta,s}(\theta, \phi) = dI_{\eta,s} \frac{\Phi(\theta, \phi)}{4\pi} = \sigma_{\eta} I_{\eta} dS \frac{\Phi(\theta, \phi)}{4\pi} \quad (2.25)$$

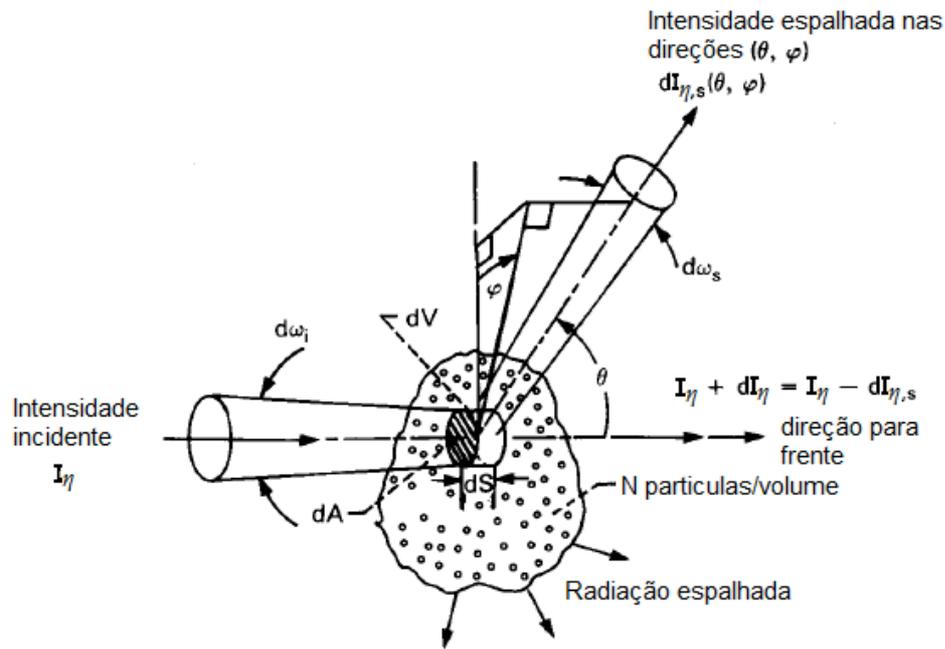


Figura 2.5 - Espalhamento da intensidade de radiação incidente dentro do ângulo sólido $d\omega_i$ para a direção (θ, ϕ) [Siegel e Howell, 2002].

A relação entre $dI_{\eta,s}$ e $dI_{\eta,s}(\theta, \phi)$ é dada por:

$$dI_{\eta,s} = \int_{\omega_s=0}^{4\pi} dI_{\eta,s}(\theta, \phi) d\omega_s \quad (2.26)$$

Então, substituindo a Equação 2.25 na Equação 2.26, encontra-se a função de fase:

$$\Phi(\theta, \phi) = \frac{dI_{\eta,s}(\theta, \phi)}{(1/4\pi) \int_{\omega_s=0}^{4\pi} dI_{\eta,s}(\theta, \phi) d\omega_s} \quad (2.27)$$

Para calcular o espalhamento a partir de todas as direções, considera-se a incidência da radiação a um ângulo θ, ϕ , com intensidade de radiação $I_\eta(\theta, \phi)$, conforme mostrado na Figura 2.6. Quando esta intensidade atinge dV , ela passa através de uma camada de meio participante igual a $dS/\cos\theta$. Para a radiação na direção S , a intensidade espalhada a partir de $I_\eta(\theta, \phi)$ na direção de $I_\eta(S)$ é:

$$dI_{\eta,s} = \sigma_\eta I_\eta(\theta, \phi) \frac{dS}{\cos\theta} \frac{\Phi(\theta, \phi)}{4\pi} \quad (2.28)$$

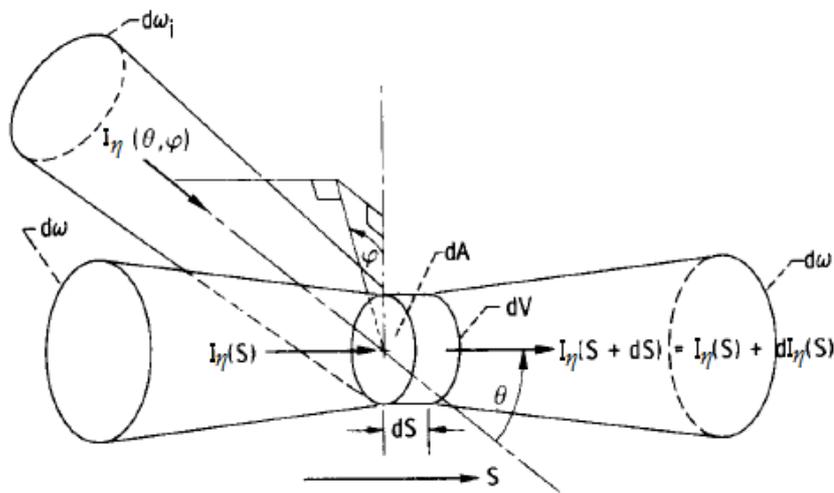


Figura 2.6 - Espalhamento de energia na direção S [Siegel e Howell, 2002].

Entretanto, $dI_{\eta,s}$ é definida como a energia na direção espalhada por unidade de número de onda, por unidade de ângulo sólido espalhado, por unidade de ângulo sólido incidente e por unidade de área normal à intensidade de radiação incidente. Dessa forma, a energia espectral espalhada na direção S como um resultado de $I_\eta(\theta, \phi)$ é, pelo uso da Equação 2.28:

$$dI_{\eta,s} d\omega d\omega_i d\eta dA \cos\theta = \sigma_\eta I_\eta(\theta, \phi) dS \left[\frac{\Phi(\theta, \phi)}{4\pi} \right] d\omega d\omega_i d\eta dA \quad (2.29)$$

Dividindo a Equação 2.29 por $d\omega d\omega_i d\eta dA$, a contribuição desta energia espalhada para a intensidade espectral na direção S é, portanto, $\sigma_\eta I_\eta(\theta, \phi) [\Phi(\theta, \phi)/4\pi] d\omega_i dS$. Para

considerar as contribuições do espalhamento a partir de todas as direções (θ, ϕ) , esta é integrada sobre todos os ângulos $d\omega_i$. Considerando que as partículas espalhadas são orientadas randomicamente, de tal forma que a seção transversal de espalhamento σ_η seja independente da direção incidente, o aumento de intensidade na direção S pelo espalhamento que atinge o meio é, portanto:

$$dI_{\eta,s} = \frac{\sigma_\eta dS}{4\pi} \int_{\omega_i=0}^{4\pi} I_\eta(\theta, \varphi) \Phi(\theta, \varphi) d\omega_i \quad (2.30)$$

2.6 Equação da Transferência Radiante

Na solução da equação da transferência radiante no meio participante, é necessário o balanço de energia radiante em cada volume infinitesimal do meio. Esse balanço aparece na equação da energia na forma de um divergente do fluxo de energia radiante que atravessa as fronteiras do volume. Fisicamente esse termo corresponde a uma taxa de energia radiante gerada por unidade de volume, e pode ser tratada na forma de um termo fonte radiante.

Ao passar através de uma camada do meio participante, a radiação térmica é reduzida pela absorção e pelo espalhamento, sendo também incrementada pela emissão e pelo espalhamento. Na equação geral da radiação térmica, devemos considerar todas as emissões e absorções executadas pelo meio, além da propriedade de espalhamento da partícula, para uma determinação precisa da intensidade radiante. A equação da transferência radiante então é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{dI_\eta}{dS} = & \kappa_\eta(S) I_{\eta,b}(S) - \kappa_\eta(S) I_\eta(S, \omega) - \sigma_\eta(S) I_\eta(S, \omega) \\ & + \frac{\sigma_\eta(S)}{4\pi} \int_0^{4\pi} I_\eta(S, \omega_i) \Phi(\omega, \omega_i) d\omega_i \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde ω é o ângulo sólido e o subíndice i refere-se à direção incidente.

Na Equação 2.31, o primeiro termo do lado direito da equação representa o aumento na intensidade devido à emissão do meio participante, o segundo termo contabiliza a redução

devido a absorção, o terceiro e quarto termo consideram a redução e aumento na intensidade devido ao espalhamento da radiação.

Em determinados casos, simplificações na equação podem ser realizadas, de acordo com a precisão necessária para a solução, ou de acordo com as propriedades do meio participante em questão. Nos casos onde o espalhamento é desconsiderado, a Equação 2.31 é reduzida a:

$$\frac{dI_{\eta}}{dS} = \kappa_{\eta}(S)I_{\eta,b}(S) - \kappa_{\eta}(S)I_{\eta}(S, \omega) \quad (2.32)$$

2.7 Método das Ordenadas Discretas

O método das ordenadas discretas é baseado em uma representação discreta dos efeitos direcionais na intensidade radiante, sendo uma extensão do método de dois fluxos por estender a divisão do ângulo sólido em mais do que dois hemisférios. Por isso, também pode ser denominado, de modo mais incomum, em método multifluxos. A solução para o problema de transporte é encontrada resolvendo a equação de transferência radiativa (RTE) para um conjunto de direções discretas que totalizam o ângulo sólido de 4π . As integrais através do ângulo sólido são aproximadas por um esquema de quadratura numérica.

2.8 Relações Gerais

Para o desenvolvimento do método, é útil apresentar a equação geral da transferência de calor radiante; posteriormente, a intensidade em cada direção será resolvida sobre uma direção estabelecida. Conforme apresentado, a equação da transferência radiante, para um meio com absorção e emissão, percorrendo um caminho S , na direção de $d\omega$, suprimindo a dependência espectral por questão de conveniência, é:

$$\frac{dI}{dS} = \kappa(S)I_b(S) - \kappa(S)I(S, \omega) \quad (2.33)$$

No método das ordenadas discretas, as equações são resolvidas para uma série de n direções e as integrais solucionadas por esse método se transformam em uma quadratura numérica dada por:

$$\int_{4\pi} I(S, \omega) d\omega = \sum_{i=1}^n \Omega_i I_i(S) \quad (2.34)$$

onde Ω é o fator de ponderação associado à quadratura relativa à direção S . Dessa forma, as equações são aproximadas por uma série de direções representado um total de n equações, e a acurácia na solução da integral é dada pelo número de direções escolhido.

Assim, as equações apresentadas anteriormente para a RTE, por não possuírem o termo integral referente ao espalhamento, são escritas para as ordenadas discretas como:

$$\mu_m \frac{dI_m}{dS} = \kappa(S) I_b(S) - \kappa(S) I_m(S) \quad (2.35)$$

onde μ representa o cosseno diretor da intensidade I para cada direção e o subíndice m representa a direção da intensidade radiante.

A distribuição das intensidades tanto para o meio quanto para a parede podem ser observadas na Figura 2.7, onde, de acordo com um referencial r_w ou r_v é possível determinar as intensidades para cada volume de controle ΔV_w ou do elemento de parede.

A condição de contorno corresponde à intensidade de radiação que deixa a superfície da parede (que geralmente é sólida), em uma dada direção, e pode ser expressa como a soma das intensidades emitida e refletida, esta última sendo dependente das intensidades incidentes. Para uma superfície cinza, com origem em $S = 0$ e de localização r_w , temos:

$$I(r_w, S = 0) = \varepsilon_w(r_w) I_{b,w}(r_w) + \frac{1 - \varepsilon_w(r_w)}{\pi} \int_0^{2\pi} I(r_w) d\omega \quad (2.36)$$

onde o subíndice w refere-se à superfície da parede.

O último termo da Equação 2.36 representa a reflexão da parede. Com a solução das ordenadas discretas para a integração da reflexão, o sistema de equação torna-se:

$$I_m(r_w, S=0) = \varepsilon_w(r_w) I_{b,w}(r_w) + \frac{1 - \varepsilon_w(r_w)}{\pi} \sum_m \mu_{i,m'} \Omega_m I_{m'}(r_w) \quad (2.37)$$

onde m' representa a radiação incidente na superfície em uma dada direção e $\mu_{i,m'}$ é o cosseno diretor entre a direção m' e a coordenada i normal à superfície. Caso a emissividade da superfície seja igual a 1,0 (corpo negro), não existe reflexão, obtendo-se:

$$I(r_w, S=0) = I_{b,w}(r_w) \quad (2.38)$$

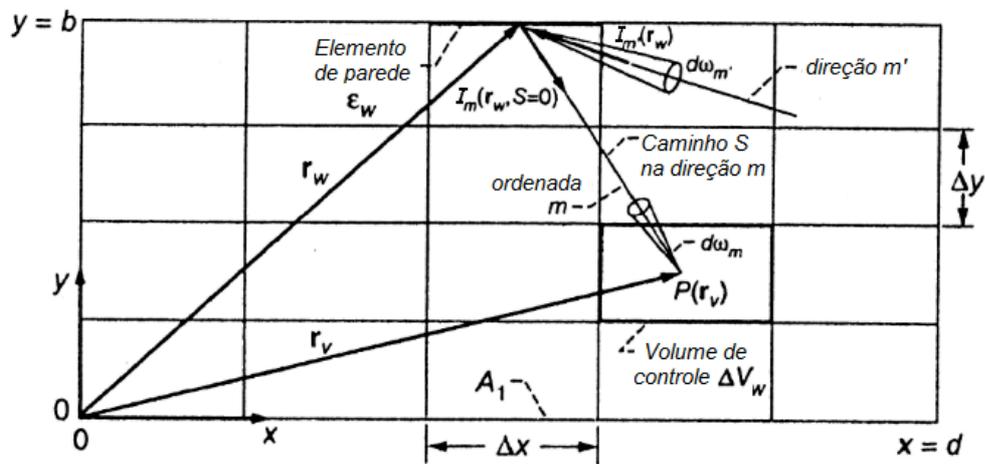


Figura 2.7 – Meio radiante em um sistema bidimensional dividido em diversos volumes de controle [Siegel e Howell, 2002].

As equações governantes são de primeira ordem e requerem apenas uma condição de contorno. As equações apresentadas juntamente com suas equações de contorno constituem um conjunto de n equações diferenciais parciais simultâneas, lineares e de primeira ordem para a solução da intensidade. Se a superfície não for negra, uma parcela de reflexão estará presente, necessitando da adição de mais um termo na equação, e assim as equações devem ser resolvidas de forma iterativa. Mesmo na ausência de reflexão, muitas vezes a distribuição de temperatura nas superfícies não é conhecida, mas deve ser calculada através das intensidades, estabelecendo novamente a necessidade de uma solução iterativa.

Com as intensidades determinadas, a integral-direcional pode ser calculada. O fluxo de radiação em um meio ou uma superfície pode ser encontrado pela equação:

$$q_R''(S) = \int_{4\pi} I(S, \omega) \cos \theta d\omega \cong \sum_m \mu_{i,m} \Omega_m I_m(S) \quad (2.39)$$

O termo fonte radiante pode ser determinado por:

$$\dot{q}_R(S) = \int_{4\pi} I(S, \omega) d\omega \cong \sum_m \Omega_m I_m(S) \quad (2.40)$$

2.9 Seleção das Ordenadas Discretas

Em problemas multidimensionais, o método das ordenadas discretas resulta em um conjunto de equações diferenciais parciais de primeira ordem, que geralmente devem ser resolvidos numericamente. Para os casos bi e tridimensional, a discretização da equação de transferência de calor por radiação para uma dada direção conduz a uma equação algébrica que relaciona a intensidade da radiação em um nó da malha com a intensidade de radiação nos nós vizinhos, sendo essa condição uma das principais características do método.

Para os casos unidimensionais uma simplificação do método é feita, onde as direções podem ser obtidas através das raízes de qualquer polinômio ortogonal (Legendre, Jacobi, Chebyshev, etc.) e os fatores de ponderação Ω_i são obtidos por uma função característica. Nas soluções obtidas neste trabalho, as direções foram obtidas através das raízes pela expansão dos polinômios de Legendre e os pesos através das funções de Abramowitz e Stegun (1972), dadas, respectivamente, pelas Equações. 2.41 e 2.42.

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left[(x^2 - 1)^n \right] \quad (2.41)$$

$$\Omega_i = \frac{2}{(1 - \mu_i^2) (P_n'(\mu_i))^2} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.42)$$

onde P_n é o polinômio de Legendre de grau n , μ_i são as raízes do polinômio e Ω_i são os fatores de ponderação em cada direção.

2.10 Solução da Equação Radiante Utilizando Ordenadas Discretas e Diferenças Finitas

Considerando um meio que absorve e emite a radiação, a equação do transporte radiante tem a forma da Equação 2.35. Como os valores de μ podem ser positivos ou negativos, a Equação 2.35 é dividida em duas. A equação então é reescrita com dependência espectral da seguinte forma:

$$\mu \frac{dI_{\eta}^{+}}{dS} = \kappa_{\eta}(S)I_{\eta,b}(S) - \kappa_{\eta}(S)I_{\eta}^{+}(S, \omega) \quad (2.43)$$

$$-\mu \frac{dI_{\eta}^{-}}{dS} = \kappa_{\eta}(S)I_{\eta,b}(S) - \kappa_{\eta}(S)I_{\eta}^{-}(S, \omega) \quad (2.44)$$

Onde, na primeira equação, são levados em conta os valores positivos de μ e, na segunda, os negativos, conforme ilustrado na Figura 2.8.

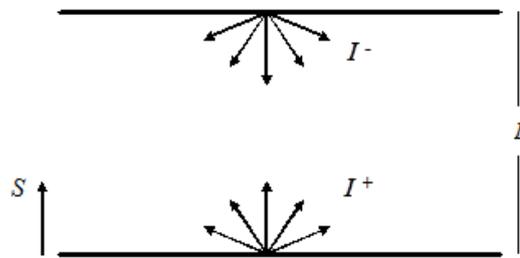


Figura 2.8 - Ordenadas discretas aplicadas a um problema unidimensional.

Assumindo-se que as paredes sejam negras, as condições de contorno têm a forma:

$$I_{\eta}^{+}(S = 0) = I_{\eta,b}(S = 0) \quad (2.45)$$

$$I_{\eta}^{-}(S = L) = I_{\eta,b}(S = L) \quad (2.46)$$

Para a discretização do operador d/dS das Equações 2.43 e 2.44, utiliza-se o método das diferenças finitas, onde por conveniência aplica-se uma diferença atrasada na Equação

2.43 e uma diferença avançada na Equação 2.44. Isto ocorre pelo fato de que o método das ordenadas discretas é dependente das condições de contorno, ou seja, as aproximações são dadas de acordo com a intensidade estabelecida no elemento de malha anterior. O uso da diferença centrada não é recomendado nesse caso, pois o sistema gerado pelo método das diferenças finitas não apresenta diagonal dominante, logo a convergência fica comprometida. Assim, aplicando as diferenças atrasada e avançada, obtêm-se:

$$I_{\eta}^{+}(S, \omega) = \frac{\mu_m I_{\eta}^{+}(S-1) + \Delta S \kappa_{\eta} I_{b,\eta}(S)}{\mu_m + \Delta S \kappa_{\eta}} \quad (2.47)$$

$$I_{\eta}^{-}(S, \omega) = \frac{\mu_m I_{\eta}^{-}(S+1) + \Delta S \kappa_{\eta} I_{b,\eta}(S)}{\mu_m + \Delta S \kappa_{\eta}} \quad (2.48)$$

onde ΔS é o passo da malha.

Depois de solucionadas as intensidades radiantes, o fluxo de radiação e o termo fonte radiante para cada posição S podem ser determinados. Para o fluxo de calor radiante, tem-se:

$$q_{R,\eta,m}^{\rightarrow}(S) = 2\pi \Omega_m \mu_m [I_{\eta,m}^{+}(S) - I_{\eta,m}^{-}(S)] \quad (2.49)$$

Para o termo fonte radiante, tem-se:

$$\dot{q}_{R,\eta,m}(S) = 2\pi \kappa_{\eta} \Omega_m [I_{\eta,m}^{+}(S) + I_{\eta,m}^{-}(S)] - 4\pi \kappa_{\eta} I_{\eta,b}(S) \quad (2.50)$$

As Equações 2.49 e 2.50 são determinadas em cada quadratura de acordo com cada fator de ponderação Ω_i em cada direção m . O valor total tanto para o fluxo de calor radiante quanto para o termo fonte radiante é determinado pelo somatório da equação em todas as direções e em todos os comprimentos de onda. Uma forma de verificar o balanço de energia é através da relação $\dot{q}_R(S) = -dq_R^{\rightarrow}(S)/dS$, o que também indica se a solução apresentada é conservativa.

3 PROPRIEDADES RADIANTES DOS GASES E DA FULIGEM

De acordo com a teoria quântica, a absorção e emissão de radiação térmica em gases deveriam ser representadas por linhas de espessura infinitesimal, correspondentes a números de onda associados a fótons com quantidades específicas de energia. Alguns mecanismos físicos, porém, alargam as linhas gerando linhas de absorção com espessura finita. Dentre os mecanismos possíveis, o alargamento por colisão é geralmente o mais importante para aplicações em engenharia, sendo o infravermelho a região de maior importância para a transferência de calor radiante [Siegel e Howell, 2002]. A construção do espectro de absorção dos gases, considerando o alargamento por colisão, é descrito pelo perfil de Lorentz segundo a equação:

$$C_{\eta}(\eta) = \sum_{\tau} \frac{s_i(T)}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (3.1)$$

onde C_{η} é a seção transversal de absorção, s_i é a intensidade integrada da linha i , η é o número de onda, η_i é a localização da linha no espectro, γ_i é a meia largura da linha, e T é a temperatura média. O somatório da Equação 3.1 inclui as linhas que estão dentro de um intervalo $\Delta\eta$, para as quais a contribuição para C_{η} é significativa. A meia largura γ_i pode ser calculada por (Predoi-Cross, 2008):

$$\gamma_i = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^{n_T} \left[p_c \gamma_{self,i} + (p - p_c) \gamma_{ar,i} \right] \quad (3.2)$$

onde $\gamma_{self,i}$ e $\gamma_{ar,i}$ são respectivamente as meias larguras considerando a colisão das moléculas da espécie química entre elas mesmas e a colisão com as moléculas do ar, p_c e p são a pressão parcial para as espécies participantes e a pressão total, T_{ref} é a temperatura de referência, igual a 296 K, e n_T é o coeficiente de auto-alargamento.

A integral da intensidade nas linhas do HITEMP 2010 é obtida na temperatura 1000 K, mas a mesma é convertida para uma temperatura de 296 K em sua compilação final para permitir que seja computada da mesma forma na maioria das rotinas usadas no banco de dados HITRAN. Para uma temperatura T , a integral da intensidade da linha é dada por:

$$s_i(T) = s_i(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \frac{\exp(-C_2 E_i/T)}{\exp(-C_2 E_i/T_{ref})} \frac{[1 - \exp(-C_2 \nu_i/T)]}{[1 - \exp(-C_2 \nu_i/T_{ref})]} \quad (3.3)$$

onde Q é a soma das funções de partição (depende da molécula em questão, do seu isótopo e da temperatura) e representa a soma de todos os estados de energia (vibracional, rotacional, torsional e elétrico), ν_i é a diferença de energia entre o estado inicial e o final, dado como um número de onda no vácuo, E_i é a energia no nível mais baixo, e C_2 é a segunda constante de Planck, igual a $1,43877 \text{ cm}\cdot\text{K}$. Todos os parâmetros necessários para gerar a seção de absorção na Eq. (3.1) são providos pelo HITEMP 2010, cujos nomes são dados por: Q , ν_i , E_i , $s_i(T_{ref})$, n_s , $\gamma_{self,i}$, $\gamma_{air,i}$ e η_i .

Obtido o valor de C_η é possível obter o valor do coeficiente de absorção espectral k_η , pela relação:

$$\kappa_\eta = p N C_\eta \quad (3.4)$$

onde N é o número de Loschmidt, dado por:

$$N = A \left(\frac{T_0}{T} \right) \quad (3.5)$$

sendo $A=2,479 \times 10^{19}$ moléculas/($\text{cm}^3 \text{atm}$) e $T_0 = 296 \text{ K}$.

Somente a partir da segunda metade do século 20, com o desenvolvimento da computação, é que se iniciou o desenvolvimento da espectroscopia voltada à radiação em gases participantes, primeiramente para cálculos atmosféricos. Atualmente existem disponíveis diversos bancos de dados, como o HITRAN (*high-resolution transmission molecular absorption database*), HITEMP (*high-temperature molecular spectroscopic database*) e CDSC (*high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank*).

O banco de dados HITRAN apresenta os parâmetros medidos na temperatura de 296 K para 39 tipos de moléculas, entre elas o H_2O e o CO_2 , que são os principais gases resultantes da combustão de hidrocarbonetos. Para estudos de combustão, é mais apropriada a utilização do banco de dados HITEMP, que é análogo ao banco de dados HITRAN, porém os dados são

obtidos em temperaturas elevadas (1000 K e 1500 K). A última atualização para o HITEMP foi publicada por Rothman et al., 2010, onde maiores detalhes a respeito do banco de dados podem ser encontrados.

Diferentes bancos de dados podem apresentar discrepâncias entre os valores das absorções para a mesma espécie química, na mesma temperatura e no mesmo número de onda, assim como versões diferentes para um mesmo banco de dados podem também trazer alterações. Uma comparação entre o HITEMP 1995 e 2010 pode ser verificada na Figura 3.1.

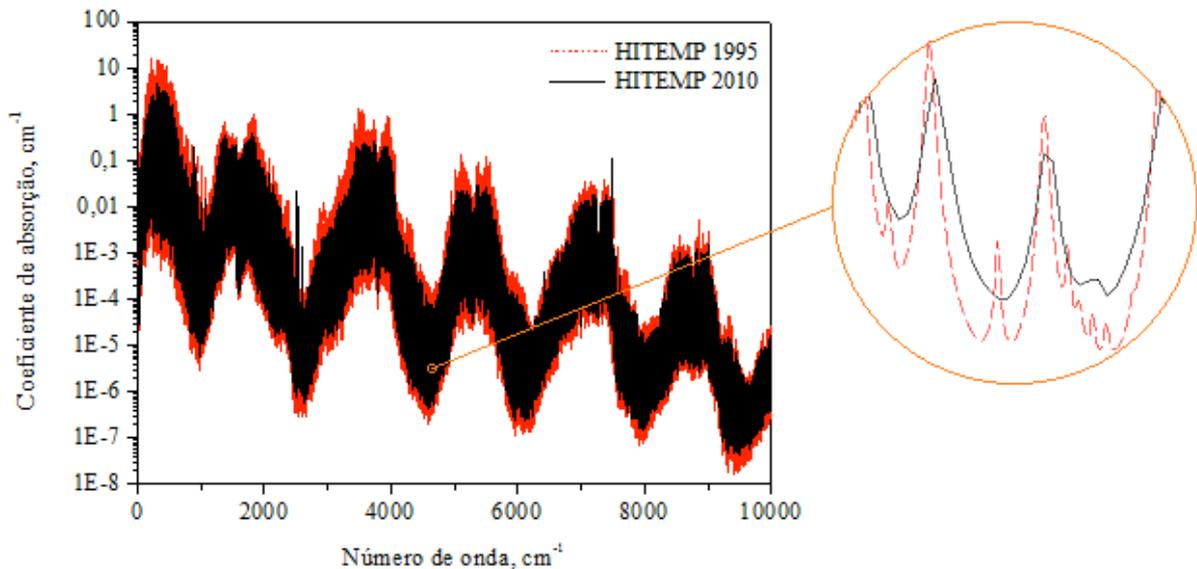


Figura 3.1 – Espectro obtido para 10% de H₂O à 1000 K.

Através dos bancos de dados espectrais é possível identificar a absorção para cada comprimento de onda, temperatura e concentração dos gases e, a partir destes, realizar os cálculos de transferência radiante nos mais diversos campos de temperatura e concentrações. O cálculo baseado em cada linha de absorção é denominado linha-por-linha (LBL – *line-by-line*) e pode ser utilizado como solução *benchmark* para a avaliação dos diversos modelos espectrais disponíveis na literatura.

3.1 Integração Linha-por-Linha (LBL)

A integração linha-por-linha (LBL) resolve a equação do transporte radiante em todos os números de onda, considerando o estado termodinâmico local da espécie química. Desta

forma, a equação a ser resolvida para cada posição S , considerando que o meio não espalha, tem a forma:

$$\frac{\partial I_{\eta}}{\partial S} = -\kappa_{\eta} I_{\eta} + \kappa_{\eta} I_{\eta,b} \quad (3.6)$$

onde κ_{η} é o coeficiente de absorção da espécie química, de acordo com o número de onda e $I_{\eta,b}$ é a emissão do corpo negro de acordo com o número de onda.

A menos de aproximações numéricas de ordem menor, o resultado da integração linha-por-linha pode ser considerado exato em relação às informações contidas nos bancos de dados espectrais, mas possui muitas limitações computacionais, pois, dependendo do caso a resolver, a solução torna-se inviável. A solução da Equação 3.6, utilizando o método das ordenadas discretas para o problema da transferência radiante e o método das diferenças finitas para a discretização do espectro, em um problema unidimensional, requer a solução de $L \times M \times N$ equações, onde L é o número de direções das ordenadas discretas, M é o número de pontos da malha e N é o número de coeficientes de absorção ou número de pontos espectrais. Por exemplo, considerando-se 30 direções, 200 pontos na malha e uma resolução espectral de $0,33 \text{ cm}^{-1}$, correspondendo a 30.000 coeficientes de absorção, o número de equações a ser resolvido é de 180 milhões. Para problemas bidimensionais, o número de equações a serem resolvidas cresce, inviabilizando a solução do problema com as ferramentas computacionais disponíveis atualmente. Por esta razão, para a viabilização dos cálculos, são utilizados modelos espectrais, que descrevem de forma mais simplificada o comportamento espectral.

3.1.1 Simplificações para a Integração LBL

As soluções LBL resultam na solução exata para o espectro radiante. Entretanto, devemos ter em mente que as propriedades dos gases mudam para cada estado termodinâmico, ou seja, para cada temperatura e para cada concentração os valores dos coeficientes de absorção podem ser alterados consideravelmente. Dessa maneira, seria necessário gerar dados referentes a cada temperatura e a cada concentração através do banco de dados HITEMP para que a solução final fosse a mais correta possível, o que por sua vez inviabilizaria os cálculos por um excesso de informações.

Pelas razões descritas, serão utilizadas relações para a temperatura que variam de 100 em 100 K, sendo que para cada valor entre as temperaturas geradas é feita uma interpolação linear. Esta simplificação não altera significativamente os resultados e mostra-se uma boa aproximação, conforme pode ser visto na Figura 3.2, onde intervalos que variam de 25 em 25 K, 50 em 50 K e 100 em 100 K apresentam uma boa concordância, mostrando a viabilidade da interpolação linear sem prejuízos para intervalos de 100 em 100 K. No total, foram geradas 22 temperaturas, entre 400 K e 2500 K. Em relação às concentrações das espécies químicas, o CO₂ possui uma alteração proporcional com a pressão parcial, por não sofrer efeitos referentes ao auto-alargamento das partículas, o que viabiliza aplicar uma simples relação de multiplicação a partir de um único banco de dados para obter os valores de absorção. Para o banco de dados referente ao H₂O não temos essa possibilidade, já que o auto-alargamento altera significativamente o espectro. Entretanto, a partir de valores próximos, como indicado nas Figuras 3.3a e 3.3b, é possível realizar uma interpolação sem afetar consideravelmente a solução final. Para o H₂O serão utilizadas relações de concentração de 1, 10, 20, 40, 60 e 100%; para o CO₂, apenas 100%.

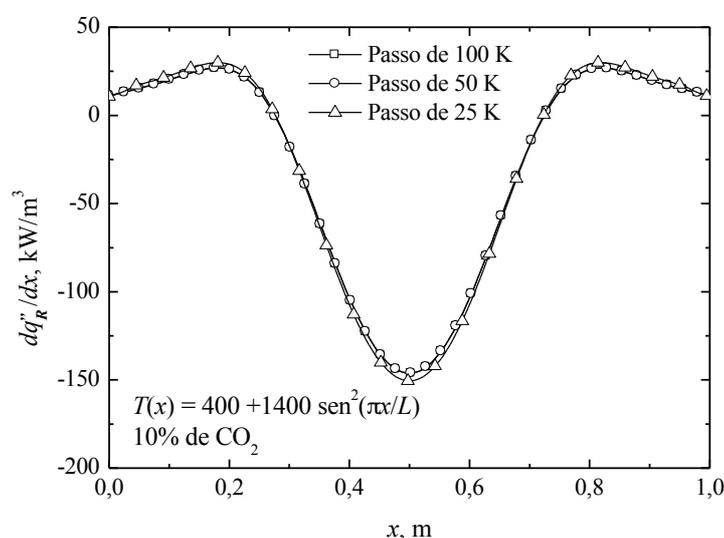


Figura 3.2 – Comparativo entre diferentes configurações de passo para diferentes passos de temperatura utilizando o CO₂ de acordo com o banco de dados HITEMP 2010.

O banco de dados HITEMP é formado por dezenas de milhares de linhas espectrais, traduzindo com precisão o comportamento do espectro de radiação dos gases. Entretanto, nem sempre é necessária a utilização completa do banco de dados, tanto por questões de esforço computacional, quanto por um menor número de linhas espectrais utilizadas responderem

com a acurácia desejada para a solução do problema, podendo assim haver simplificações. Para a solução LBL, no presente trabalho é utilizada uma resolução espectral de $0,33 \text{ cm}^{-1}$, correspondendo a 30.000 coeficientes de absorção, em um intervalo de 0 a 10.000 cm^{-1} no número de onda. Nos testes realizados, que podem ser verificados na Figura 3.4, mesmo para um número menor de pontos espectrais os resultados mostram-se coerentes, o que indica uma viabilidade na simplificação do espectro.

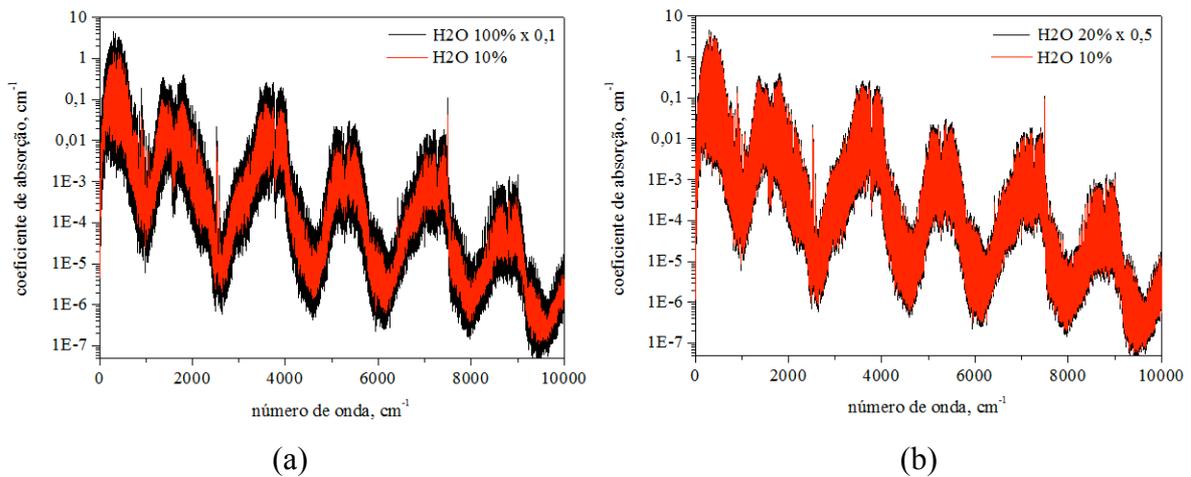


Figura 3.3 – Relações lineares para o Espectro do H_2O à 1000 K. (a) Comparativo do H_2O de 100% para 10%. (b) Comparativo do H_2O de 20% para 10%.

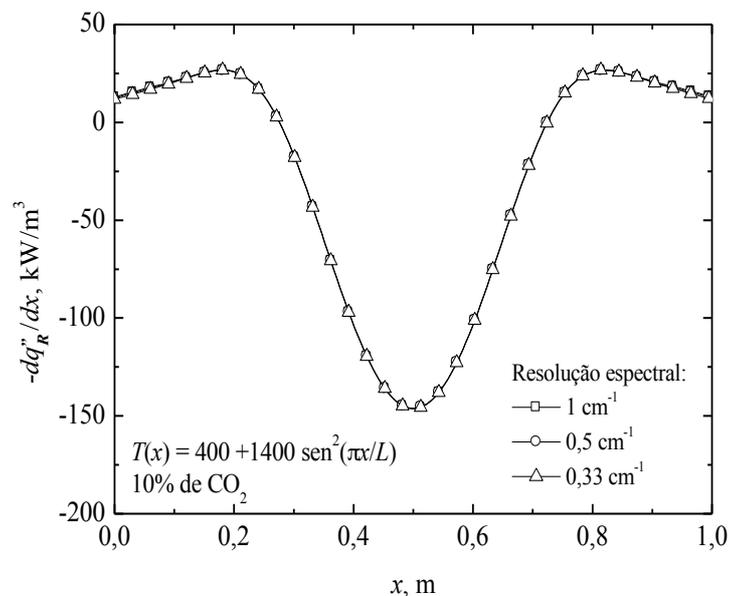


Figura 3.4 – Comparativo entre diferentes configurações de pontos espectrais para o CO_2 utilizando o banco de dados HITEMP 2010.

3.2 Modelos Espectrais

Os modelos espectrais buscam simplificar o comportamento espectral, reduzindo consideravelmente o tempo computacional na solução da intensidade radiante. Os principais modelos presentes na literatura são o GG (gás cinza), WSGG (soma-ponderada-dos-gases-cinza), SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais) e o CW (número de onda cumulativo), os quais serão analisados no presente trabalho.

3.2.1 O modelo GG

No modelo de gás cinza, considera-se que o coeficiente de absorção κ seja independente do número de onda, este é determinado como uma média do termo de emissão:

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{\eta,b} d\eta}{\int_{\eta} I_{\eta,b} d\eta} \quad (3.7)$$

O modelo GG é o de implementação mais simples dentre os modelos espectrais existentes, pois considera que o coeficiente de absorção da espécie química seja constante em todo o espectro. Como apresentado na Figura 2.2, Seção 2.3 do Capítulo 2, essa hipótese é muito rudimentar, observando-se que o coeficiente de absorção para uma espécie química gasosa varia fortemente com o número de onda. Apesar da pouca acurácia apresentada por esse modelo, ele ainda é muito utilizado devido à sua simplicidade. Diversos trabalhos podem ser citados utilizando o modelo GG, tais como Klason et al., 2008, Edge et al., 2011, Mossi et al., 2012 e Cassol et al., 2012.

3.2.2 O modelo WSGG

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) foi desenvolvido por Hottel e Sarofim, 1967. O modelo representa a variação espectral do coeficiente de absorção por N gases cinza, sendo que a fração de energia correspondente a cada gás cinza é equivalente à

fração da energia emitida por um corpo negro na temperatura local do gás. De acordo com o modelo, a emitância da espécie química de forma isotérmica pode ser aproximada por:

$$\varepsilon(S) = \sum_{j=1}^N a_j \left(1 - e^{-\kappa_{p,j} S}\right) \quad (3.8)$$

onde $\kappa_{p,j}$ é o coeficiente de absorção e a_j é o peso correspondente ao j -ésimo gás cinza. Diversos trabalhos auxiliam na implementação do modelo, como, por exemplo, Smith et al., 1982, que apresentaram os coeficientes de absorção para os gases cinza e obtiveram correlações para os pesos relacionados a cada coeficiente de absorção, considerando os gases CO₂ e H₂O, que são os principais gases resultantes do processo de combustão. Modest, 1991, incorporou o modelo WSGG à equação do transporte radiante, mostrando que essa equação pode ser resolvida por outros métodos de solução para a integração espacial, além do método das zonas. A equação do transporte com o modelo WSGG é descrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial I_j}{\partial S} = \kappa_{p,j} (a_j I_b - I_j) \quad (3.9)$$

onde S é o caminho percorrido, I_j é a intensidade do j -ésimo gás cinza, a_j é o peso correspondente, $\kappa_{p,j}$ é a absorção e I_b é a intensidade do corpo negro. O subíndice p denota a dependência de $\kappa_{p,j}$ em relação à pressão parcial, o que auxilia para soluções de meios participantes com concentração não homogênea.

Para o presente trabalho, as correlações utilizadas para o cálculo da intensidade radiante pelo modelo WSGG são baseadas no banco de dados HITEMP 2010, e foram desenvolvidas por Dorigon et al., 2013. A Tabela 4.1 apresenta os valores para tais coeficientes, através dos quais é possível encontrar os valores dos pesos a_j , que possuem uma dependência da temperatura dada pela relação:

$$a_j(T) = \sum_{i=0}^N b_{j,i} T^i \quad (3.10)$$

Tabela 3.1 - Valores dos coeficientes para o modelo WSGG. $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ [Dorigon et al., 2013].

j	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	0,05617	$78,44 \times 10^{-5}$	$-85,63 \times 10^{-8}$	$42,46 \times 10^{-11}$	$-74,4 \times 10^{-15}$
2	1,719	0,14260	$17,95 \times 10^{-5}$	$-1,077 \times 10^{-8}$	$-6,971 \times 10^{-11}$	$17,74 \times 10^{-15}$
3	11,370	0,13620	$25,74 \times 10^{-5}$	$-37,11 \times 10^{-8}$	$15,70 \times 10^{-11}$	$-22,67 \times 10^{-15}$
4	111,016	0,12220	$-2,327 \times 10^{-5}$	$-7,492 \times 10^{-8}$	$4,275 \times 10^{-11}$	$-6,608 \times 10^{-15}$

Valores válidos para temperaturas entre 400 e 2500 K.

3.2.3 O modelo SLW

O modelo SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais) foi desenvolvido por Denison e Webb, 1993, e representa um avanço nos modelos espectrais devido ao detalhamento com que lida com o espectro radiante, misturas de gases e meios não homogêneos e não isotérmicos. A equação do transporte radiante a ser resolvida no modelo SLW é a mesma proposta por Modest, 1991, para o modelo WSGG, sendo que a diferença está nos valores dos coeficientes de absorção e dos pesos correspondentes, os quais são obtidos pela função distribuição ALB, simplificada pelo método κ -correlacionado ou pela aproximação de escala. A equação para o transporte radiante em um meio sem espalhamento torna-se:

$$\frac{\partial I_j}{\partial S} = \kappa_j (a_j I_b - I_j) \quad (3.11)$$

onde a_j são os pesos do corpo negro e κ_j é o coeficiente de absorção.

A função distribuição ALB, utilizada para a solução de a_j e κ_j , é definida como a fração de energia do corpo negro nas partes em que o valor de C_η no espectro é menor que um valor prescrito C , como o ilustrado na Figura 3.4. As partes em que a função ALB é calculada estão representadas pelas regiões hachuradas. A função distribuição ALB é então expressa como:

$$F(C, T_b, T_g, p, Y) = \frac{1}{\sigma T_b^4} \sum_i \int_{\Delta\eta_i(C, T_b, p, Y)} e_{\eta, b}(\eta, T_b) d\eta \quad (3.12)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann e $e_{\eta, b}$ é a função de Planck avaliada no número de onda η na temperatura da fonte T_b . O subíndice i refere-se ao i -ésimo segmento espectral e o somatório é feito em todos os segmentos, cobrindo todo o espectro. A função também depende da temperatura da espécie química T_g , da pressão p e da concentração molar Y da espécie química. Sua variação vai de 0 a 1,0 conforme aumenta o valor da seção transversal C .

O método κ -correlacionado é baseado na observação de que sobre um intervalo espectral estreito, as oscilações do coeficiente de absorção ficam em torno de um mesmo valor para pequenas variações no número de onda. Por outro lado, quando o coeficiente de absorção apresenta valores muito próximos, a intensidade de radiação não se altera. Assim, para um determinado estado termodinâmico, assume-se que aquela faixa de números de onda e seus respectivos coeficientes de absorção podem servir como parâmetro para outro estado termodinâmico (na mesma região do espectro) e correlacionar o novo coeficiente de absorção, isto é, ao variar a concentração molar, a temperatura da espécie química ou a pressão, o método usa a hipótese de que o espectro sofre uma mudança apenas na amplitude, conforme a Figura 3.5.

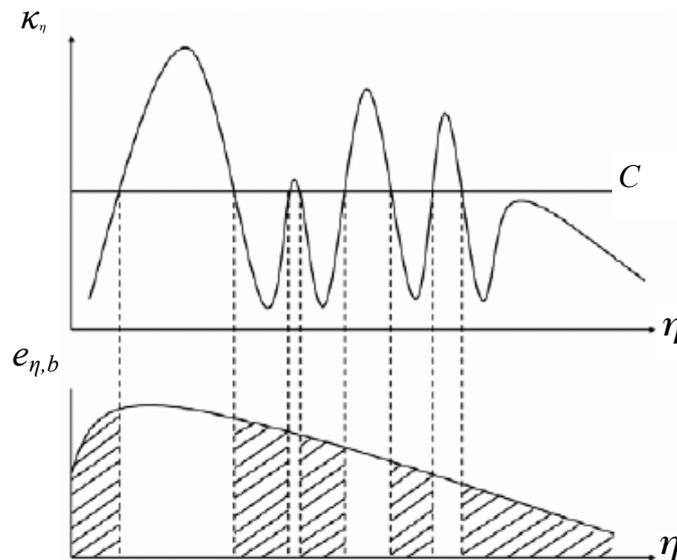


Figura 3.4 - Partes do espectro em que a função ALB é calculada.

Assim, existe uma seção transversal C_2 que intercepta o espectro $C_{2,\eta}$ exatamente nos mesmos números de onda em que a seção transversal C_1 intercepta o espectro $C_{1,\eta}$. A consideração do κ -correlacionado simplifica a resolução da função distribuição, de maneira que é necessária a criação de valores para apenas uma função, e as demais, para diferentes estados termodinâmicos, são obtidas através de uma interpolação linear.

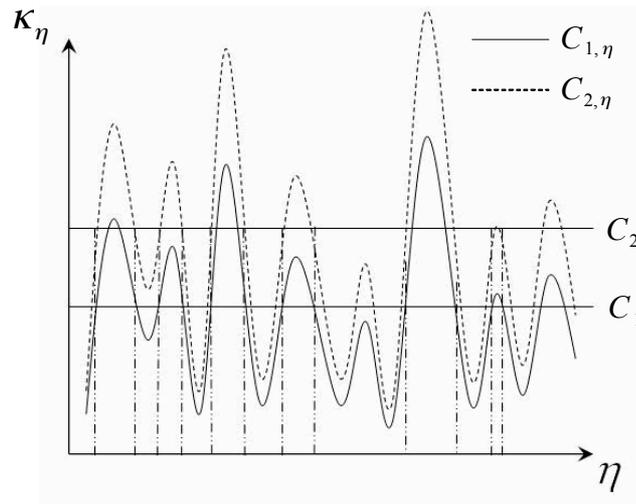


Figura 3.5 - Método κ -correlacionado.

De acordo com o κ -correlacionado, a máxima absorção ao longo do espectro sempre ocorrerá no mesmo número de onda, indiferente da composição, pressão e temperatura, e similarmente para todos os valores intermediários. Para a aproximação de escala, o valor do coeficiente de absorção será desmembrado em duas funções: uma variando de acordo com a temperatura, pressão e concentração; e outra dependente do comprimento de onda, de acordo com a equação:

$$C_{\eta}(\eta, T, p_T, Y_S) = \phi(T, p_T, Y_S) \psi(\eta) \quad (3.13)$$

onde a função $\psi(\eta)$ define apenas a dependência espectral. Considerando um espectro dado em um estado termodinâmico 1, a função ALB pode ser calculada pela integração da função de Planck ao longo de todos os segmentos do espectro onde $C_{1,\eta}$ é menor do que o valor prescrito C_j . Considerando um estado termodinâmico 2, se a Equação 3.14 é válida, então a absorção especificada pela seção de absorção será dada por:

$$C_j(T_2, p_{T,2}, Y_{S,2}) = C_j(T_1, p_{T,1}, Y_{S,1}) \phi(T_2, p_{T,2}, Y_{S,2}) / \phi(T_1, p_{T,1}, Y_{S,1}) \quad (3.14)$$

Isto acontece por ser a função $\psi(\eta)$ independente do estado termodinâmico da espécie química.

Sendo a aproximação de escala mais restritiva que a aproximação do κ -correlacionado, pode-se dizer que coeficientes de absorção da aproximação de escala podem resultar em coeficientes do κ -correlacionado, mas o contrário não é verdadeiro.

Os valores de a_j são então calculados pela diferença de duas funções distribuição ALB em duas seções transversais adjacentes, isto é:

$$a_j = F(\tilde{C}_{j+1}, T_b = T_{loc}, T_g = T_{ref}, Y = Y_{ref}, p = p_{ref}) - F(\tilde{C}_j, T_b = T_{loc}, T_g = T_{ref}, Y = Y_{ref}, p = p_{ref}) \quad (3.15)$$

onde as seções transversais suplementares \tilde{C}_j são distribuídas ao longo do eixo das ordenadas, sendo que para o presente trabalho a distribuição é dada logarithmicamente entre 0,0001 m²/mol e 100 m²/mol. Os valores do coeficiente de absorção κ_j são então obtidos pela relação:

$$\kappa_j = N(T_{loc}, p_{loc}, Y_{loc}) C_j(T_{loc}, p_{loc}, Y_{loc}) \quad (3.16)$$

onde N é o número de Loschmidt (Equação 3.5) e os valores de C_j são obtidos através da relação:

$$C_j = \sqrt{\tilde{C}_{j+1} \tilde{C}_j} \quad (3.17)$$

3.2.4 O modelo CW

O modelo CW (número de onda cumulativo), desenvolvido por Solovjov e Webb, 2002, consiste em uma função não decrescente, a qual depende do número de onda e é definida como:

$$w(C, \eta) = \int_0^{\eta} H(C - C_{\eta}) d\eta \quad (3.18)$$

onde $H(C - C_{\eta})$ é a função de passo Heaviside, sendo assim:

$$w(C, \eta) = \begin{cases} \sum_{i=1}^L (\beta_i + \alpha_i) + (\eta - \eta^*) & \text{se } C_{\eta} < C \\ \sum_{i=1}^L (\beta_i + \alpha_i) & \text{se } C_{\eta} \geq C \end{cases} \quad (3.19)$$

onde os intervalos $[\alpha_i, \beta_i]$ são obtidos pela intersecção do espectro C_{η} com a linha $C_{\eta} = C$ e η^* é o maior número de onda da intersecção para o caso em que, para um dado número de onda η , o espectro de absorção dos gases C_{η} é menor que o valor de C , conforme pode ser visto na Figura 3.6.

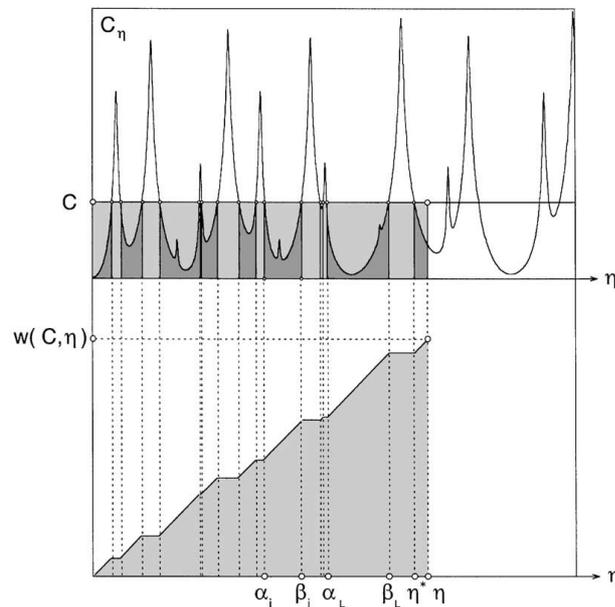


Figura 3.6 - Forma esquemática do número de onda cumulativo [Solovjov e Webb, 2002].

Nota-se que a função w é uma reta inclinada enquanto o valor de C é maior que o espectro de absorção e ainda que a função é constante enquanto C é menor que o espectro. Fazendo a derivada da função w em relação ao número de onda, tem-se:

$$\frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} = \begin{cases} 1 & \text{se } C_\eta < C \\ 0 & \text{se } C_\eta > C \end{cases} \quad (3.20)$$

Dessa forma, utilizando a Equação 3.20, pode-se substituir a integração com respeito à variável independente η sobre a região espectral definida pelo espectro de absorção molecular, pela integração com respeito ao número de onda cumulativo:

$$\int_{\eta: C_\eta < C} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} \frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} dw(C, \eta) \quad (3.21)$$

No método CW, o espectro completo C_η é subdividido em m gases cinza definidos pelas seções transversais de absorção suplementares $\tilde{C}_j, j = 1, 2, \dots, m+1$. A união entre todos os intervalos espectrais para os quais C_η fica entre os valores \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j-1} é expressa por H_j onde:

$$H_j = \left\{ \eta : \tilde{C}_{j-1} \leq C_\eta \leq \tilde{C}_j \right\} \quad j = 1, 2, \dots, m+1 \quad (3.22)$$

O modelo também considera n intervalos Δ_i no número onda, tal que:

$$\Delta_i = [\eta_{i-1}, \eta_i] \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.23)$$

A interseção dos intervalos Δ_i e H_j define o número de onda do gás cinza fracional D_{ij} , dado por:

$$D_{ij} = \Delta_i \cap H_j \quad (3.24)$$

Enquanto Δ_i é um intervalo fixo do espectro, H_j e D_{ij} dependem do estado termodinâmico e assim variam com a posição S quando o meio não é uniforme. Para resolver problemas não

isotérmicos e não homogêneos, o modelo CW propõem uma correlação espectral local, que assume que as dependências da função w em relação à posição (ou ao estado termodinâmico) e ao espectro podem ser separadas de acordo com a relação abaixo:

$$w(\tilde{C}_j, S, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, S, \eta) = u_{ij}(S)v_{ij}(\eta) \quad \text{para } \eta \in \Delta_i \quad (3.25)$$

onde u_{ij} e v_{ij} são funções que descrevem, respectivamente, o estado termodinâmico e o comportamento espectral da espécie química. Essa proposição é muito menos restritiva que a aproximação de escala adotada no modelo SLW e tende a fornecer melhores resultados quando o intervalo Δ_i é pequeno e os valores \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j-1} são próximos.

Impondo-se $u_{ij}(S^*) = 1$, onde S^* é escolhido como um estado de referência no qual a temperatura e composição do meio são conhecidas tem-se:

$$w(\tilde{C}_j, S^*, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, S^*, \eta) = v_{ij}(\eta) \quad (3.26)$$

Assim, a função local $u_{ij}(S)$ pode ser calculada combinando-se as Equações 3.25 e 3.26.

$$u_{ij}(S) = \frac{w(\tilde{C}_j, S, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, S, \eta)}{w(\tilde{C}_j, S^*, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, S^*, \eta)} \quad (3.27)$$

A integração da intensidade direcional espectral no intervalo D_{ij} , empregando-se as propriedades da função número de onda acumulado, conduz a:

$$\int_{D_{ij}(S)} I_\eta d\eta = u_{ij}(S)J_{ij}(S) \quad (3.28)$$

$$\int_{D_{ij}(S)} I_{\eta,b} d\eta = u_{ij}(S)J_{ij,b}(S) \quad (3.29)$$

Aqui, $u_{ij}(S)$ pode ser entendido como um fator de correção local para as intensidades do gás cinza fracional e $J_{ij,b}$ é a intensidade de radiação fracional do corpo negro dada por:

$$J_{ij,b}(s) = \int_{\Delta_i} I_{\eta,b}(s) d\left[w(\tilde{C}_j, S^*, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, S^*, \eta)\right] \quad (3.30)$$

De acordo com Solovjov e Webb, 2002, a integração da equação da transferência radiativa no intervalo Δ_i conduz a:

$$\frac{\partial J_{ij}(S)}{\partial S} = -\kappa_j J_{ij}(S) + \kappa_j J_{ij,b}(S) \quad (3.31)$$

O coeficiente de absorção do gás cinza j é calculado na forma:

$$\kappa_j = N \sqrt{\tilde{C}_{j-1} \tilde{C}_j} \quad (3.32)$$

3.3 Propriedades Radiantes da Fuligem

Quando uma onda eletromagnética interage com um meio contendo pequenas partículas, a intensidade da radiação pode ser alterada pela absorção, emissão ou pelo espalhamento. Um exemplo muito comum desta interação é dado através da luz do Sol, que ao incidir sobre uma nuvem de partículas é absorvida e é espalhada. Se as partículas estiverem a uma temperatura elevada, como, por exemplo, em processos de combustão, haverá também um aumento da intensidade radiante naquele ponto devido à emissão.

Quanto e para qual direção a intensidade radiante é espalhada para a vizinhança é definido pela forma da partícula, o material, seu tamanho e também a quantidade de partículas. Nas análises radiantes, a forma das partículas é usualmente assumida esférica (para partículas similarmente esféricas ou mesmo de forma irregular) ou cilíndrica (para materiais com perfil longo). As simplificações utilizadas levam geralmente a bons resultados, desde que a média sobre milhões de partículas minimizem a simplificação dessas irregularidades. Em problemas de combustão, devido à natureza das partículas, todas são simplificadas como sendo esféricas.

O espalhamento pode ser atribuído a três fenômenos: difração, reflexão e refração. Na difração a radiação não entra em contato com a partícula, mas sua direção é alterada; na reflexão, a radiação é refletida pela superfície da partícula; e, na refração, a radiação penetra na partícula e, após uma absorção parcial, reemerge em uma direção diferente. Se o espalhamento por uma partícula não é afetado pela presença das partículas ao seu redor, diz-se que esta possui um espalhamento independente, e, de outro modo, temos um espalhamento dependente. Além disso, pode-se dizer também que as propriedades de um conjunto de partículas esféricas podem ser estabelecidas por três parâmetros adimensionais: o índice complexo de refração m , o parâmetro de tamanho x , e a razão de espaço livre-comprimento de onda R , dados por:

$$m = n - i k \quad (3.33)$$

$$x = \frac{2 \pi r}{\lambda} = 2 \pi r \eta \quad (3.34)$$

$$R = \frac{v_{luz}}{\lambda} = v_{luz} \eta \quad (3.35)$$

onde n é a parte real do índice de refração, k é o índice de absorção, r é o raio da partícula e v_{luz} é a velocidade da luz.

No caso de um espalhamento independente (onde $R \gg 1$), apenas os dois primeiros parâmetros são necessários. Para classificarmos o espalhamento como independente, a razão de espaço livre-comprimento de onda é frequentemente alterada para uma função geométrica v_{luz}/r , que pode ser relacionado como a fração volumétrica das partículas, f_v . Um grande número de trabalhos já estabeleceu limites para que os efeitos da dependência do espalhamento sejam considerados. A Figura 3.8 mostra que o espalhamento pode ser ignorado para uma fração volumétrica menor que 0,006 ou para uma relação R maior que 0,5. Desta forma é possível concluir que para a combustão de gases (valores de f_v muito abaixo de 10^{-3}), os valores relativos às parcelas de absorção e emissão serão muito superiores aos valores referentes ao termo de espalhamento na equação da radiação térmica. O espalhamento apenas ocorrerá em casos muito restritos de elevada concentração de partículas, considerando que

estas sejam relativamente pequenas e a solução se processe em baixos valores para o número de onda.

Utilizando a Figura 3.8 é possível identificar que, para situações envolvendo fuligem, apenas concentrações muito elevadas da mesma contribuem com o espalhamento da radiação. O fato de estar em uma região dita “Independente do Espalhamento” não significa necessariamente que não haverá espalhamento. Entretanto, na região independente, a fração de energia espalhada é de ordem muito menor que a fração absorvida ou emitida pela partícula. Desta forma o espalhamento pode ser eliminado da equação radiante sem acarretar em diferenças consideráveis no resultado final.

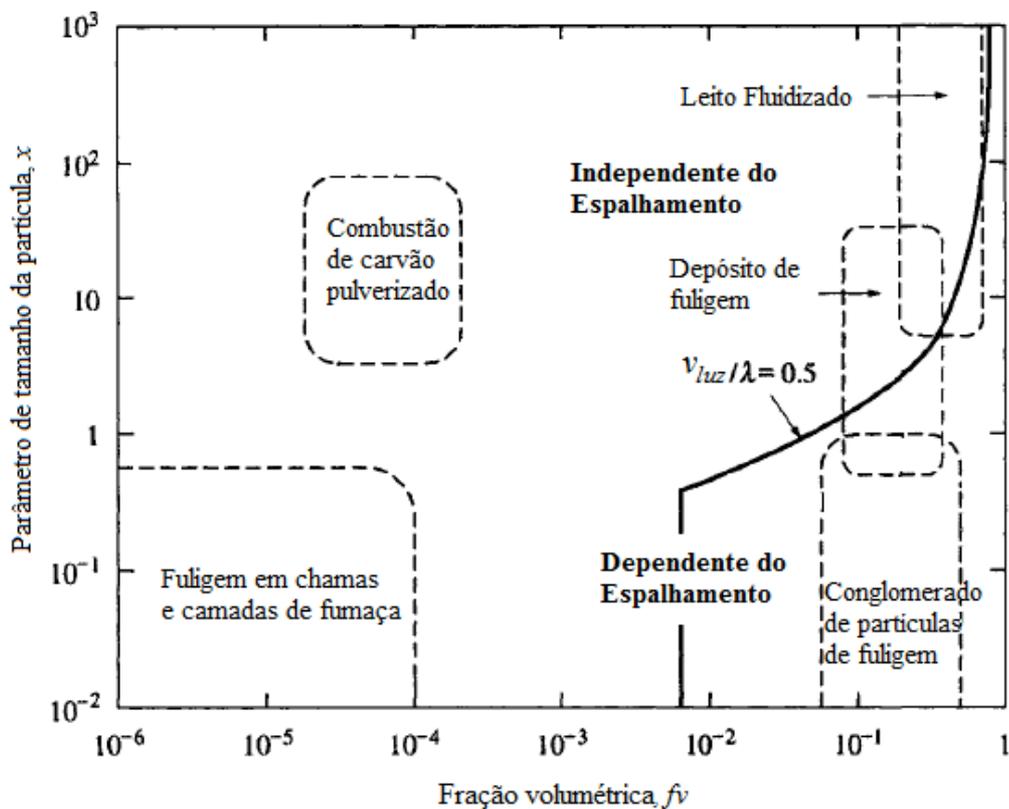


Figura 3.8 - Guia para identificar dependência do espalhamento da radiação [Modest, 1993].

3.3.1 Absorção e espalhamento para uma única esfera

O fenômeno de absorção e espalhamento envolvendo uma única esfera teve seus estudos iniciados por volta dos anos de 1860-1880 por Lord Rayleigh, que obteve soluções para esferas com diâmetros tão pequenos quanto o comprimento de onda radiante ($x \ll 1$).

Mais tarde seus trabalhos foram estudados por Lorentz, Danish e Gustav Mie. A teoria de espalhamento de Mie é geralmente utilizada quando o tamanho da esfera é muito grande para aplicarmos as teorias de Rayleigh, mas muito pequenas para empregar uma modelagem óptica da geometria. A quantidade espalhada e absorvida por uma partícula é expressa em termos de uma seção de espalhamento e de uma seção de absorção, onde o total absorvido e espalhado é expresso em termos de uma seção de extinção, que nada mais é do que a soma da absorção e do espalhamento.

3.3.2 Propriedades radiantes para uma nuvem de partículas

Em problemas envolvendo transferência de calor por radiação em meio particulado temos inevitavelmente uma grande concentração de partículas. Se o espalhamento é independente, então os efeitos das partículas são simplesmente aditivos. Por simplicidade, assumimos que esta nuvem de partículas consiste em esferas de igual tamanho. Em análises de maior acurácia é possível considerar que as partículas tenham tamanhos diferentes em uma mesma região. A fração de energia espalhada por todas as partículas por unidade de comprimento ao longo de uma direção de incidência é chamado de coeficiente de espalhamento e é igual ao somatório do espalhamento de todas as partículas em uma mesma seção.

3.3.3 Propriedades radiantes de partículas da combustão

Uma das aplicações mais importantes da radiação térmica na engenharia ocorre nos processos de combustão, tanto envolvendo combustíveis gasosos, líquidos ou sólidos. Durante o processo de combustão a radiação térmica irá transferir energia da reação de combustão para as paredes do combustor, frequentemente em taxas muito superiores ao processo de transferência de calor por convecção. Quase todas as chamas provenientes da combustão são visíveis ao olho humano e por isso são chamadas chamas luminosas. Essa emissão luminosa pode ser classificada em cores indicando a emissão proveniente (chamas amarelas: fuligem e particulados; chamas azuis: emissão de radicais CH; chamas verdes: emissão de moléculas de C₂; regiões avermelhadas: CO₂ e H₂O).

Os processos de combustão envolvem reações em cadeia, exponencialmente dependentes da temperatura, que geram uma grande variedade de espécies químicas, fuligem,

aglomeração de particulados diversos e subsequente queima destes particulado. Sabendo que a radiação térmica contribui fortemente como um mecanismo de transferência de calor, qualquer entendimento ou modelagem do processo deve incluir o fenômeno da radiação e suas propriedades de interação tanto em gases quanto em particulados. A partícula mais importante durante o processo de combustão tanto de gases, líquidos ou sólidos, por estar sempre presente em todos os casos, é a fuligem.

3.3.5 Propriedades radiantes da fuligem

Partículas de fuligem são produzidas em chamas ricas em combustível, ou em partes da chama ricas em combustível. Como mostrado pela microscopia eletrônica, as partículas de fuligem são pequenas e esféricas, possuindo um tamanho aproximado que varia de 0,005 μm a 0,08 μm de diâmetro, tendo um tamanho de 0,3 μm em casos extremos. Em chamas difusivas resultantes da combustão de hidrocarbonetos, a fuligem pode aparecer em aglomerados com uma porcentagem em volume de aproximadamente 10⁻⁶% a 10⁻⁴%, [Modest, 1993].

Sendo as partículas de fuligem muito pequenas, elas podem ser consideradas na mesma temperatura da chama, emitindo radiação térmica em um espectro contínuo na região do infravermelho. Experimentos mostram que a emissão da fuligem é significativamente maior do que a emissão dos gases provenientes da combustão. Além disso, os mecanismos de formação e oxidação da fuligem, assim como a composição química, não estão plenamente entendidos. Para determinar as propriedades radiativas de uma nuvem de fuligem, é necessário conhecer a quantidade, forma e distribuição da fuligem, tanto quanto suas propriedades ópticas, que dependem da composição química e da porosidade das partículas.

Uma forma muito utilizada na determinação da absorção da fuligem é através de relações empíricas, onde a partícula de fuligem terá uma variação linear de acordo com o comprimento de onda. Essas relações são encontradas em Solovjov e Webb, 2001, Mossi *et al.*, 2011, Modest, 1993, e em Siegel e Howell, 2002, na seguinte forma:

$$\kappa_{\eta} = c f_v \eta \quad (3.36)$$

onde f_v é a fração volumétrica da nuvem de partículas e c é uma constante que depende do combustível. Siegel e Howell, 2002, propõem valores para diferentes combustíveis: 6,3 para óleos combustíveis, 4,9 para propano, 4,0 para acetileno e 3,7-7,5 para a combustão de carvão. Yagi e Iino, 1961, sugerem um valor de 4,1 para o metano ($n = 2$; $k = 0,7$).

Variações na Equação 3.36 podem ocorrer, onde o número de onda pode sofrer uma correção de acordo com o caso estudado. Desta forma, a relação torna-se:

$$\kappa_\eta = c f_v \eta^\alpha \quad (3.37)$$

onde α é considerado igual a $0,83 \pm 0,08$ para a fuligem resultante da combustão de acetileno, propileno, etileno e propano.

Se as partículas de fuligem são tão pequenas que é possível aplicar as teorias de Rayleigh, então, uma solução mais refinada para a absorção da fuligem é possível. O coeficiente de absorção para a fuligem pode ser obtido da relação:

$$\kappa_\eta = \frac{36 \pi n k}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4 n^2 k^2} f_v \eta \quad (3.38)$$

onde a equação é dependente da fração volumétrica, número de onda e do índice complexo de refração. As soluções dos índices k e n são obtidas de acordo com Chang e Charalampopoulos, 1990, para uma chama de propano, sendo:

$$n = 1.8110 + 0.1263 \ln(\lambda) + 0.02700 \ln^2(\lambda) + 0.0417 \ln^3(\lambda) \quad (3.39)$$

$$k = 0.5821 + 0.1213 \ln(\lambda) + 0.02309 \ln^2(\lambda) - 0.0100 \ln^3(\lambda) \quad (3.40)$$

onde λ é dado em μm e as correlações são válidas no intervalo $0,4 - 30 \mu\text{m}$, o que equivale a $333 - 25000 \text{ cm}^{-1}$.

Ainda com base na Equação 3.38, com a dependência do comprimento de onda, utilizando coeficientes de Planck e Rosseland, a equação pode ser recalculada para:

$$\kappa = \frac{36 \pi n k}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4 n^2 k^2} \frac{3,72 f_v}{T C_2} \quad (3.41)$$

onde $C_2 = 1,4388 \text{ cm} \cdot \text{K}$, que é a segunda constante da função de Planck. É importante ter em mente que as equações apresentadas podem ser aplicadas apenas em partículas de fuligem muito pequenas (aproximadamente 5 nm).

Vários trabalhos determinam a absorção da fuligem em função da propriedade de índice de refração (Hua et al., 2005, Bahador e Sundén, 2008, Modest, 1993). Entretanto, os índices a serem utilizados variam para cada tipo de combustível utilizado, e nem sempre é uma tarefa fácil encontrar a relação adequada para o problema a ser resolvido.

Utilizando as Equações 3.36 e 3.38 e as relações propostas por Chang e Charalampopoulos, 1990, para o propano, que são os dados disponíveis para comparação, é possível estimar valores para a absorção em um meio composto por uma fração volumétrica, f_v , de 1×10^{-6} , ao longo do número de onda. Vale lembrar que a variação da absorção da fuligem não é dependente da temperatura, apenas da concentração do meio e do número de onda.

Observando a Figura 3.9, é possível comparar os resultados, onde a relação da Equação 3.36, com as constantes propostas por Siegel e Howell, 2002, apresenta valores mais elevados para a absorção ao longo de todo o espectro. Apesar disso, continuam sendo valores muito próximos dos apresentados por Chang e Charalampopoulos, 1990, que é considerado o resultado mais próximo do real. Com os resultados obtidos para o propano, é possível supor que as demais relações de constantes propostas por Siegel e Howell, 2002, também seguirão o mesmo padrão.

Por questão de conveniência, é mais adequado utilizar a Equação 3.36 para a determinação da absorção da fuligem, principalmente por existirem relações para um maior número de combustíveis, e, além disso, não existe qualquer banco de dados específico para tratar do problema da modelagem da fuligem como no caso dos gases (HITRAN, HITEMP).

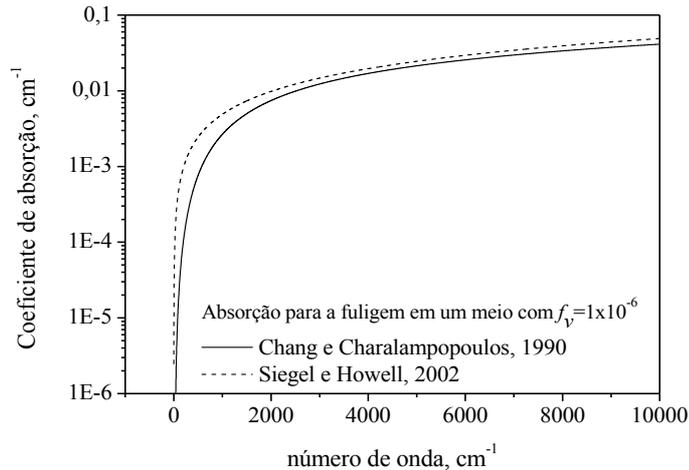


Figura 3.9 – Coeficiente de absorção para a fuligem com concentração 1×10^{-6} . Relações utilizando a Equação 5.4, Siegel e Howell, 2002, e a Equação 5.6, Chang e Charalampopoulos, 1990.

3.4 Misturas de Espécies Químicas

Na grande maioria dos casos as espécies químicas não aparecem sozinhas, e precisam ser considerados como uma mistura para uma modelagem completa da radiação. Métodos para considerar essas misturas ainda estão em constante desenvolvimento, visto que modelos espectrais são inicialmente propostos para apenas uma única espécie química, necessitando um método de acoplamento para a solução da mistura. O método de acoplamento deve tentar computar todos os aspectos da mistura, visto que perdas nas informações sempre ocorrem cada vez que simplificações são realizadas.

O principal problema encontrado na mistura do CO_2 e H_2O é o chamado *overlapping*, onde, para determinados números de onda, uma espécie química é opaca à outra. De acordo com Hottel e Sarofin, 1967, em misturas de CO_2 e H_2O , a radiação de ambos é um pouco menor do que a soma dos efeitos individuais, porque cada espécie química é um tanto opaca à outra nas regiões 2.7μ e 15μ (estas regiões encontram-se nos números de onda referentes a 600 e 3600 cm^{-1}). Estudos relacionados com esse fenômeno foram realizados por Lin e Greif, 1973, e Saldo e Giedt, 1977, e em termos gerais não existem grandes diferenças nos resultados finais para o cálculo da radiação térmica à pressão atmosférica.

Desconsiderando os efeitos do *overlapping*, para o cálculo LBL é proposta uma solução baseada na soma das absorções parciais para cada número de onda ao longo do espectro. Ao final, a absorção total será dada de acordo com a equação:

$$\kappa_{\eta} = Y_{CO_2} \kappa_{\eta,CO_2} + Y_{H_2O} \kappa_{\eta,H_2O} + \dots + Y_{xy} \kappa_{\eta,xy} \quad (3.42)$$

onde Y representa a fração molar da espécie química na mistura.

Para o modelo de gás cinza, é utilizado o mesmo modelo de formulação proposto para o cálculo da mistura no LBL, ou seja, soma-se a absorção de cada espécie química para a obtenção do valor total, e a partir desse somatório, resolve-se a equação da transferência radiante para o gás cinza, conforme a equação:

$$\kappa = Y_{CO_2} \kappa_{CO_2} + Y_{H_2O} \kappa_{H_2O} + \dots + Y_{xy} \kappa_{xy} \quad (3.43)$$

No caso de haver a impossibilidade de acesso ao banco de dados espectral, pode-se utilizar as relações propostas por Cassol et al, 2012, que apresentam correlações para o gás cinza, apresentadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Coeficientes de absorção para o modelo de gás cinza.
Adaptado de Cassol et al., 2012.

Espécie	Coeficiente de absorção, em $\text{cm}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}$		
CO ₂ e H ₂ O	$\kappa_p = c_0 + c_1 T + c_2 T^2 + c_3 T^3 + c_4 T^4 + c_5 T^5$		
	c_i	CO ₂	H ₂ O
	c_0	$-7,36885 \times 10^{-1}$	$7,73541 \times 10^{-1}$
	c_1	$4,77678 \times 10^{-3}$	$-2,05946 \times 10^{-3}$
	c_2	$-7,57382 \times 10^{-6}$	$2,36822 \times 10^{-6}$
	c_3	$5,29649 \times 10^{-9}$	$-1,39663 \times 10^{-9}$
	c_4	$-1,75069 \times 10^{-12}$	$4,13422 \times 10^{-13}$
	c_5	$2,23907 \times 10^{-16}$	$-4,86695 \times 10^{-17}$

Válido para temperaturas entre 400 e 2100 K.

O modelo WSGG, por sua vez, é dedicado a razões fixas das espécies químicas, por isso não existem metodologias específicas para misturas na sua modelagem. Para casos onde as correlações são geradas para uma única espécie química, a proposta frequentemente encontrada é baseada em uma relação direta, dada pelas seguintes equações:

$$\kappa_j = \kappa_{m,n} = \kappa_{1,m} + \kappa_{2,n} \quad (3.44)$$

$$a_j = a_{m,n} = a_{1,m} a_{2,n} \quad (3.45)$$

onde os subíndices 1 e 2 referem-se à uma espécie química qualquer, podendo ser CO₂ ou H₂O, e m e n referem-se ao número de gases cinza para o modelo. No caso, forma-se uma nova matriz $j=m \times n$, que pode ser estendida de acordo com o número de espécies químicas presentes na mistura.

No modelo WSGG, é necessário adicionar à correlação mais um gás cinza com absorção nula ($\kappa_{g,N+1} = 0$), que corresponde às janelas transparentes. Com a adição do gás cinza com absorção nula, o novo peso referente ao gás cinza adicional é dado por:

$$a_{g,N+1} = 1 - \sum_{j=1}^N a_{g,j} \quad (3.46)$$

sendo N o número de gases cinza na correlação WSGG.

Por conta das poucas alternativas para trabalhar com misturas no modelo WSGG, no presente trabalho uma nova metodologia para solucionar este tipo de problema é proposta, sendo apresentada na Seção 3.6.

No modelo SLW, a relação de mistura é dada através de várias formas, onde todas são relações matemáticas e não possuem uma correspondência física aparente. O método mais comumente encontrado para a solução de várias espécies químicas através do modelo SLW é o da multiplicação (*multiplication approach*), onde a função distribuição para uma mistura com m espécies químicas pode ser aproximada pela relação:

$$F(\tilde{C}_j) = F_1\left(\frac{\tilde{C}_j}{Y_1}\right) F_2\left(\frac{\tilde{C}_j}{Y_2}\right) \dots F_m\left(\frac{\tilde{C}_j}{Y_m}\right) \quad (3.47)$$

onde o subíndice m corresponde ao número de espécies químicas para a mistura e j corresponde à seção de absorção. Então, após determinada a função distribuição para a mistura, a solução é resolvida pela Equação 3.12 normalmente.

O valor de κ é resolvido pela equação:

$$\kappa_j = N C_j \quad (3.48)$$

onde, para a implementação através do κ -correlacionado o valor de C_j é único para a mistura, sendo que, para a solução através da aproximação de escala, C_j deve ser dado pelo valor da seção de absorção de acordo com cada espécie química, resultando em uma expressão na forma:

$$\kappa_j = N_1 C_1 + N_2 C_2 + \dots + N_m C_m \quad (3.49)$$

Outras formas de executar a mistura de espécies químicas no modelo SLW são dadas através do método de integração direta (*direct spectral integration*) e do método da superposição (*superposition approach*). Maiores detalhes a respeito da implementação dos métodos utilizados em misturas para o modelo SLW podem ser verificados em Solovjov e Webb, 2000.

Para o modelo CW existem as mesmas propostas para o tratamento de misturas que foram propostas para o modelo SLW (multiplicação, direto e sobreposição). Entretanto, as analogias são específicas para o modelo CW, e, portanto, algumas diferenças nas equações são encontradas. No presente trabalho é utilizado o método da superposição, no qual a aproximação para uma mistura contendo m espécies químicas torna-se:

$$w(C, \eta) = w_1 \left(\frac{C}{Y_1} \right) + \dots + w_m \left(\frac{C}{Y_m} \right) - (m-1) \eta \quad (3.50)$$

onde w_m é função do número de onda cumulativa para a espécie química m , e Y_m é sua fração molar. Maiores detalhes a respeito da implementação dos métodos utilizados em misturas para o modelo CW podem ser verificados em Solovjov e Webb, 2005.

Em termos gerais, todas as relações para a mistura são propostas para que, no final, o equacionamento da radiação seja executado como se houvesse uma única espécie química no meio. Assim, o problema resume-se na forma com a qual será considerado o somatório dessas espécies químicas.

3.5 Misturas de Gases e Partículas

Ao contrário dos gases, o particulado não possui forte dependência com o estado termodinâmico. Sendo assim, a mistura entre as partículas sólidas e o gás torna-se uma tarefa menos dispendiosa, pois a absorção da partícula é de fácil determinação. Na grande maioria dos modelos, a partícula é tratada como um gás, sendo incluída no meio participante de acordo com os equacionamentos vistos para cada modelo. De forma geral, a fuligem é tratada no cálculo LBL pela simples soma de cada absorção e em cada número de onda. Para uma mistura entre gás e fuligem, a adição é dada na forma:

$$K_{\eta, total} = K_{\eta, g} + K_{\eta, f} \quad (3.51)$$

No modelo GG a adição é direta, correspondendo à Equação 3.51, sem o subíndice referente ao número de onda. A equação então torna-se:

$$K_{total} = K_g + K_f \quad (3.52)$$

A mistura no modelo WSGG é obtida de acordo com as Equações 3.44 e 3.45, respeitando a adição do gás cinza com absorção nula, conforme a Equação 3.46.

No modelo SLW, a fuligem deve ser tratada como um gás adicional, de forma que as relações para a construção da função de distribuição tornam-se:

$$C_{\eta}^{fuligem} = \frac{K_{\eta}}{N} \quad (3.53)$$

$$F_{C_{\eta}^{fuligem}}(C) = \frac{\int_{\{\eta: C_{\eta} < C_{\eta}^{fuligem}\}} E_{b, \eta}(T) d\eta}{\sigma T^4} \quad (3.54)$$

onde N é a densidade molar, ou número de Loschmidt, o que torna os valores para a absorção da fuligem na mesma ordem de grandeza do gás, permitindo uma integração nas mesmas

faixas de seção de absorção. Após determinada a função distribuição F da fuligem, a mistura é dada de acordo com a Equação 3.48.

A relação proposta para o modelo CW é dada de acordo com uma aproximação considerando uma mistura de m gases e uma partícula não cinza:

$$w(C, \eta) = w_1 \left(\frac{C}{Y_1} - C_{i,\eta}^{fuligem} \right) + w_m \left(\frac{C}{Y_m} - C_{i,\eta}^{fuligem} \right) - (m-1)\eta \quad (3.55)$$

onde m é o número de espécies químicas na mistura e o valor de C_η da fuligem é obtido da mesma forma que para o modelo SLW, de acordo com a Equação 3.53. Um fato a ser observado é o de que a inclusão de uma partícula na mistura de gases é dada como uma aproximação, e não uma modelagem do particulado, fato que torna este tipo de mistura no modelo CW pouco realista do ponto de vista físico, não sendo possível, por exemplo, resolver um problema com meio participante composto apenas por fuligem.

3.6 Uma Nova Proposição para a Solução de Misturas Através do Modelo WSGG

Com o objetivo de aprimorar o modelo WSGG, é incorporada no presente trabalho uma nova metodologia que possibilita a implementação de misturas das espécies químicas. Originalmente, as correlações do modelo WSGG foram propostas a partir de razões fixas para a mistura das espécies químicas para a solução de problemas envolvendo produtos da combustão de metano ou de óleo combustível. Para os trabalhos que se seguiram foi adotada a mesma metodologia, ou seja, considerando sempre razões fixas das espécies químicas a partir de uma dada mistura, portanto a proposição de uma metodologia que possibilite diferentes razões de mistura ao longo da solução do problema representa uma grande vantagem.

A nova metodologia prevê apenas misturas de gases, sendo que para a implementação de misturas envolvendo meio particulado, no caso da presença de fuligem, deve-se utilizar um misto entre o método proposto e o método direto. A principal vantagem da nova proposta está no fato de que independente do número de espécies químicas no meio, o número de equações a serem resolvidas para a determinação da intensidade radiante permanece o mesmo, o que é vantajoso computacionalmente, sendo que no caso do método direto, a solução apresenta um número de equações determinado por n^m (número de gases cinza, n , elevado ao número de espécies químicas, m).

3.6.1 Determinação dos Coeficientes da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza

Para o modelo WSGG, da mesma forma que para os outros modelos e para a solução LBL, as correlações são obtidas a partir dos espectros das linhas de absorção nas temperaturas de 400 K a 2500 K, com intervalos de temperatura de 100 K, totalizando 22 temperaturas. Para o CO₂, são gerados espectros para $p_{\text{CO}_2} = 0,1$ atm e para o H₂O, $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ atm. Para a geração das correlações, calcula-se primeiramente a emitância de cada espécie química, para cada temperatura e valores de pL (pressão parcial pelo caminho percorrido). Dessa forma, obtêm-se 24 valores de emitância para os valores de pL , que variam de 0,0001 atm·m a 10 atm·m, com 22 valores intermediários de temperatura, totalizando assim, para cada uma das espécies químicas, 528 valores de emitância.

Para a obtenção dos coeficientes de absorção e dos fatores de ponderação dependentes da temperatura, Smith et al., 1982, empregaram a técnica de Fletcher-Powell para ajustá-los, a partir do modelo espectral *exponential wide-band*. Nesse trabalho é usado o método de regressão múltipla não linear de Levenberg-Marquardt [Levenberg, 1944 e Marquardt, 1963] para obtenção dos fatores de ponderação e coeficiente de absorção a partir de dados já calculados de emitância através da Equação 2.9. O método de Levenberg-Marquardt é usado primeiramente para ajustar os coeficientes de absorção. Para usá-lo, é necessário manipular a equação do método WSGG, que é reescrita abaixo:

$$\varepsilon_{m,n} = \sum_{i=1}^4 a_i(T_n) \left[1 - \exp(-\kappa_{p,i} pL)_m \right] \quad (3.56)$$

com $1 \leq n \leq 22$ e $1 \leq m \leq 24$.

Smith et al., 1982, consideraram três gases cinza para representar o espectro ao longo do número de onda. O motivo pelo qual poucos gases cinza foram utilizados se explica devido ao fato da simplicidade de cálculo, uma vez que mais gases cinza deixariam o cálculo mais trabalhoso. Nesse trabalho consideram-se quatro gases cinza, uma vez que, com a disponibilidade de recursos computacionais, esse fator não se torna preocupante.

Aplicando-se um somatório nos dois lados da equação 3.56 em relação aos valores de temperatura em que foram obtidos os valores de emitância total, e manipulando os somatórios no lado direito da equação, tem-se:

$$\sum_{n=1}^{22} \varepsilon_{m,n} = \sum_{i=1}^4 \sum_{n=1}^{22} a_i(T_n) \left\{ 1 - \exp(-\kappa_{p,i} pL)_m \right\} \quad (3.57)$$

Assume-se nesse caso que o coeficiente de absorção por unidade de pressão, $\kappa_{p,i}$, é independente da temperatura, que é uma das premissas fundamentais do modelo WSGG, ficando a dependência da temperatura a cargo do coeficiente de ponderação a_i . Desta forma, no lado esquerdo da equação, para um valor constante de pL , somam-se todos os valores de emitância total em todas as temperaturas. No lado direito da equação, as incógnitas corresponderão aos valores de $\kappa_{p,i}$ e os valores do somatório, em todas as temperaturas, de $a_i(T_n)$. Reescrevendo a Equação 3.57 para exemplificar, tem-se:

$$\sum_{T=400K}^{2500K} \varepsilon_{m,n} = \sum_{i=1}^4 \sum_{T=400K}^{2500K} a_i(T_n) \left\{ 1 - \exp(-\kappa_{p,i} pL)_m \right\} \quad (3.58)$$

$$\sum_{T=400K}^{2500K} \varepsilon_{m,n} = \left[\sum_{T=400K}^{2500K} a_1(T_n) \right] \left[1 - \exp(-\kappa_{p,1} pL)_m \right] + \dots + \left[\sum_{T=400K}^{2500K} a_4(T_n) \right] \left[1 - \exp(-\kappa_{p,4} pL)_m \right] \quad (3.59)$$

Aplica-se esse somatório para diversos valores constantes de pL , obtendo-se assim diversas equações para serem ajustadas pelo método de Levenberg-Marquardt. Nesse trabalho foram utilizados 24 valores constantes de pL , obtendo-se assim, 24 equações.

Para facilitar a obtenção das correlações, foi utilizado um software comercial com a ferramenta de relação de fatores múltiplos através de regressão não linear. No software deve-se entrar com os valores da soma das emitâncias e os valores de pL em que as mesmas foram obtidas, além de informar ao programa a equação em que se queira ajustar os valores de κ_i , representado pelo lado direito da Equação 3.58 e reescrita abaixo na seguinte forma:

$$B_1(1 - \exp(-\kappa_1 pL)) + \dots + B_4(1 - \exp(-\kappa_4 pL)) \quad (3.60)$$

na qual B_1 a B_4 são os valores do somatório de $a_i(T)$, em todas as temperaturas, para os quatro gases cinza, e κ_i o valor do coeficiente de absorção desejado.

Após determinados os coeficientes de absorção, utilizam-se os valores de κ_i obtidos para a determinação dos valores de ponderação $a_i(T)$ do modelo WSGG. Para isso, devem ser informados ao software, para uma determinada temperatura, os valores de emitância total e seu respectivo valor de pL . Deve-se informar também a equação a ser ajustada (Equação 3.56). Reescrevendo o lado direito da equação tem-se:

$$a_1(1 - \exp(-\kappa_1 pL)) + \dots + a_4(1 - \exp(-\kappa_4 pL)) \quad (3.61)$$

sendo que os valores de κ_i já foram determinados no passo anterior. Dessa forma, obtêm-se os valores de $a_i(T)$, para cada temperatura e para cada gás cinza i .

Com os valores de $a_i(T)$ obtidos, faz-se um ajuste polinomial de ordem 4 em relação a temperatura, para cada gás cinza i . Dessa forma, são determinados cinco coeficientes polinomiais para cada gás cinza.

A partir da metodologia apresentada, obtiveram-se os valores dos coeficientes de absorção por unidade de pressão, $\kappa_{p,i}$, e os coeficientes polinomiais, $b_{i,j}$. A Tabela 3.3 mostra os valores dos coeficientes para o CO₂ e a Tabela 3.4 mostra os coeficientes para o H₂O.

Tabela 3.3 - Valores dos coeficientes do CO₂ para o modelo WSGG.

i	$\kappa_{p,i}(\text{atm}\cdot\text{m})^{-1}$	$b_{i,1}$	$b_{i,2}(\text{K}^{-1})$	$b_{i,3}(\text{K}^{-2})$	$b_{i,4}(\text{K}^{-3})$	$b_{i,5}(\text{K}^{-4})$
1	0,138	0,09990	$64,41 \times 10^{-5}$	$-86,94 \times 10^{-8}$	$41,27 \times 10^{-11}$	$-67,74 \times 10^{-15}$
2	1,895	0,00942	$10,36 \times 10^{-5}$	$-2,277 \times 10^{-8}$	$-2,134 \times 10^{-11}$	$6,497 \times 10^{-15}$
3	13,301	0,14511	$-30,73 \times 10^{-5}$	$37,65 \times 10^{-8}$	$-18,41 \times 10^{-11}$	$30,16 \times 10^{-15}$
4	340,811	-0,02915	$25,23 \times 10^{-5}$	$-26,10 \times 10^{-8}$	$9,965 \times 10^{-11}$	$-13,26 \times 10^{-15}$

Valores válidos para temperaturas entre 400 e 2500 K.

Para uma comparação dos valores de emitância que são obtidos para o WSGG com os valores *benchmark* de emitância total, faz-se a plotagem desses resultados. A Figura 3.10 mostra a comparação destes valores para o CO₂ e a Figura 3.11 mostra essa mesma comparação para o H₂O. No caso dos resultados referentes ao CO₂, os valores encontrados apresentam uma boa aproximação, em comparação com as emitâncias *benchmark*, sendo a maior diferença na temperatura de 500 K em $pL=0,01 \text{ atm}\cdot\text{m}$, onde a emitância da correlação é de 0,051 contra 0,047 do banco de dados. Como pode ser observado na Figura 3.10, para o H₂O, para 1,0 atm·m e 10 atm·m, verifica-se uma ótima concordância entre os valores de

emitância total, entretanto, para valores de pL iguais a 0,01 atm·m verifica-se uma divergência nos valores ajustados com os valores *benchmark*.

Tabela 3.4 - Valores dos coeficientes do H₂O para o modelo WSGG.

i	$\kappa_{p,i}(\text{atm}\cdot\text{m})^{-1}$	$b_{i,1}$	$b_{i,2} (\text{K}^{-1})$	$b_{i,3} (\text{K}^{-2})$	$b_{i,4} (\text{K}^{-3})$	$b_{i,5} (\text{K}^{-4})$
1	0,171	0,06617	$55,48\times 10^{-5}$	$-48,41\times 10^{-8}$	$22,27\times 10^{-11}$	$-40,17\times 10^{-15}$
2	1,551	0,11045	$0,576\times 10^{-5}$	$24,00\times 10^{-8}$	$-17,01\times 10^{-11}$	$30,96\times 10^{-15}$
3	5,562	-0,04915	$70,63\times 10^{-5}$	$-70,12\times 10^{-8}$	$26,07\times 10^{-11}$	$-34,94\times 10^{-15}$
4	49,159	0,23675	$-18,91\times 10^{-5}$	$-0,907\times 10^{-8}$	$4,082\times 10^{-11}$	$-8,778\times 10^{-15}$

Valores válidos para temperaturas entre 400 e 2500 K.

Para a solução das correlações utilizando a fuligem, ocorreu o mesmo processo de geração dos coeficientes dos gases, sendo a única diferença a utilização de dois gases cinza na solução ao invés de quatro. A Tabela 3.5 mostra os coeficientes encontrados e a Figura 3.12 a comparação dos resultados obtidos com os valores *benchmark* da emitância total.

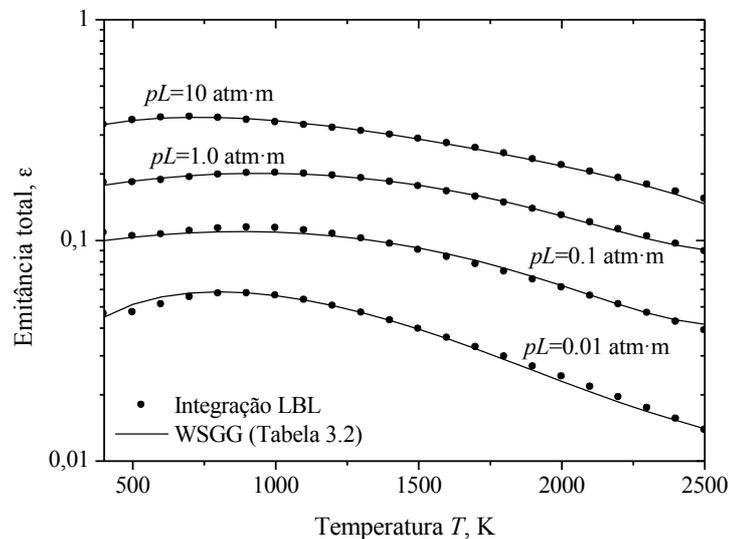


Figura 3.10 – Comparação dos valores de emitância para o CO_2 .

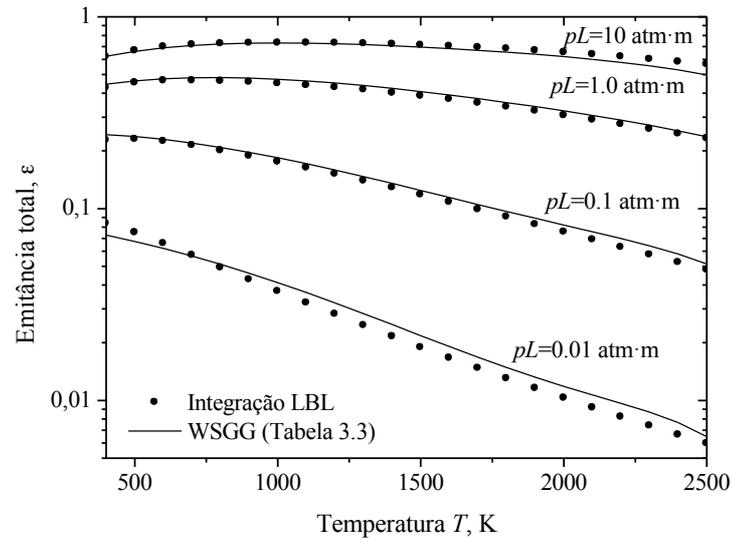


Figura 3.11 – Comparação dos valores de emitância para o H₂O.

Tabela 3.5 - Valores dos coeficientes para o modelo WSGG. Fuligem. $f_v = 1,0$.

i	$\kappa_{i,fv} (\text{m})^{-1}$	$b_{i,1}$	$b_{i,2} (\text{K}^{-1})$	$b_{i,3} (\text{K}^{-2})$	$b_{i,4} (\text{K}^{-3})$	$b_{i,5} (\text{K}^{-4})$
1	22.313,49	0,95552	$-1,431 \times 10^{-3}$	$9,871 \times 10^{-7}$	$-3,390 \times 10^{-10}$	$4,555 \times 10^{-14}$
2	466.624,8	0,08010	$1,290 \times 10^{-3}$	$-7,874 \times 10^{-7}$	$2,322 \times 10^{-10}$	$-3,084 \times 10^{-14}$

Valores válidos para temperatura entre 400 e 2500 K.

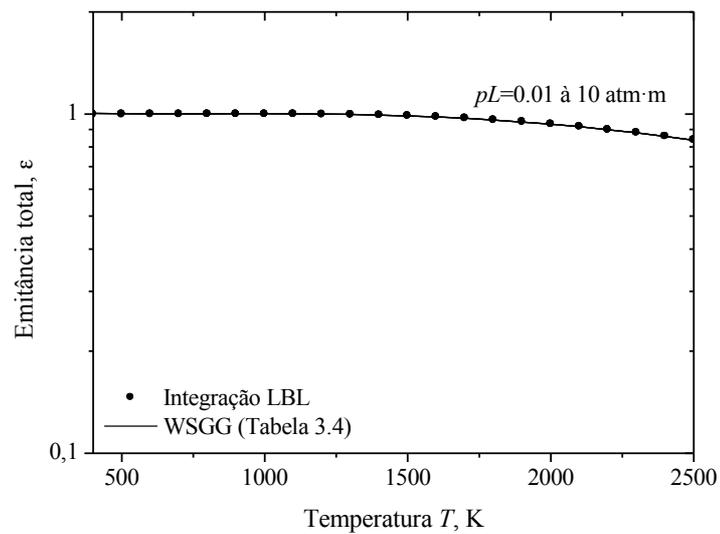


Figura 3.12 – Comparação dos valores de emitância para a fuligem.

Observando a Figura 3.12 é identificado apenas um valor de emitância ao longo das temperaturas. Isto ocorre devido à alta absorção da fuligem, que para as condições estabelecidas acabam sobrepondo-se umas às outras. Por ter sido escolhido um sistema independente da fração volumétrica e da constante c , que depende do tipo de combustível, para a geração dos coeficientes presentes na Tabela 3.5, as correlações apresentadas possibilitam que os valores gerados sejam utilizados para qualquer condição de concentração de fuligem e qualquer tipo de combustível. Para a utilização dos valores de absorção da Tabela 3.5 deve-se seguir a formulação:

$$\kappa_i = c f_v \kappa_{i,fv} \quad (3.62)$$

onde κ_i passa a ser o valor da absorção do gás cinza para a situação específica de fração volumétrica e de combustível, utilizada na rotina WSGG, e $\kappa_{i,fv}$ é a absorção indicada na Tabela 3.5.

3.6.2 Independência das Correlações da Fuligem em relação à Fração Volumétrica

Conforme observado na Equação 3.62, o valor da absorção da fuligem deve ser multiplicado pela fração volumétrica local e pela constante C do combustível para que sejam obtidos os valores para cada situação de combustão. Para a aplicação da metodologia proposta, as correlações foram obtidas com independência da fração volumétrica e do tipo de combustível utilizado, ou seja, as correlações da fuligem foram obtidas apenas em função do número de onda. Isso foi possível devido à independência dos coeficientes f_v e c em certas situações para o cálculo da emitância total na fuligem. As situações verificadas para condições de espessura óptica muito fina, dada pela condição $\kappa \ll 1,0$, e espessura óptica espessa, dada pela condição $\kappa \gg 1,0$. Da equação da emitância temos:

$$\varepsilon_\eta = 1 - \exp(-\kappa_\eta S) \quad (3.63)$$

Para que na solução da integração para a emitância total os termos referentes a f_v e c sejam isolados, é necessário primeiramente substituir o termo κ_η da solução exponencial. Sabendo que κ_η é obtido através do produto $c f_v \eta$, temos:

$$\varepsilon_\eta = 1 - \exp[-(c f_v \eta)S] \quad (3.64)$$

Aplicando a condição de que $\kappa \ll 1,0$, e solucionando a Equação 3.64, obtemos:

$$\varepsilon_\eta \cong c f_v \eta S \quad (3.65)$$

No cálculo da emitância total, é possível tratar c e f_v como constantes, extraindo-se os termos da integração espectral conforme abaixo:

$$\varepsilon = \pi \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b} \varepsilon_\eta d\eta}{\sigma T^4} \cong \pi \frac{c f_v \int_0^\infty I_{\eta,b} \eta d\eta}{\sigma T^4} \quad (3.66)$$

No caso de $\kappa \gg 1,0$, temos que independente dos valores dos demais coeficientes, a emitância será próxima a 1,0, o que corresponde à emissão do corpo negro, independentemente os valores de f_v e c , logo:

$$\varepsilon_\eta \cong 1,0 \quad (3.67)$$

$$\varepsilon = \pi \frac{\int_0^\infty I_{\eta,b} \varepsilon_\eta d\eta}{\sigma T^4} \cong 1,0 \quad (3.68)$$

3.6.3 Mistura de Gases no Modelo WSGG pelo Novo Método Proposto

A solução para a mistura de gases no WSGG envolve um sistema simples de equações. As deduções utilizadas para a proposição do método são descritas a seguir. Primeiramente, considera-se a integração da equação de transporte radiante (RTE):

$$\int_{\Delta\eta_i} \frac{dI_\eta}{dS} d\eta = - \int_{\Delta\eta_i} \kappa_\eta I_\eta d\eta + \int_{\Delta\eta_i} \kappa_\eta I_{\eta,b} d\eta \quad (3.69)$$

A solução da Equação 3.69 resulta na solução da RTE para o modelo WSGG (Equação 3.9), onde temos, para um dado gás cinza fracional i :

$$\frac{dI_i}{dS} = -\kappa_i I_i + \kappa_i a_i I_b \quad (3.70)$$

Considerando que a solução da RTE para uma mistura de gases parte do pressuposto de que a intensidade total será a soma das intensidades parciais do CO₂ e do H₂O, é possível indicar a solução dada como:

$$\left(\frac{dI_i}{dS} \right)_M = \left(\frac{dI_i}{dS} \right)_{H_2O} + \left(\frac{dI_i}{dS} \right)_{CO_2} \quad (3.71)$$

onde o subíndice M representa a mistura.

Para a intensidade tanto do H₂O quanto do CO₂ tem-se:

$$\int_{\Delta\eta_i} \left(\frac{dI_\eta}{dS} \right)_{H_2O} d\eta = - \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,H_2O} I_\eta d\eta + \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,H_2O} I_{\eta,b} d\eta \quad (3.72)$$

$$\int_{\Delta\eta_i} \left(\frac{dI_\eta}{dS} \right)_{CO_2} d\eta = - \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,CO_2} I_\eta d\eta + \int_{\Delta\eta_i} \kappa_{\eta,CO_2} I_{\eta,b} d\eta \quad (3.73)$$

O primeiro termo da direita refere-se à absorção e o segundo termo refere-se à emissão. Com a solução das Equações 3.72 e 3.73 é obtida a seguinte relação:

$$\left(\frac{dI_i}{dS} \right)_{H_2O} = -\kappa_{H_2O,i} \int_{\Delta\eta_i} I_\eta d\eta + \kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} I_b \quad (3.74)$$

$$\left(\frac{dI_i}{dS}\right)_{CO_2} = -\kappa_{CO_2,i} \int_{\Delta\eta_i} I_\eta d\eta + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i} I_b \quad (3.75)$$

Nas Equações 3.74 e 3.75, por ser a absorção uma constante em cada faixa de gás cinza estabelecida para o modelo WSGG, é possível isolar o termo da equação integral. A parcela referente à intensidade radiante absorvida pelo gás permanece dependente a cada número de onda. Propondo uma solução para a integral desta intensidade, é necessário estabelecer uma relação entre a intensidade total da mistura e a intensidade de cada fração de gás de forma individual. Sabendo que o peso a_i representa uma fração de emissão referente ao corpo negro, temos então para a intensidade de radiação absorvida:

$$\int_{\Delta\eta_i} I_\eta d\eta \cong a_i I_b \quad (3.76)$$

Assumindo que a intensidade para cada espécie química terá uma relação com a intensidade da mistura, obtêm-se:

$$\frac{\int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta}{\int_{\Delta\eta_i,H_2O} I_\eta d\eta} \cong \frac{a_{M,i}}{a_{H_2O,i}} \quad \therefore \quad \int_{\Delta\eta_i,H_2O} I_\eta d\eta \cong \int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta \frac{a_{H_2O,i}}{a_{M,i}} \quad (3.77)$$

$$\frac{\int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta}{\int_{\Delta\eta_i,CO_2} I_\eta d\eta} \cong \frac{a_{M,i}}{a_{CO_2,i}} \quad \therefore \quad \int_{\Delta\eta_i,CO_2} I_\eta d\eta \cong \int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta \frac{a_{CO_2,i}}{a_{M,i}} \quad (3.78)$$

Combinando a Equação 3.71 com as Equações 3.77 e 3.78 e rearranjando de acordo com a intensidade radiante da mistura, temos:

$$\left(\frac{dI_i}{dS}\right)_M = -\left(\kappa_{H_2O,i} \frac{a_{H_2O,i}}{a_{M,i}} + \kappa_{CO_2,i} \frac{a_{CO_2,i}}{a_{M,i}}\right) \int_{\Delta\eta_i,M} I_\eta d\eta + (\kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i}) I_b \quad (3.79)$$

Como o valor de $a_{M,i}$ é desconhecido, não é possível uma solução direta da Equação 3.79.

Pelo sistema de equações estabelecido, é possível dizer que a solução dos coeficientes da mistura deve ser equivalente aos valores das frações de cada espécie química, ou seja:

$$\kappa_{M,i} a_{M,i} \cong \kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i} \quad (3.80)$$

É conveniente indicar que a solução para o peso $a_{M,i}$ na solução da mistura é dada na forma de uma média ponderada entre todos os valores já conhecidos para as absorções, considerando os pesos de cada espécie química. Para uma solução inicial, é indicado que a absorção da mistura é dada pela soma da absorção de cada espécie química, para cada fração do gás cinza, onde temos que:

$$\kappa_{M,i} = \kappa_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} \quad (3.81)$$

Logo:

$$a_{M,i} = \frac{\kappa_{H_2O,i} a_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i} a_{CO_2,i}}{\kappa_{H_2O,i} + \kappa_{CO_2,i}} \quad (3.82)$$

Com o valor do peso para a mistura estabelecido pela Equação 3.82, é conveniente recalculer o valor da absorção, para que seja obtida uma correção deste valor. Temos então a correção do valor da absorção dada como:

$$\kappa_{M,i} = \frac{a_{M,i} \kappa_{H_2O,i}}{a_{H_2O,i}} + \frac{a_{M,i} \kappa_{CO_2,i}}{a_{CO_2,i}} \quad (3.83)$$

Pela utilização da Equação 3.83, quando houver uma única espécie química presente, a seguinte relação será satisfeita:

$$a_{H_2O,i} \kappa_{M,i} = a_{M,i} \kappa_{H_2O,i} \quad \therefore \quad a_{CO_2,i} \kappa_{M,i} = a_{M,i} \kappa_{CO_2,i} \quad (3.84)$$

Com a Equação 3.84, os pesos e absorções da mistura se tornam equivalentes aos pesos e absorções da espécie química de forma individual, não sendo necessário modificações nas formulações em situações com a presença de uma única espécie química.

Dessa maneira, os valores $a_{M,i}$ e $\kappa_{M,i}$, dados pelas Equações 3.82 e 3.83, são os valores determinados para a mistura de gases para solucionar a equação RTE de acordo com o modelo WSGG, na forma:

$$\left(\frac{dI_i}{dS} \right)_M = -\kappa_{M,i} I_i + \kappa_{M,i} a_{M,i} I_b \quad (3.85)$$

4 RESULTADOS

Com o objetivo de comparar diferentes modelos espectrais, é necessário em um primeiro momento analisar separadamente cada caso, a fim de validar as metodologias propostas. As análises serão baseadas em uma geometria unidimensional, 1D, consistindo de duas placas planas infinitas, conforme a Figura 4.1, com um meio participante preenchendo o espaço entre as duas placas. A consideração de geometria unidimensional pode parecer inicialmente uma simplificação grosseira, mas deve-se ressaltar que a intenção é avaliar os modelos espectrais, que são em princípio independentes da integração espacial. Assim, espera-se que as conclusões alcançadas possam se estender a geometrias mais complexas. Todas as soluções matemáticas serão baseadas no método das ordenadas discretas, utilizando uma decomposição em 30 direções, cujo equacionamento foi apresentado no Capítulo 2. Inicialmente, será feita uma análise da solução LBL, verificando a solução com um caso presente na literatura. Em seguida, os modelos GG (gás cinza), WSGG (soma-ponderada-dos-gases-cinza), SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais) e CW (numero de onda cumulativo) serão avaliados individualmente com situações de meio participante com concentração homogênea e temperatura uniforme, verificando as soluções apresentadas na sua forma mais simplificada. Posteriormente, diferentes condições de temperatura e concentrações do meio participante serão implementadas, na tentativa de aproximar a solução de casos presentes em problemas de combustão.

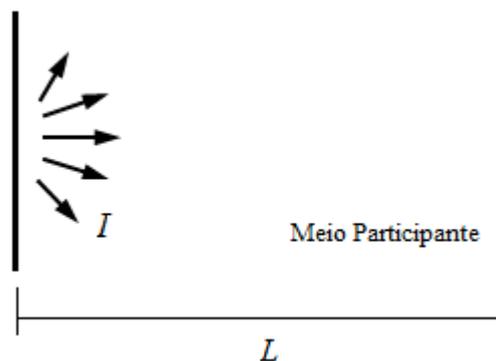


Figura 4.1 – Configuração da geometria para duas placas planas infinitas.

4.1 Resultados Para a Solução LBL

Os resultados *benchmark* serão obtidos através da integração LBL, visto que este é o resultado exato em relação ao espectro, possuindo apenas erros numéricos de ordem menor, por manter todo o detalhamento do espectro de radiação. Portanto, a integração LBL serve de base para a comparação de todos os modelos espectrais. Para a geometria proposta, as superfícies são consideradas negras, a equação radiante é resolvida utilizando o método das ordenadas discretas com 30 direções e é utilizando um espectro com resolução de $0,33 \text{ cm}^{-1}$.

Como forma de validar os resultados apresentados, a solução LBL deste trabalho é comparada com uma solução LBL presente na literatura. Resultados apresentados por Chu et al, 2011, utilizando diversos bancos de dados espectrais (HITRAN 2004, HITRAN 2008, HITEMP 2010 e CSDS 2010), demonstram que na solução do problema de transferência de calor em meio participante existe uma forte dependência em relação ao banco de dados utilizado. Ainda, segundo Chu et al, 2011, o banco de dados HITRAN não deve ser utilizado para temperaturas maiores que 1000 K, justamente a faixa de temperaturas explorada no presente trabalho. Uma das verificações indicadas por Chu et al., 2011, é apresentada na Figura 4.2, para um meio com 100% de H_2O , temperatura na parede de 300 K e temperatura do meio de 1000 K, com placas planas distantes 1,0 m e superfícies negras. Os resultados apresentam concordância plenamente satisfatória, o que valida a metodologia desenvolvida de integração LBL deste trabalho, que será empregada nas próximas soluções referentes ao banco de dados HITEMP 2010.

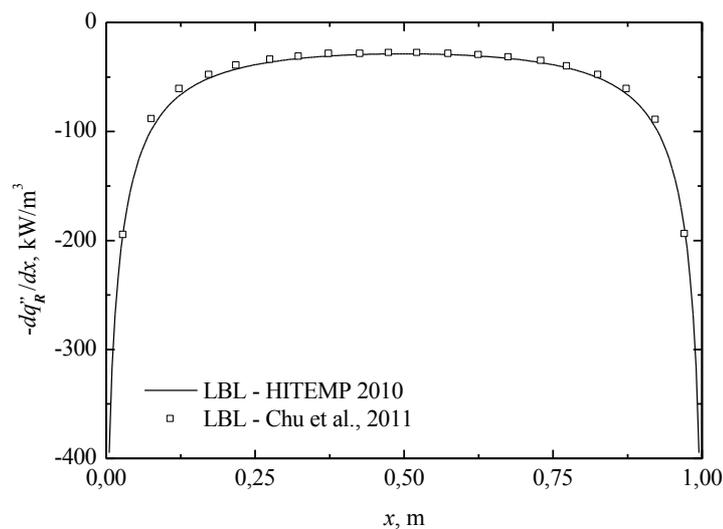


Figura 4.2 – Termo fonte radiante para 100% H_2O utilizando cálculos LBL. Verificação entre os resultados utilizando HITEMP 2010. Valor do fluxo radiante na parede - Presente trabalho:

$29,75 \text{ kW/m}^2$; Chu et al., 2011, $29,78 \text{ kW/m}^2$.

4.1.1 Refinamento de malha

Em métodos numéricos, sempre é muito importante definir qual o refinamento ideal da malha utilizada na solução do problema, ou seja, o tamanho de cada elemento para que a solução apresente resultados com boa qualidade. Para os testes realizados, uma diferença máxima de 1,0% é encontrada para soluções contendo entre 100 e 200 elementos. A Figura 4.3 ilustra os resultados encontrados para cada situação, onde são testadas configurações com 50, 100 e 200 elementos de malha. Visualmente é possível encontrar diferenças entre 50 e 100 elementos, mas a solução para 100 e 200 elementos se sobrepõe. Os resultados encontrados indicam que haverá uma diferença mínima entre estas configurações, não havendo influência significativa nas conclusões gerais que serão estabelecidas, justificando assim a viabilidade da configuração com 200 elementos de malha.

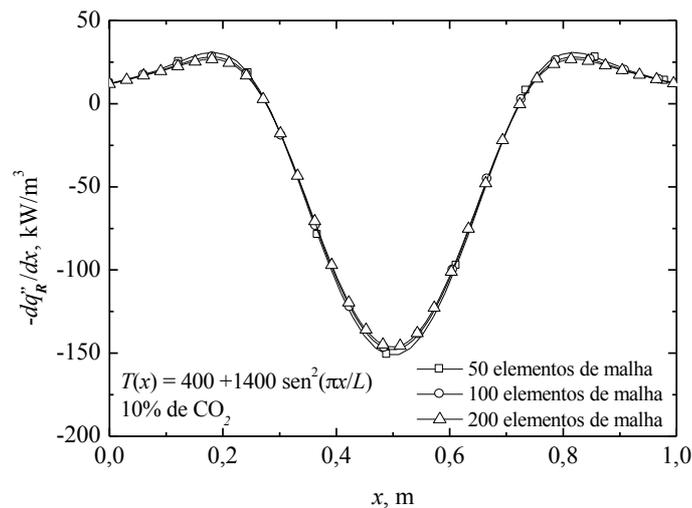


Figura 4.3 – Diferentes configurações de malha para um meio composto por 10% de CO_2 e 90% de N_2 . Valor do termo fonte radiante; na parede: 12,13 kW/m^3 (50 elementos), 11,93 kW/m^3 (100 elementos), 11,83 kW/m^3 (200 elementos); no centro: 150,85 kW/m^3 (50 elementos), 147,84 kW/m^3 (100 elementos), 146,20 kW/m^3 (200 elementos).

4.2 Resultados Utilizando o Modelo de Gás Cinza

Considerar o gás como sendo cinza é a forma mais elementar para a solução da radiação térmica. Por desconsiderar a dependência espectral do coeficiente de absorção a qualidade da solução pode ser seriamente comprometida. Conforme apresentado no Capítulo

3, o modelo é baseado na média entre as absorções ao longo de todos os comprimentos de onda. Esta consideração faz com que para um meio gasoso o resultado seja superestimado, já que alguns picos de absorção fazem com que o valor médio aumente, conforme mostram as Figuras 4.4, para o CO_2 e para o H_2O , ambos a 1600 K. Para partículas sólidas, com absorção contínua e variando linearmente, como é o caso da fuligem, esta média é muito mais realista, fazendo com que o modelo gere resultados melhores.

Um resultado ilustrativo para o modelo GG é apresentado na Figura 4.5, para o termo fonte radiante, que apresenta casos com meio participante composto por 10% CO_2 , 20% H_2O e uma mistura dos dois, a 1,0 atm. A configuração utilizada é de um meio com concentração homogênea, temperatura uniforme de 1100 K (T_m - Temperatura do meio participante), ao longo de duas placas planas distantes 1,0 m com superfície negra, na temperatura de 400 K (T_w - Temperatura da parede). Observa-se uma grande diferença entre as soluções LBL e GG. Por exemplo, em $x = 0,5$ m, o termo fonte radiante apresenta valores de $-38,7 \text{ kW/m}^3$ para a solução LBL e $-77,4 \text{ kW/m}^3$ para o modelo GG. A Figura 4.6 apresenta o resultado do fluxo de calor radiante para a mistura dos gases, onde se apresentam fluxos na parede de $20,5 \text{ kW/m}^2$ na solução LBL e $77,5 \text{ kW/m}^2$ para o modelo GG.

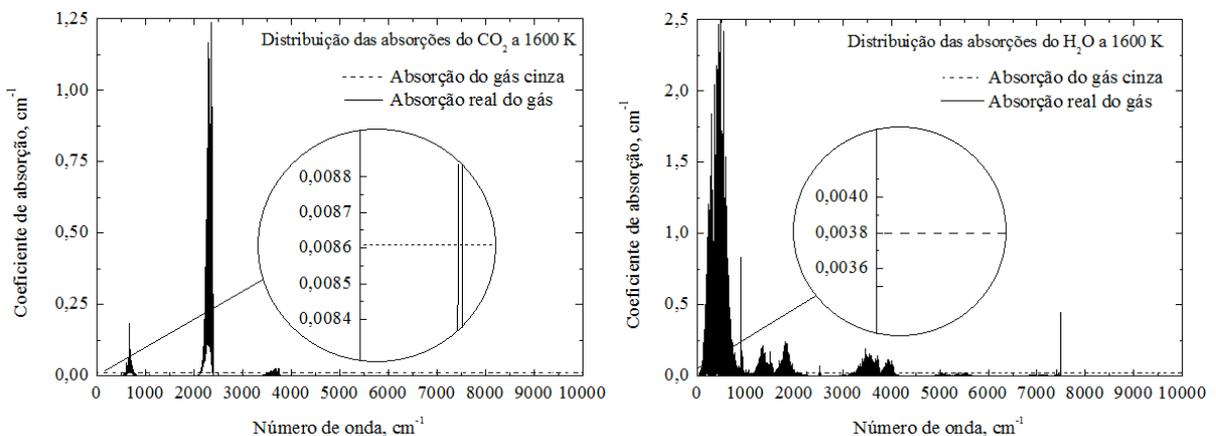


Figura 4.4 – Coeficiente de absorção do modelo de gás cinza comparado com a distribuição espectral real. (a) 10% de CO_2 a 1600 K e 1,0 atm ($\kappa = 0,0086 \text{ cm}^{-1}$). (b) 20% de H_2O a 1600 K e 1,0 atm ($\kappa = 0,0038 \text{ cm}^{-1}$).

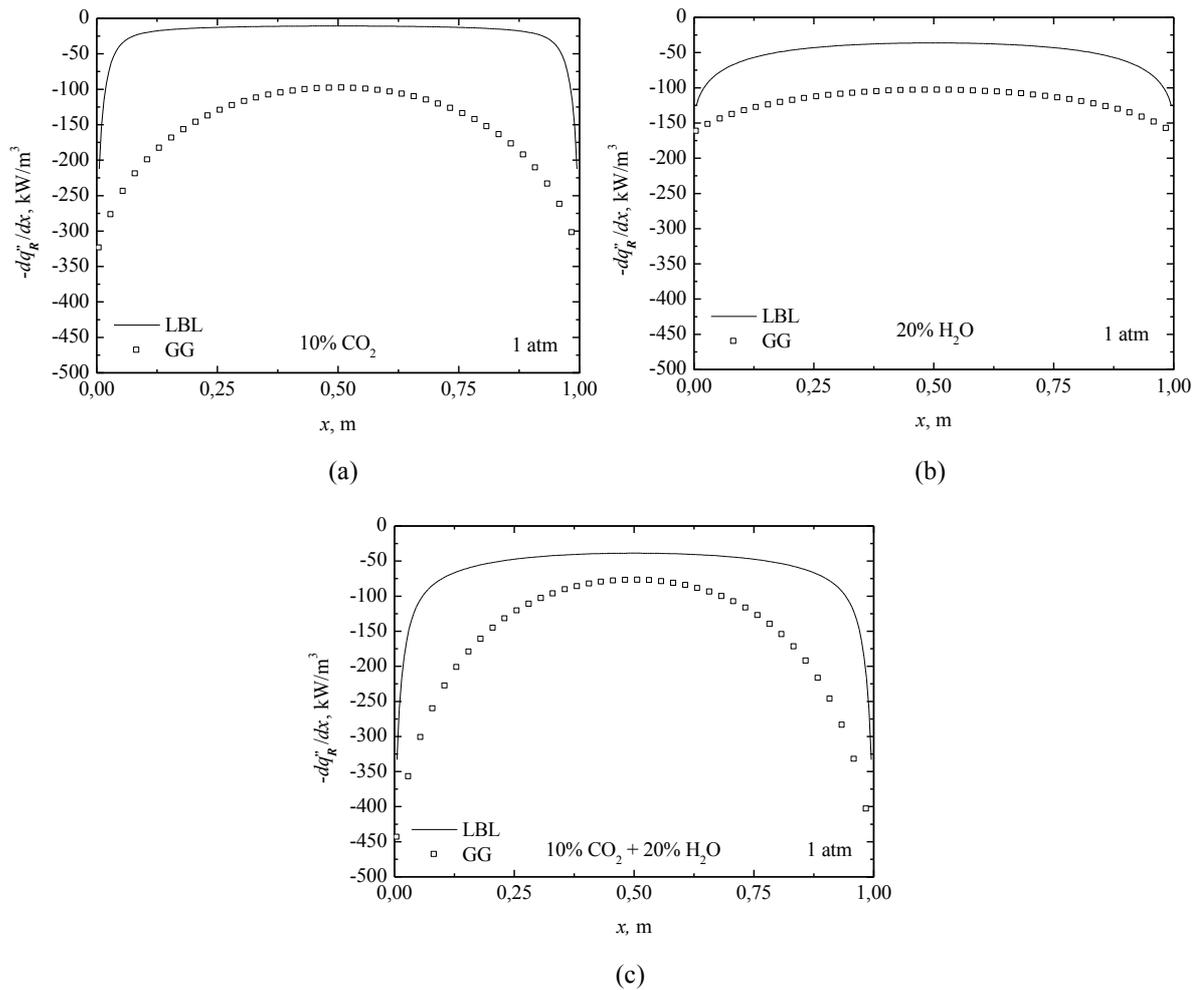


Figura 4.5 – Termo fonte radiante para o modelo GG comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO₂. (b) Meio participante com 20% de H₂O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO₂ e 20% de H₂O. $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.

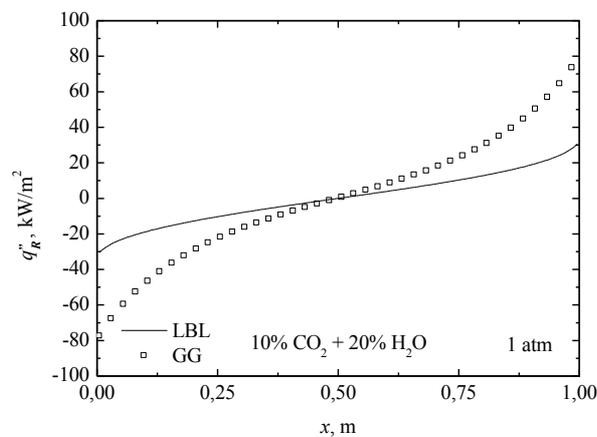


Figura 4.6 – Fluxos radiantes obtidos pelos modelo GG e pela solução LBL. Meio participante com mistura de 10% de CO₂ e 20% de H₂O. $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.

4.3 Resultados Utilizando o Modelo WSGG

O modelo WSGG é baseado na emitância total do meio participante, a partir da qual correlações são geradas em função de cada temperatura e cada comprimento característico, com base em funções polinomiais. As correlações, como resultado da emitância total, são obtidas para determinadas condições de pressão parcial das espécies químicas de interesse no processo de combustão, e por isso é necessário o entendimento de que sua aplicação está limitada às mesmas condições para a qual estas relações foram criadas. O modelo WSGG, na sua forma canônica, pode ser aplicado para concentrações não uniformes, desde que siga as razões de concentração previamente estabelecidas, por exemplo, $p_{H_2O}/p_{CO_2}=2$, razão que é empregada neste trabalho por ser típica da queima de metano. O modelo WSGG é de implementação simples, necessita de relativamente poucos recursos computacionais e, de acordo com Dorigon, 2012, apresenta bons resultados para meios não-isotérmicos. Recentemente, Duciak, 2013, obteve bons resultados com a aplicação do WSGG em meios não homogêneos.

Resultados com o modelo WSGG são apresentados nas Figuras 4.7 e 4.8, para o termo fonte e o fluxo de calor radiante, respectivamente, utilizando uma concentração de 10% CO₂ e 20% H₂O, a 1,0 atm, com placas planas distantes de 1,0 m e superfícies negras. A temperatura do meio foi fixada em 1100 K e as paredes em 400 K. Para os resultados apresentados considerando misturas das espécies químicas, são utilizadas as correlações apresentadas por Dorigon et al., 2013, (WSGG convencional), a implementação baseada no método direto para a mistura e a nova proposta apresentada no Capítulo 3, Seção 3.6. Nos resultados para o termo fonte radiante (Figura 4.7) tem-se, para a solução LBL, o valor de -38,7 kW/m³, no ponto médio entre as placas, para o caso envolvendo mistura das espécies químicas, sendo que as correlações de Dorigon et al., 2013, apresentaram um valor de -37,3 kW/m³, o método direto -42,0 kW/m³ e o método proposto -28,5 kW/m³. A maior diferença nos resultados é encontrada no método proposto, pois existe neste método uma diferença nos valores da emitância total em relação ao LBL maior do que nas correlações de Dorigon et al., 2013, e no método direto, devido à aproximação dada no acoplamento das espécies químicas, onde em situações de meio participante isotérmico e homogêneo essa diferença, mesmo pequena, fica bastante evidente. No fluxo de calor radiante, o valor de LBL na parede é de 30,5 kW/m², as correlações de Dorigon et al., 2013, 29,3 kW/m², o método direto 31,0 kW/m² e o método proposto 22,7 kW/m², onde novamente a menor acurácia é no método proposto.

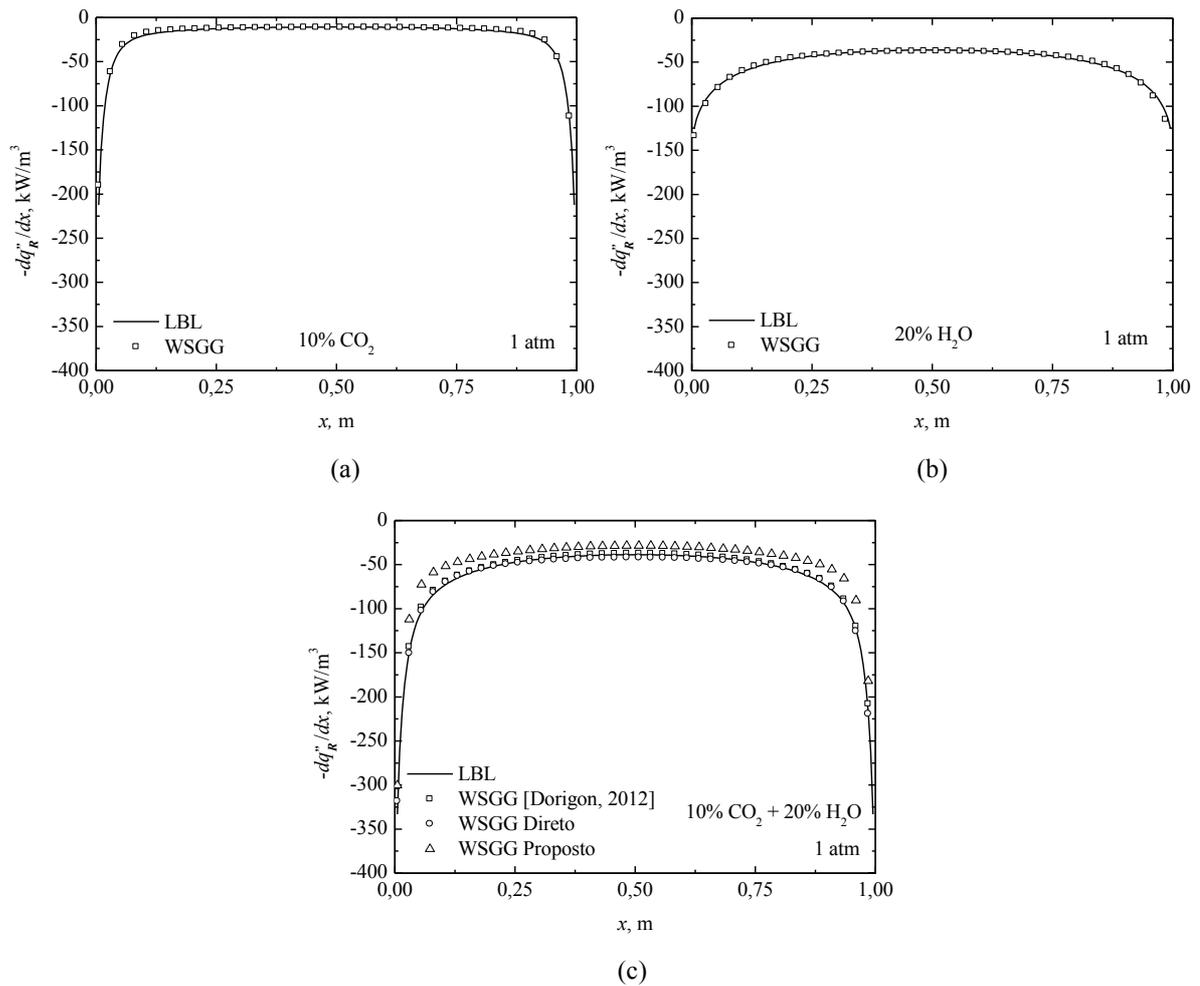


Figura 4.7 – Termo fonte radiante para o modelo WSGG comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO₂. (b) Meio participante com 20% de H₂O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO₂ e 20% de H₂O. $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.

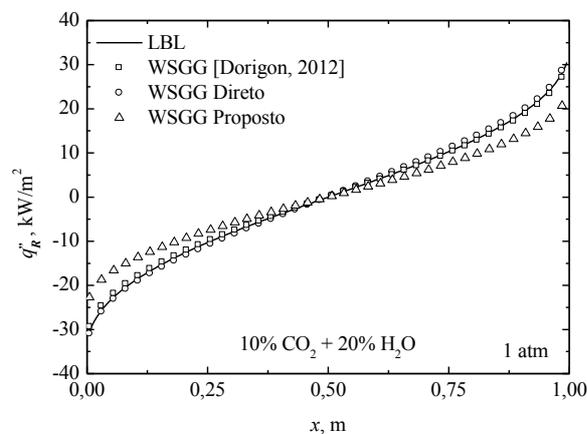


Figura 4.8 – Fluxo de calor radiante para o modelo WSGG comparando com a solução LBL. Meio participante com 10% de CO₂ e 20% de H₂O. $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.

4.4 Resultados Utilizando o Modelo SLW

Por possuir uma modelagem detalhada do espectro, é esperado do modelo SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais) uma boa aproximação na solução da intensidade radiante frente à solução LBL. O SLW é um modelo que apresenta bons resultados para meios isotérmicos e homogêneos, mas pode ser utilizado em meios com temperatura não isotérmica e com concentração de meio participante não homogênea apresentando resultados aproximados [Denison e Webb, 1995c]. Nesse modelo, cada gás sofre uma integração em cada seção de absorção, sendo possível obter funções de absorção relativas ao corpo negro. Como a decomposição do espectro é feita individualmente para cada espécie química, algum método de união para a mistura deve ser usado, sendo o método da multiplicação o escolhido para as soluções no presente trabalho, por apresentar soluções satisfatórias frente aos outros métodos de implementação e possuir uma solução com tempo computacional menor que os demais métodos [Solovjov e Webb, 2000].

Para a solução do modelo SLW serão utilizadas as configurações já detalhadas anteriormente, que constam de uma malha com 200 elementos e uma decomposição em 30 direções para a solução das ordenadas discretas. Além disso, o modelo é resolvido em uma decomposição de 20 gases cinza, o que corresponde a 21 seções de absorção ao longo do espectro, que é uma configuração de solução satisfatória conforme já verificado por Solovjov e Webb, 2001.

Resultados do modelo podem ser observados na Figura 4.9 para o termo fonte radiante. A solução é realizada em um meio participante com concentração uniforme correspondendo a 10% de CO₂ e 20% de H₂O, a 1,0 atm, na temperatura de 1100 K, placas planas distantes 1,0 m com superfície negra e temperatura de 400 K. Os resultados são separados para demonstrar a solução isolada de cada espécie química da mistura, de forma que a avaliação do modelo também possa ser feita a respeito do método de acoplamento. A solução do modelo é feita em duas formas distintas, considerando a solução canônica do modelo (solução pelo κ -correlacionado) e com solução pela aproximação de escala, de forma a avaliar qual solução mostra-se mais adequada. A solução para o fluxo de calor radiante é apresentada na Figura 4.10.

Os resultados apontam uma melhor acurácia para a solução utilizando a aproximação de escala em relação ao SLW canônico, tanto para as espécies químicas individualmente como na situação envolvendo a mistura, tanto para o termo fonte radiante quanto para o fluxo

de calor radiante. A solução envolvendo misturas apresenta um valor de $-55,2 \text{ kW/m}^3$ para o SLW e $-39,0 \text{ kW/m}^3$ para o SLW com a aproximação de escala, nos resultados para o termo fonte radiante, no ponto médio entre as paredes, sendo que o resultado LBL é de $-38,7 \text{ kW/m}^3$. Para o fluxo de calor radiante na parede o resultado é de $38,2 \text{ kW/m}^2$ para o SLW e $33,1 \text{ kW/m}^2$ para o SLW com aproximação de escala (LBL = $30,5 \text{ kW/m}^2$), mostrando uma maior concordância do SLW quando implementado com aproximação de escala.

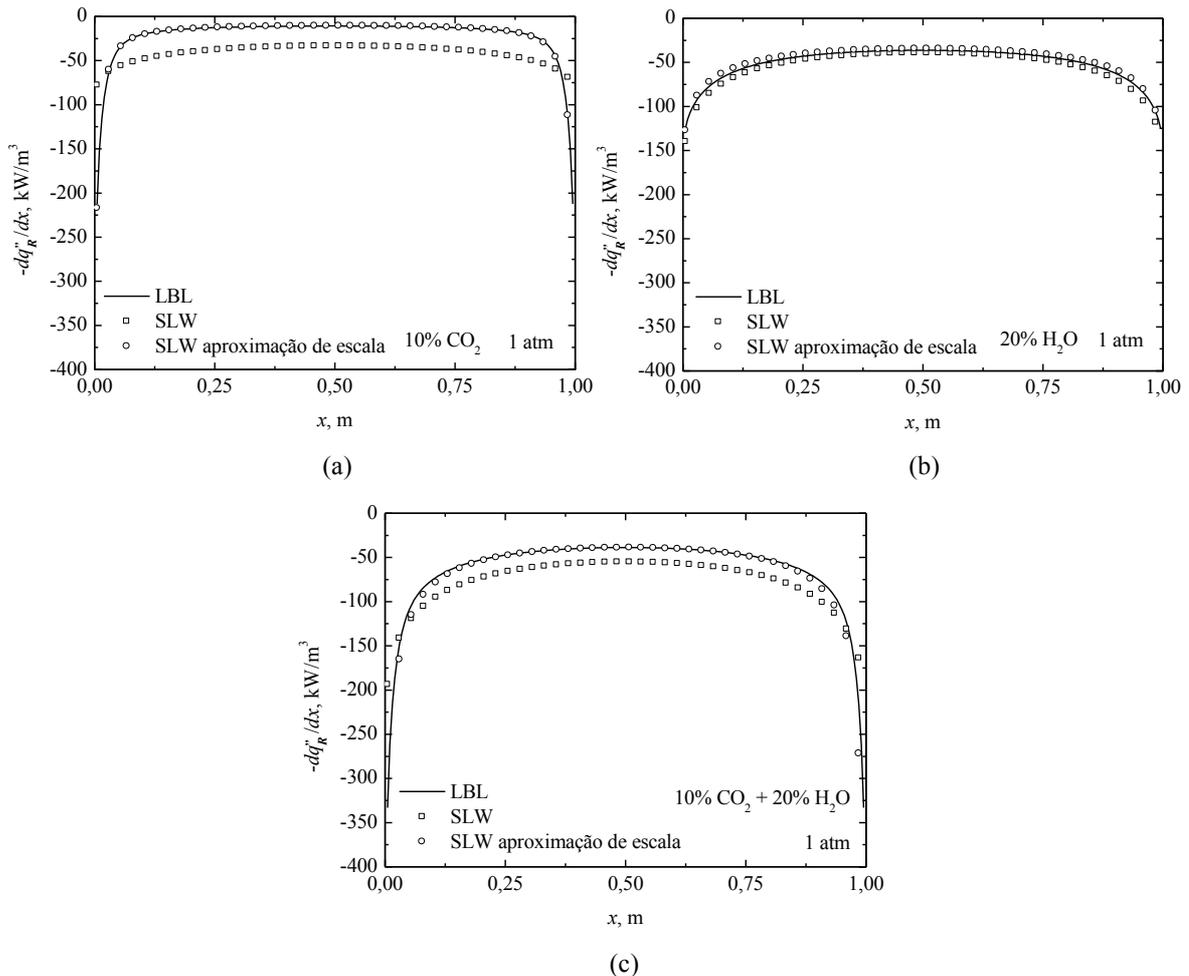


Figura 4.9 – Termo fonte radiante para o modelo SLW comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO_2 . (b) Meio participante com 20% de H_2O . (c) Meio participante com mistura de 10% de CO_2 e 20% de H_2O . $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$.

A consideração do espectro como uma aproximação de escala resolve em parte o problema da distribuição espectral com a mudança do estado termodinâmico, sendo uma aproximação mais adequada para a solução dos problemas de combustão do que o κ -correlacionado [Modest, 2003]. De acordo com Denison e Webb, 1995b, a aproximação de

escala é uma correção para o problema não isotérmico e não homogêneo, onde o κ -correlacionado apresenta seus maiores problemas. Mas, mesmo para um meio que não sofre alterações de temperatura ou concentração os resultados para as implementações apresentam resultados distintos.

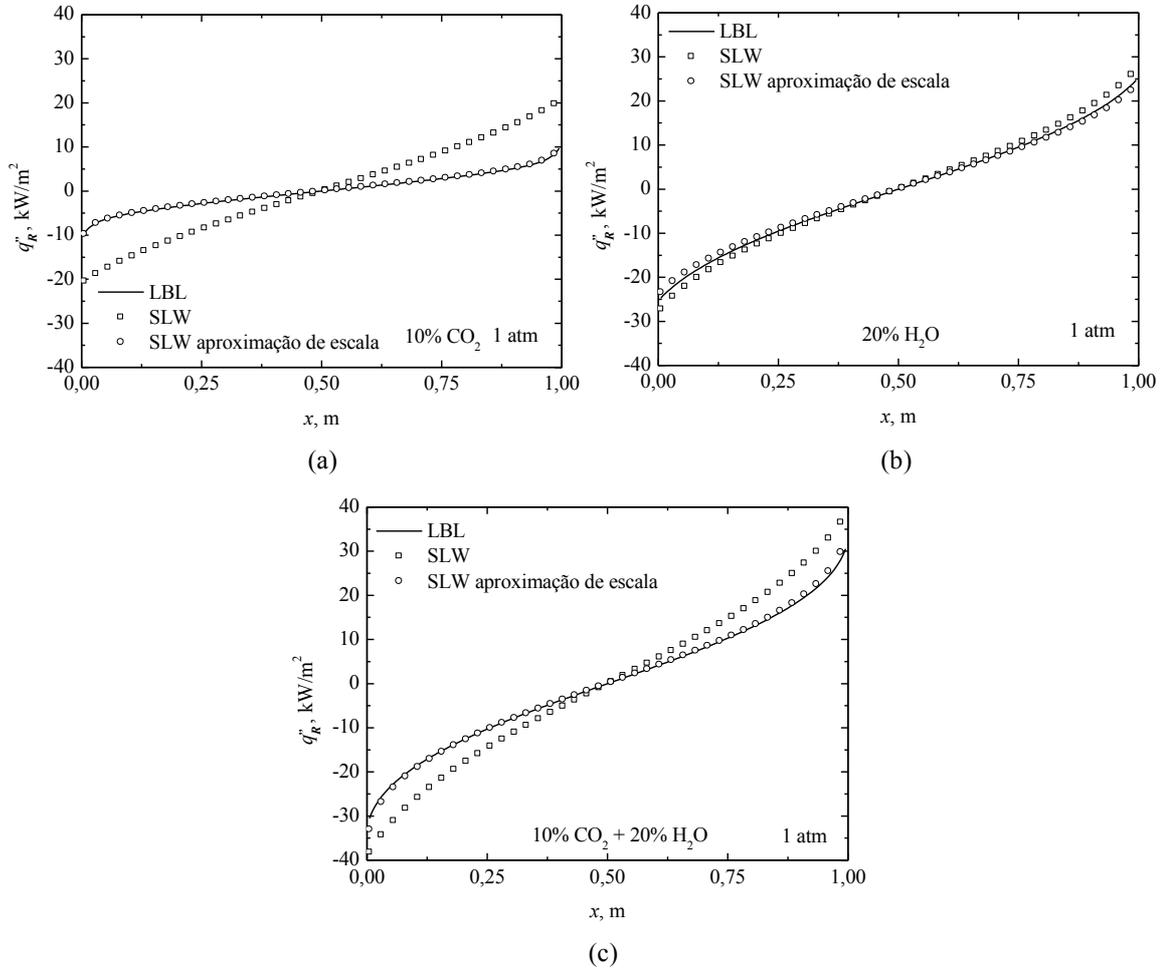


Figura 4.10 – Fluxo de calor radiante para o modelo SLW comparando com a solução LBL. Meio participante com 10% de CO_2 . (b) Meio participante com 20% de H_2O . (c) Meio participante com mistura de 10% de CO_2 e 20% de H_2O . $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.

Posteriormente às constatações de Denison e Webb, 1995b, a respeito da aproximação de escala, Solovjov e Webb, 2000, resolveram um meio contendo misturas CO_2 , H_2O e fuligem, utilizando a solução por κ -correlacionado em detrimento da acuracidade, mesmo tendo conhecimento das suas limitações. As observações satisfatórias feitas por Solovjov e Webb, 2000, se deveram, contudo, ao fato de que foi resolvido um falso meio não isotérmico e não homogêneo para avaliar a acurácia do modelo. Esse meio consistia em três diferentes

camadas isotérmicas e homogêneas entre as placas planas, formando diferentes trechos de temperatura e concentração, mas que na realidade não variavam entre suas fronteiras fictícias. Sendo as soluções apresentadas na literatura para a aproximação de escala sempre em função de um único gás, ou em misturas onde o meio participante apresenta configurações de temperatura e concentração de pouco interesse para aplicações em engenharia, constata-se a dificuldade dos próprios autores do método em aplicar as soluções, ou mesmo estender a solução para misturas.

Conforme apresentado por Solojov e Webb, 2011, aumentando-se o número de seções de absorção para um valor tendendo ao infinito (no caso, não é descrito qual o número de gases cinza utilizados, apenas supõe-se um valor extremamente elevado), mais próximo da solução *benchmark* (solução LBL) é tido o resultado do problema proposto. Isto mostra que uma parcela no erro da solução dos modelos baseados na função distribuição ALB é a limitação das seções que gera as funções de absorção, relativas ao número de gases cinza envolvidos na solução do problema. Outra fonte de erro está relacionada com as aproximações que devem ser estabelecidas nos valores de temperatura, geralmente dado por uma temperatura de referência na solução, que, por indicação da literatura, é uma temperatura média.

4.5 Resultados Utilizando o Modelo CW

O modelo CW (número de onda cumulativo) apresenta, de acordo com Solovjov e Webb, 2002, e Solovjov e Webb, 2005, resultados com acurácia elevada para o termo fonte radiante, sendo uma boa opção para esta solução. Da mesma forma que o modelo SLW, o modelo CW realiza a decomposição do espectro, baseada em seções de absorção, mas o tratamento posterior é modificado, onde passam a ser criadas funções escada (funções Heaviside) que serão posteriormente integradas, representando assim a absorção da espécie química. Cada espécie química do meio participante é integrada individualmente, sendo necessário algum método de acoplamento para a solução de misturas. O método da superposição é escolhido, por ser amplamente utilizado e ter demonstrado bons resultados na literatura, como por exemplo em Solovjov e Webb, 2005. Apesar de apresentar boas soluções para o termo fonte radiante, o método apresenta pouca acurácia na determinação do fluxo de calor radiante [Galarça et al., 2011]. Além disso, o CW é um modelo de complexa implementação e o tempo computacional é extremamente elevado em relação aos outros

modelos. Outro fator negativo é o de que o modelo CW envolvendo a solução da aproximação por superposição não apresenta uma forma de solucionar um meio contendo apenas particulado, ou seja, o acoplamento da fuligem apenas é possível quando o meio já contém espécies químicas gasosas como meio participante.

Como forma de obter uma avaliação inicial do modelo CW, é proposta uma geometria com distância entre as placas planas de 1,0 m, com superfície negra, com meio participante composto por 10% de CO_2 e 20% de H_2O a 1,0 atm, onde a concentração é homogênea, e a temperatura é uniforme, sendo 1100 K e 400 K as temperaturas do meio e das paredes, respectivamente. O resultado para o termo fonte radiante pode ser verificado na Figura 4.11, em que se observam erros consideráveis na modelagem do CO_2 , apresentando melhores resultados para o H_2O . A solução envolvendo misturas apresentou um resultado para o termo fonte radiante de $-49,8 \text{ kW/m}^3$, enquanto a solução LBL é de $-38,7 \text{ kW/m}^3$.

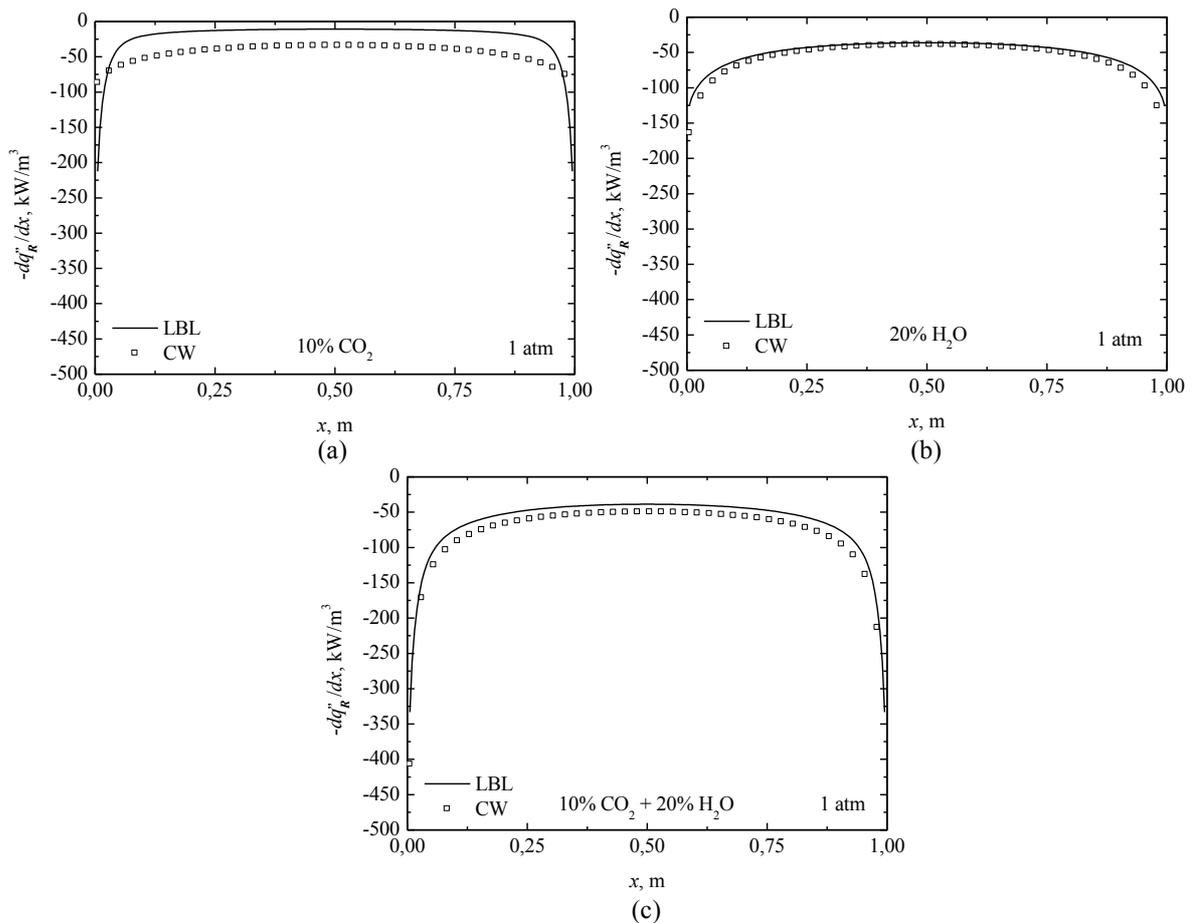


Figura 4.11 – Termo fonte radiante para o modelo CW comparando com a solução LBL. (a) Meio participante com 10% de CO_2 . (b) Meio participante com 20% de H_2O . (c) Meio participante com mistura de 10% de CO_2 e 20% de H_2O . $T_w=400 \text{ K}$, $T_m=1100 \text{ K}$.

Para o fluxo de calor radiante, os resultados são apresentados na Figura 4.12. No modelo CW, considerando a mistura de espécies químicas, o fluxo de calor é de 37,8 kW/m² na parede, contra 30,5 kW/m² apresentado pelo LBL. Os resultados apresentam uma boa acurácia para a solução do H₂O (CW = 27,9 kW/m² ; LBL = 24,7 kW/m²) mas uma acuracidade ruim para o meio composto apenas por CO₂ (CW = 21,7 kW/m² ; LBL = 9,7 kW/m²).

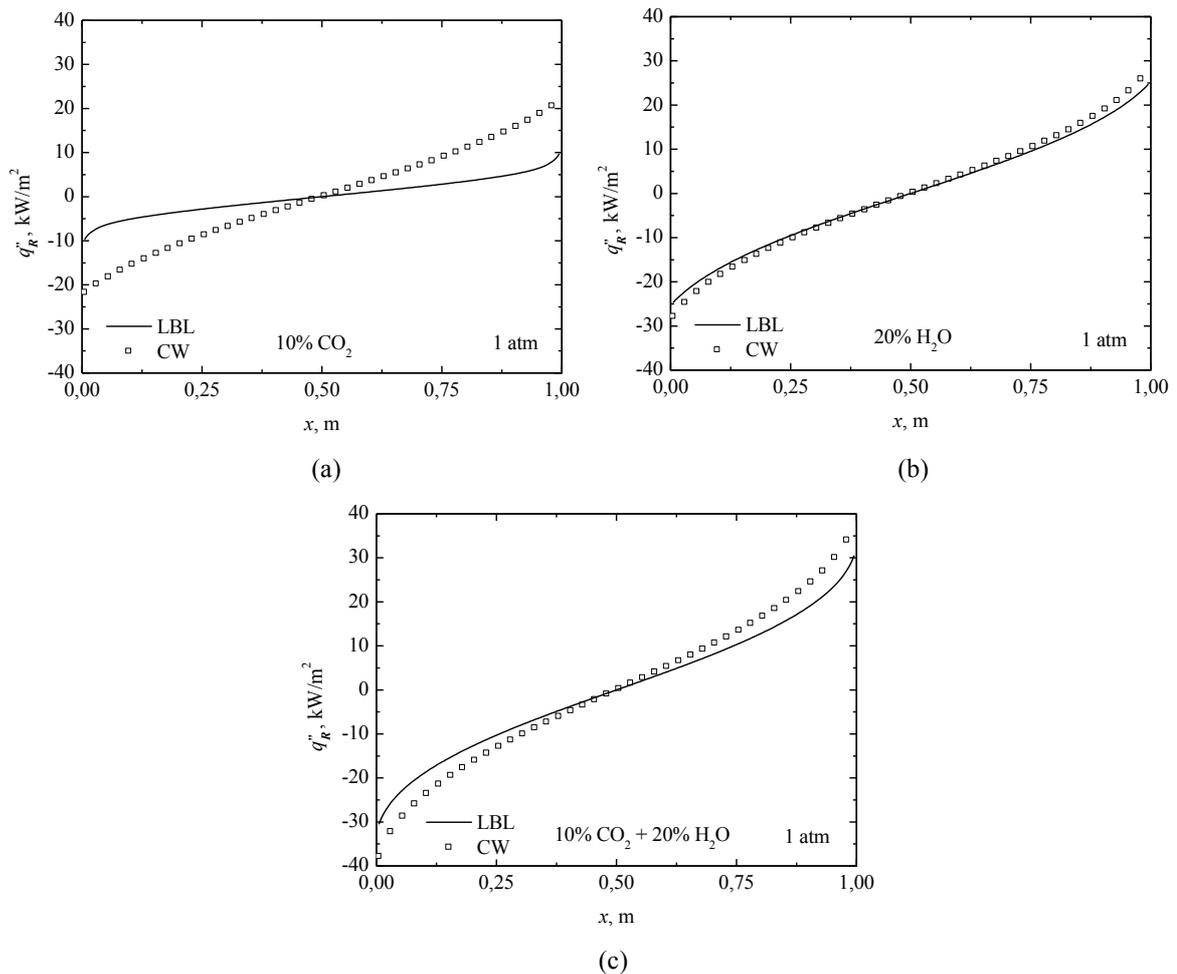


Figura 4.12 – Fluxo de calor radiante para o modelo CW comparando com a solução LBL. Meio participante com 10% de CO₂. (b) Meio participante com 20% de H₂O. (c) Meio participante com mistura de 10% de CO₂ e 20% de H₂O. $T_w=400$ K, $T_m=1100$ K.

4.6 Metodologia de avaliação dos modelos espectrais

Com o objetivo de analisar em maior profundidade os modelos espectrais de radiação térmica, é fundamental estabelecer alguns limites para o planejamento das simulações. O estabelecimento desses limites visa não somente a restringir o número de simulações realizadas, que seriam em um número muito elevado caso desejássemos investigar todos os casos possíveis em sistemas de combustão (considerando variações de geometria, concentração do meio participante e distribuição das temperaturas), mas também organizar os resultados. Algumas análises já foram realizadas utilizando distribuição de temperatura e concentração uniformes, mas, no presente trabalho, os perfis de temperatura e de concentrações dos gases e fuligem serão especificados com base em dados da literatura para permitir uma aproximação com casos reais de combustão, avaliando diferentes distribuições de temperatura e concentração do meio participante.

Tendo em vista a vasta variedade de perfis de temperatura existentes em processos de combustão, optou-se por casos próximos àqueles encontrados em chamas laminares. Os perfis de temperatura selecionados são expressos então pelas seguintes equações:

$$T(x) = 400 + 1400 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (4.1)$$

$$T(x) = 400 + 1400 \operatorname{sen}^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (4.2)$$

$$T(x) = \begin{cases} 920 + 880 \operatorname{sen}^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right), & x \leq L/4 \\ 1100 + 700 \cos\left(\left|\frac{x}{L/4} - 1\right|\right), & x > L/4 \end{cases} \quad (4.3)$$

Sendo T a temperatura, x a posição espacial e L a distância entre as placas planas. Esses perfis são ilustrados na Figura 4.13, e procuram reproduzir situações encontradas em diferentes regiões da chama, como apresentado na Figura 4.14.

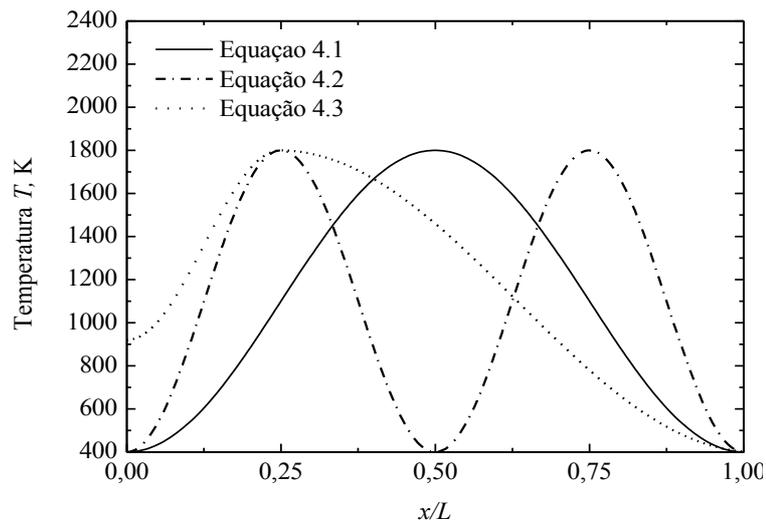


Figura 4.13 – Perfis de temperatura desenvolvidos para avaliar os modelos espectrais.

Os casos representativos do perfil de temperatura tratam de situações onde: na Equação 4.1, considera-se um corte transversal na região superior da chama; na Equação 4.2, tem-se um corte transversal em uma região intermediária da chama; e na Equação 4.3, o perfil de temperatura não simétrico representa a distribuição de temperatura na direção axial à chama. O formato da distribuição da temperatura de acordo com o indicado na Figura 4.14 é indicado por Turns, 2006, para chamas laminares difusivas. Os três perfis de temperatura utilizados nas simulações apresentam temperaturas médias de 1100 K, apresentando um mínimo de 400 K e máximo de 1800 K, estando de acordo com as temperaturas encontradas por Mossi et al., 2010.

Da mesma forma que foram feitas as determinações da temperatura, é também importante determinar as concentrações das espécies químicas do meio participante ao longo da chama. Em muitos trabalhos que avaliam os modelos espectrais são consideradas concentrações uniformes ao longo da geometria, mas concentrações uniformes ocorrem apenas em regiões fora da chama, onde a temperatura também é uniforme. De acordo com Turns, 2006, a distribuição dos produtos da combustão acompanha a chama, e as regiões de maior concentração das mesmas encontram-se na região de maior temperatura. Por outro lado, as regiões de menor temperatura e de menor concentração dos produtos da combustão são as regiões de maior concentração de combustível. Para um melhor entendimento, é possível identificar a distribuição tanto da temperatura, como da concentração dos produtos da combustão na Figura 4.14b.

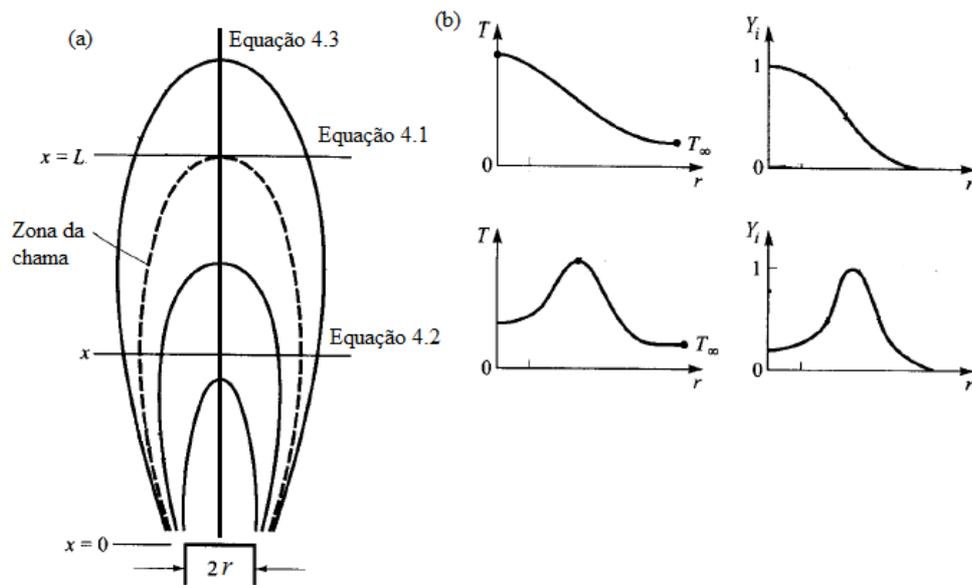


Figura 4.14 – (a) Estrutura de uma chama laminar difusiva. (b) Distribuição de temperatura e dos produtos da combustão. [adaptado de Turns, 2006].

Conhecendo a forma da distribuição de concentrações do meio participante, sabendo que a distribuição do meio participante possui uma relação com a distribuição das temperaturas, teremos uma concentração variando de zero (0) a um máximo no ponto de máxima temperatura, representando as concentrações de H_2O , CO_2 e fuligem para cada caso estudado. As distribuições das concentrações das espécies participantes são dadas pelas seguintes equações:

$$Y(x) = Y_{m\acute{a}x} \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (4.4)$$

$$Y(x) = Y_{m\acute{a}x} \operatorname{sen}^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (4.5)$$

$$Y(x) = \begin{cases} \frac{Y_{m\acute{a}x}}{2} + \frac{Y_{m\acute{a}x}}{2} \operatorname{sen}^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right), & x \leq L/4 \\ \frac{Y_{m\acute{a}x}}{2} + \frac{Y_{m\acute{a}x}}{2} \cos\left(\left|\frac{x}{L/4} - 1\right|\right), & x > L/4 \end{cases} \quad (4.6)$$

sendo $Y(x)$ a concentração molar da espécie química ao longo das placas planas e $Y_{máx}$ a sua concentração máxima, que é dada como 0,2 (20%) para o H_2O , 0,1 (10%) para o CO_2 . O valor de Y para a fuligem é dado em termos da fração volumétrica, o qual será indicado posteriormente. A distribuição tem relação direta com a temperatura, onde a maior temperatura é o ponto de maior concentração do meio participante. As equações propostas para os casos não isotérmicos e não homogêneos são relacionadas da seguinte forma: Equação 4.1 com a Equação 4.4; Equação 4.2 com a Equação 4.5; Equação 4.3 com a Equação 4.6.

As concentrações das emissões das espécies químicas estudadas restringem-se a um caso de combustão de metano em ar. A escolha deve-se ao fato de este ser um combustível comumente utilizado em casos de combustão, proporcionando fácil acesso a dados referentes ao mesmo na literatura. A combustão do metano apresenta uma razão de concentração das espécies químicas dada por $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ (determinado como 20% de H_2O e 10% de CO_2). Para a solução da concentração de fuligem, a fração volumétrica na chama de metano encontra-se na faixa de 1×10^{-6} . Na literatura é possível encontrar as frações volumétricas máximas para a combustão de gases, como o acetileno e o propano, na faixa de $15,3 \times 10^{-6}$ e $3,7 \times 10^{-6}$, respectivamente. Para efeito de análise, serão realizadas simulações envolvendo o intervalo de concentração da fuligem de 1×10^{-8} a 1×10^{-5} . Com um meio participante composto por CO_2 , H_2O e fuligem, para frações parciais, o restante do meio é composto por N_2 , que é transparente à radiação.

Para a avaliação dos resultados serão considerados erros máximos e médios na solução do termo fonte radiante e do fluxo de calor radiante. Para o erro máximo, é considerada a maior diferença de resultado entre o fluxo de calor ou o termo fonte radiante obtido pela integração LBL e cada modelo espectral (GG, WSGG, SLW e CW), enquanto o erro médio é obtido por uma média entre os erros calculados, conforme as equações abaixo:

$$\delta(x) = \left| \frac{q''_{R,\text{modelo}} - q''_{R,LBL}}{\text{máx}(q''_{R,LBL})} \right| \times 100\% \quad (4.7)$$

$$\xi(x) = \left| \frac{\dot{q}_{R,\text{modelo}} - \dot{q}_{R,LBL}}{\text{máx}(\dot{q}_{R,LBL})} \right| \times 100\% \quad (4.8)$$

onde δ refere-se ao erro local no termo fonte radiante e ξ refere-se ao erro local no fluxo de calor radiante.

Os resultados serão gerados para uma geometria unidimensional, 1D, conforme especificado anteriormente, em duas situações geométricas, uma com as placas planas distantes em 0,2 m e outra com placas distantes de 1,0 m, cujas paredes são consideradas negras ($\varepsilon = 1,0$). Alterar a distância entre as placas planas é importante para verificar eventuais alterações de resultado devido à mudança na espessura óptica e nos gradientes de temperatura e das concentrações das espécies participantes. Todas as soluções matemáticas são baseadas no método das ordenadas discretas, utilizando uma decomposição em 30 direções, e a malha para a solução é dividida em 200 elementos.

4.7 Resultados para Meios Contendo Apenas a Fuligem

Conforme descrito no Capítulo 3, a fuligem possui propriedades espectrais que variam linearmente com o número de onda. Apesar da fácil determinação da absorção da fuligem, sendo possível uma integração relativamente simples ao longo de todo o espectro, apresentando bons resultados mesmo para o gás cinza, para adequar a fuligem ao modelo espectral dos demais gases participantes (H_2O e CO_2), é necessário o mesmo tratamento espectral para o particulado. Os resultados para um meio composto apenas por fuligem, com fração volumétrica de 1×10^{-5} , solucionada com os modelos GG, WSGG, SLW e integração LBL, para os perfis de temperatura propostos, são apresentados nas Figuras 4.15 a 4.17 para o termo fonte radiante e fluxo de calor radiante. Não são apresentados resultados para o modelo CW, pois, como mencionado anteriormente, a aproximação por superposição não permite a verificação de um meio participante composto apenas por particulado.

Como pode ser observado, nos resultados das Figuras 4.15(a) a 4.17(a), para o termo fonte radiante, as soluções possuem um erro médio que varia de 2% até 4% em relação ao resultado *benchmark*, sendo a melhor concordância de 2,05% para o WSGG com a distribuição de temperatura dada pela Equação 4.3, e a menor concordância de 4,07% para o SLW com perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. Em relação ao erro máximo, a melhor acurácia é a do WSGG, com 4,4% na distribuição de temperatura da Equação 4.2, e a menor acurácia é a do GG, com 12,44% na distribuição de temperatura dada pela Equação 4.1.

Mesmo a diferença dos resultados sendo pequena, é possível indicar que o modelo GG apresenta as maiores diferenças na região de maior temperatura (no caso da Equação 4.1, no centro da geometria), e o modelo SLW apresenta as maiores diferenças nas paredes. Na maioria dos casos os melhores resultados são para o WSGG.

Em relação às Figuras 4.15(b) a 4.17(b), para o fluxo de calor radiante, o erro médio dos resultados foi superior ao erro médio para o termo fonte radiante, sendo que o modelo WSGG apresentou melhor concordância em relação aos demais modelos, onde o melhor resultado é em relação ao perfil de temperatura dado pela Equação 4.3, com um erro médio de 3,23%.

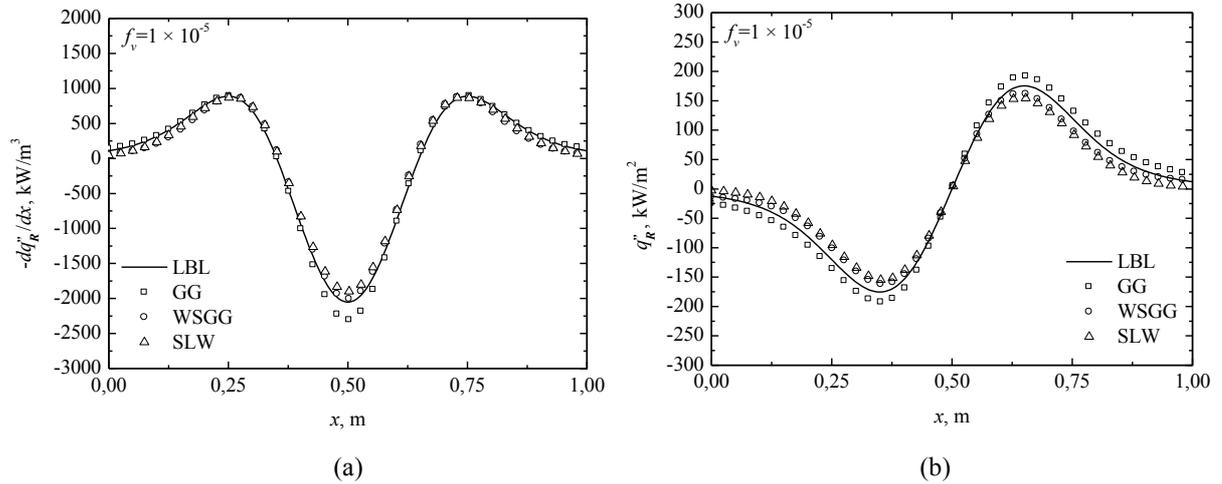


Figura 4.15 – Meio participante composto por fuligem, $f_v=1 \times 10^{-5}$, utilizando os modelos GG, WSGG e SLW comparados com a solução LBL. Perfil de temperatura dado pela Equação 4.1.

(a) Termo fonte radiante [erro médio de 2,25 % (GG), 3,62 % (WSGG) e 4,07 % (SLW)].

(b) Fluxo de calor radiante [erro médio de 7,96 % (GG), 5,88 % (WSGG) e 9,97 % (SLW)].

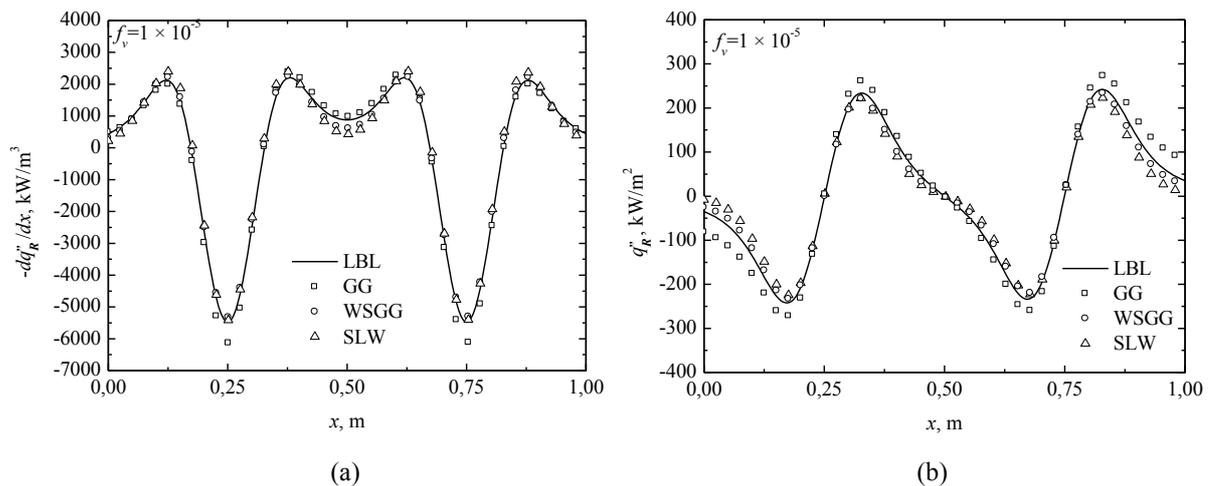


Figura 4.16 – Meio participante composto por fuligem, $f_v=1 \times 10^{-5}$, utilizando os modelos GG, WSGG e SLW comparados com cálculos LBL. Perfil de temperatura dado pela Equação 4.2.

(a) Termo fonte radiante [erro médio de 3,71 % (GG), 2,20 % (WSGG) e 3,93 % (SLW)].

(b) Fluxo de calor radiante [erro médio de 10,12 % (GG), 3,23 % (WSGG) e 8,46 % (SLW)].

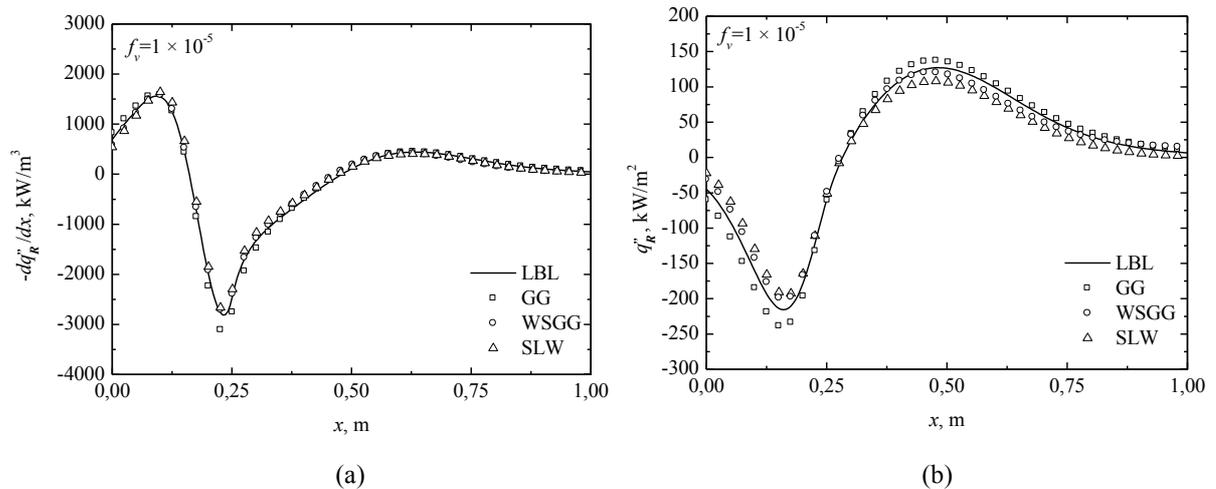


Figura 4.17 – Meio participante composto por fuligem, $f_v=1 \times 10^{-5}$, utilizando os modelos GG, WSGG e SLW comparados com cálculos LBL. Perfil de temperatura dado pela Equação 4.3.

(a) Termo fonte radiante [erro médio de 2,07 % (GG), 2,05 % (WSGG) e 2,69% (SLW)].

(b) Fluxo de calor radiante [erro médio de 4,82 % (GG), 4,07 % (WSGG) e 7,01 % (SLW)].

4.8 Análise entre a Solução LBL e os Modelos CW, SLW, WSGG e GG para Meios Envolvendo Mistura de Gases Participantes e Fuligem

Após terem sido feitas análises individuais de cada modelo espectral, é possível unificar as avaliações em um único conjunto de forma a termos uma percepção geral do comportamento de cada um. A intenção para a avaliação dos modelos é a de verificar a influência nas variações do meio participante (temperatura, concentração do meio) e principalmente soluções envolvendo misturas de gases e particulado. Com esse fim, são verificadas situações contendo 10% de CO_2 e 20% de H_2O , com pressão do meio de 1 atm (aberto para a atmosfera), sendo que apenas a concentração de fuligem apresenta uma faixa de variação mais extensa, de 1×10^{-8} a 1×10^{-5} (0,01 ppm a 10 ppm), além de casos sem fuligem. Inicialmente são verificados os modelos espectrais cujos métodos de acoplamento de mistura já estão bem determinados (SLW por multiplicação e CW por superposição), sendo que posteriormente serão avaliados com maior detalhamento os métodos de acoplamento propostos para o modelo WSGG (método direto e método proposto).

Para uma primeira análise, considerando a geometria unidimensional com 1,0 m de distância entre as placas planas com superfície negra, com concentração uniforme no meio

participante e temperatura variando de acordo com as Equações 4.1-4.3. Tendo inicialmente as espécies químicas em condições de concentração uniforme, é importante primeiramente determinar qual a concordância da solução para meios contendo uma única espécie química, CO_2 ou apenas H_2O , mas utilizando os perfis de temperatura que variam ao longo da geometria. Dessa forma é mantida a concentração padrão, sendo 10% de CO_2 e 20% de H_2O , mas solucionadas individualmente, como é apresentado nos resultados das Figuras 4.18 e 4.19, para o termo fonte radiante e para o fluxo de calor radiante, respectivamente.

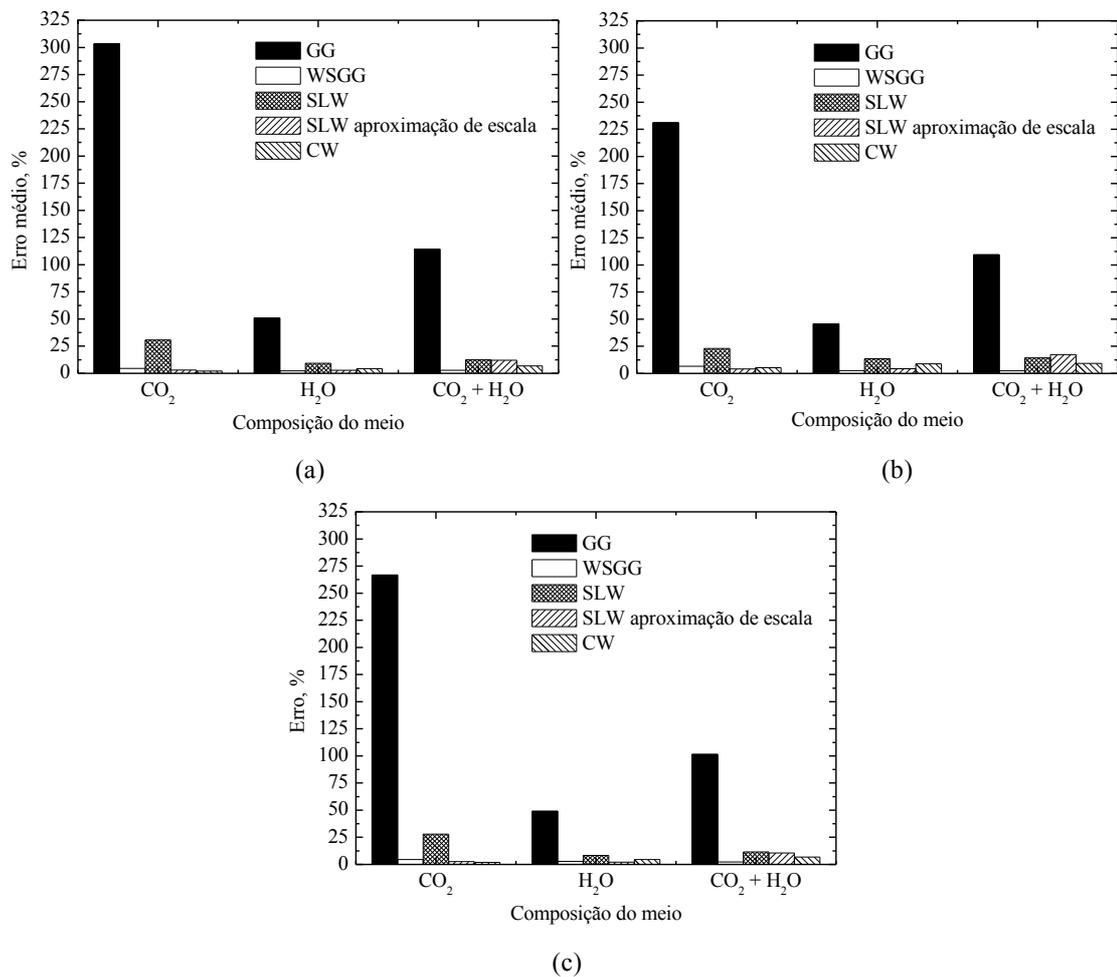


Figura 4.18 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante. Meio homogêneo composto por 10% no CO_2 e 20% no H_2O . $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

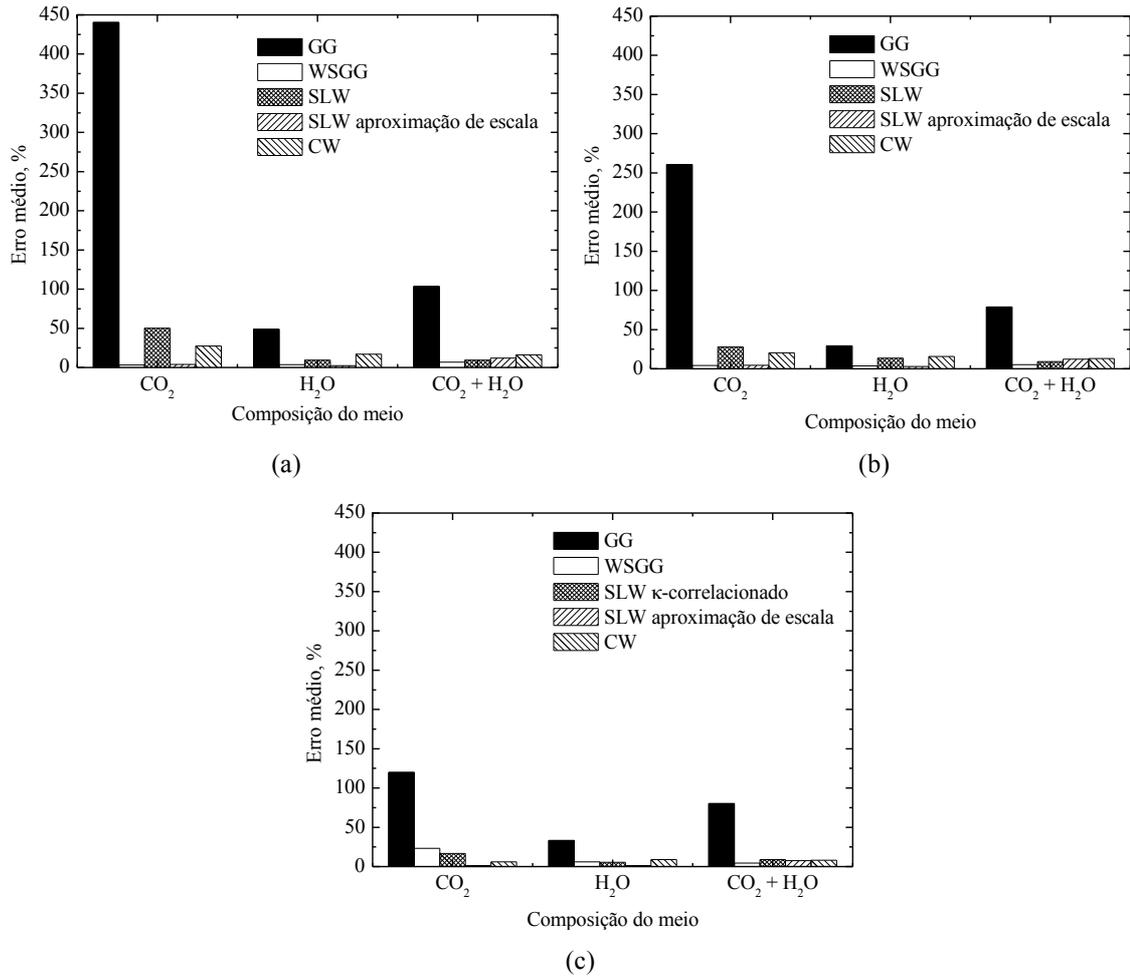


Figura 4.19 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante. Meio homogêneo composto por 10% no CO₂ e 20% no H₂O. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

Os resultados mostram que o modelo GG apresenta erros muito elevados. Isso era esperado, pois neste caso não há fuligem, que tende a reduzir o erro do modelo GG. Em contrapartida, os modelos SLW com aproximação de escala e WSGG são os modelos com maior concordância, apresentando para o CO₂ erros de 3,07% (SLW aproximação de escala) e 4,52% (WSGG) e, para o H₂O, 2,81% (SLW aproximação de escala) e 2,34% (WSGG), com o perfil de temperatura da Equação 4.1. Os menores erros foram obtidos com o perfil de temperatura dado pela Equação 4.3. Um fato de interesse nos resultados para o gás individual é o erro mais significativo para o CO₂ do que para o H₂O em todos os casos. Os resultados para o fluxo de calor mantêm as mesmas conclusões das observações feitas para o termo fonte radiante, com exceção do cálculo do fluxo radiante para o meio contendo CO₂ através do modelo WSGG, para a Equação 4.3, que ficou acima do que obtido pelos demais resultados.

Prosseguindo com as análises, são apresentados resultados para misturas envolvendo gás e fuligem com os diversos modelos espectrais. Observa-se através da Figura 4.20a, que apresenta o erro médio no cálculo do termo fonte radiante para o perfil de temperatura dado pela Equação 4.1, onde o erro médio é acima de 110% para o modelo GG com um meio gasoso ($f_v=0$), sendo que por sua vez ocorre uma melhora nos resultados conforme aumenta a concentração de fuligem, até o máximo estabelecido ($f_v=10^{-5}$), onde o erro médio é de 3,26%.

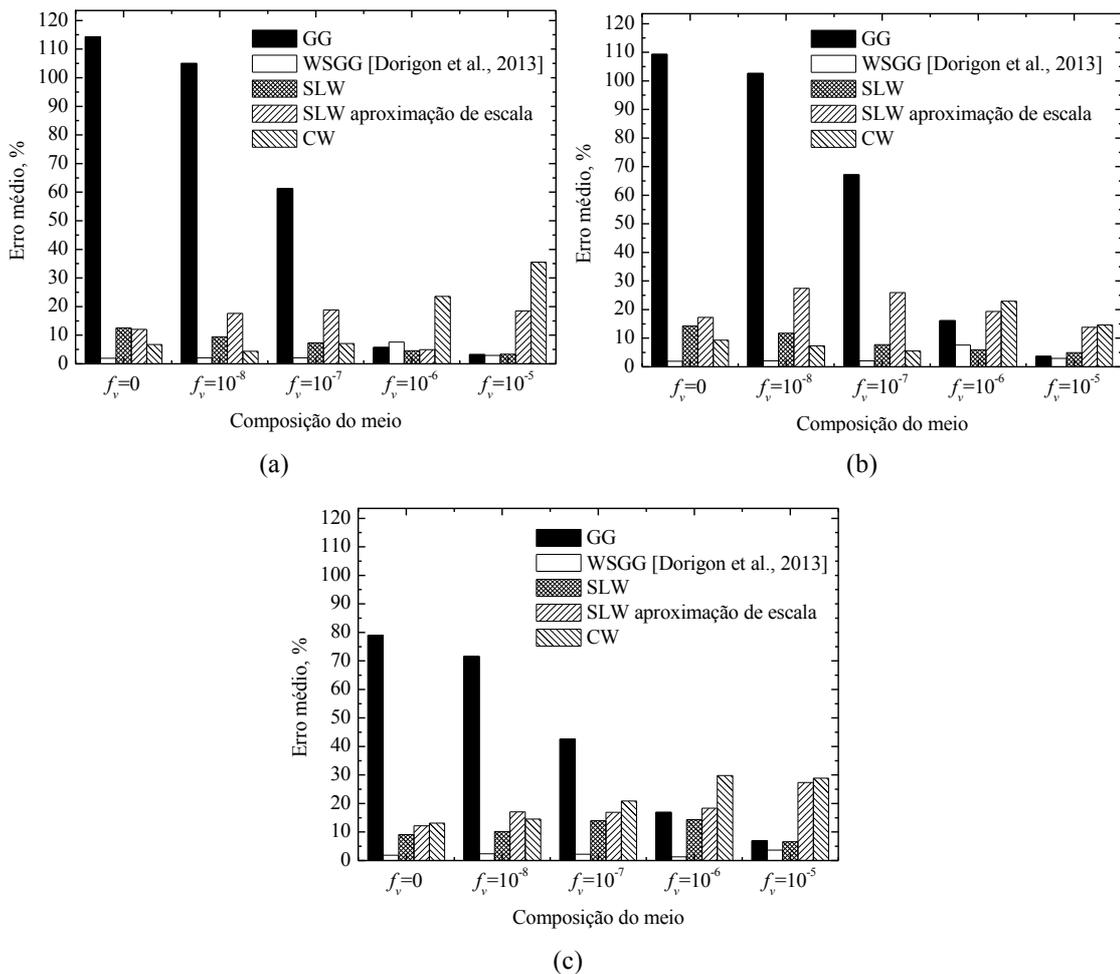


Figura 4.20 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante. Meio homogêneo composto por 10% de CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

Em relação aos demais modelos, conforme a Figura 4.20(a), o WSGG convencional apresenta uma constância nos resultados, com uma média de 3,3% no erro. O modelo SLW apresenta uma leve melhora nos resultados com o aumento da fuligem, sendo que o SLW com

aproximação de escala apresenta resultados com qualidade inferior com o aumento na concentração de fuligem. O modelo CW apresenta uma perda de acurácia com o aumento da concentração de fuligem, cujos valores vão de 4,39% a 35,51%. As Figuras 4.20(b) e 4.20(c), que mostram os resultados para os perfis de temperatura das Equações 4.2 e 4.3, respectivamente, mostram a mesma tendência de resultados.

Além das determinações do termo fonte radiante, também é importante avaliar a concordância no cálculo do fluxo de calor radiante, conforme apresentado na Figura 4.21 para as mesmas condições anteriores, ou seja, placas planas com paredes negras distantes 1,0 m, com meio participante contendo 10% de CO₂ e 20% de H₂O e concentração de fuligem variando de 0 a 1×10^{-5} . Para o fluxo de calor radiante é importante ressaltar o evidente descompasso em relação ao modelo CW, cujos erros médios, além de serem superiores aos dos outros modelos, passam a se tornar maiores conforme aumenta a concentração de fuligem. Desconsiderando os resultados do modelo GG, que continua com erros acima de 100% para um meio composto apenas por espécie química gasosa, o modelo CW apresenta os maiores erros para o fluxo de calor radiante frente aos outros modelos, variando de 16,31% a 93,98% para casos envolvendo o perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. O modelo WSGG apresenta os melhores valores, com máximo erro médio de 7,45% utilizando a Equação 4.1, mas com erro médio de apenas 1,31% quando se utilizaram as Equações 4.2 e 4.3.

Com os resultados apresentados é possível perceber erros significativos em modelos mais avançados (SLW e CW) frente aos modelos mais simples (GG e WSGG). Em condições de alta concentração de fuligem é possível, por exemplo, recomendar a utilização do GG, não apenas pelo fato de que o tempo computacional para a solução é menor, mas também em função de que a utilização dos modelos SLW ou CW apresentam resultados pouco satisfatórios. O modelo WSGG apresentou uma boa estabilidade, justificando sua implementação em meios com ou sem a presença de fuligem.

Com as avaliações apresentadas, constata-se que os modelos podem apresentar alguns bons resultados para casos particulares. Por exemplo, para o perfil de temperatura da Equação 4.1, em um meio com fração volumétrica de fuligem igual a 1×10^{-6} e meio com 20% H₂O e 10% CO₂ o modelo SLW apresenta o melhor resultado do termo fonte radiante dentre os demais modelos, com uma média de erro de 4,57%. Entretanto é importante tomar uma relação geral para poder concluir em termos mais abrangentes qual o modelo espectral melhor indicado para determinada situação de engenharia. Em uma forma de ilustração, a Tabela 4.1 mostra, para as situações apresentadas, qual é o melhor resultado tanto para o erro médio

quanto para o erro máximo, onde é verificada a grande predominância do modelo WSGG em situações envolvendo misturas. Mesmo nos casos em que outros modelos conduziram a melhores resultados (por exemplo, para os casos de uma única espécie química), o modelo WSGG ainda apresentou erros compatíveis, indicando que, de um modo geral, é o método mais recomendado de solução.

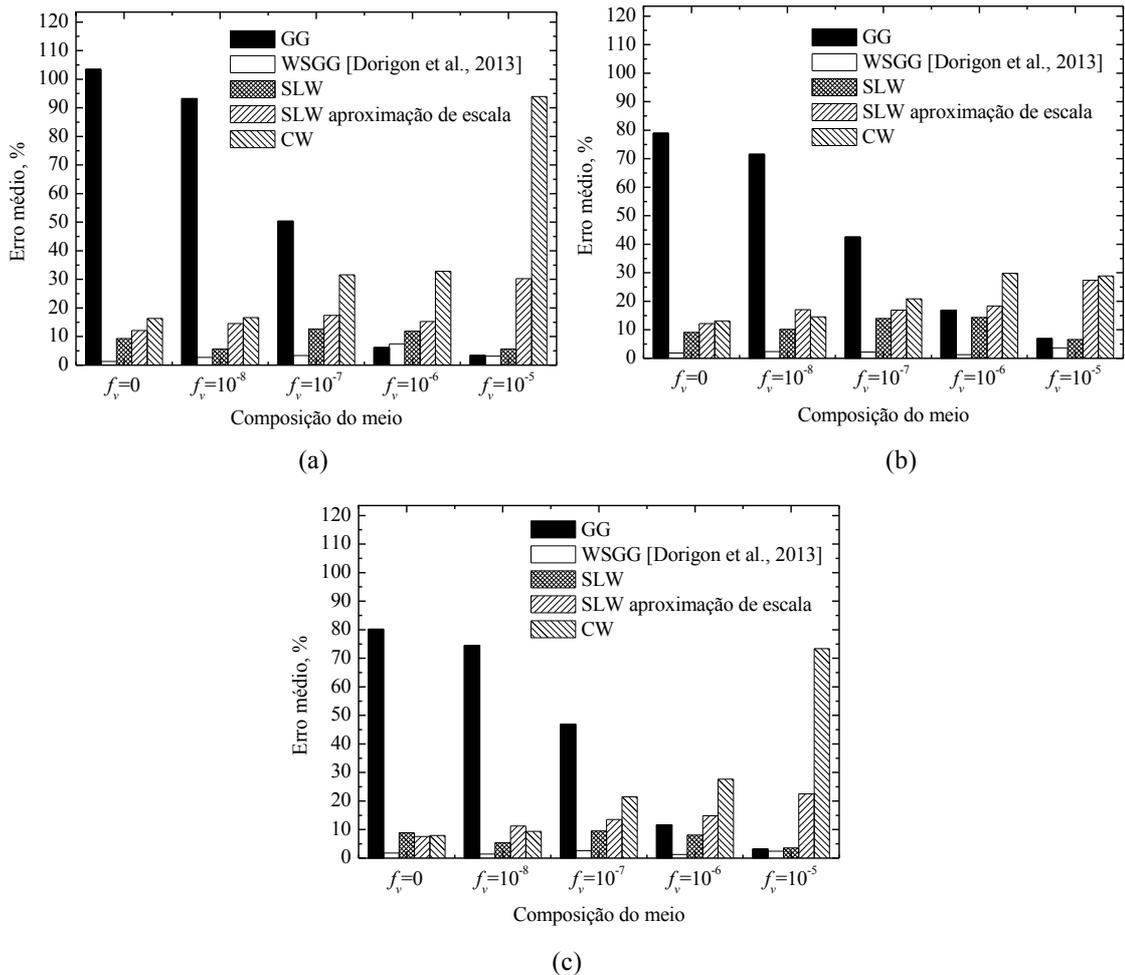


Figura 4.21 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante. Meio homogêneo composto por 10% de CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L=1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

Tabela 4.1 - Indicação do modelo espectral que apresenta o melhor resultado para o termo fonte radiante e fluxo de calor radiante. Distância entre as placas planas de 1,0 m. Meio participante com concentração homogênea e pressão total de 1,0 atm.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$	$\delta_{\text{médio}}$	$\zeta_{\text{máximo}}$	$\zeta_{\text{médio}}$
	10% CO ₂			
Equação 4.1	CW	CW	SLW	WSGG
Equação 4.2	SLW	SLW	WSGG	SLW
Equação 4.3	CW	CW	SLW	SLW
20% H ₂ O				
Equação 4.1	WSGG	WSGG	SLW	SLW
Equação 4.2	WSGG	WSGG	SLW	SLW
Equação 4.3	SLW	SLW	SLW	SLW
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.2	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.3	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.2	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.3	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.2	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.3	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	SLW	SLW	WSGG	WSGG
Equação 4.2	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.3	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.2	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG
Equação 4.3	WSGG	WSGG	WSGG	WSGG

Para as soluções do meio com concentração homogênea para distância de 0,2 m entre as placas planas, os resultados são apresentados na Tabela 4.2. É possível então verificar a diferença entre as situações onde as placas planas estão distantes 1,0 m e 0,2 m, para cada

perfil de temperatura proposto. Nas soluções, é possível verificar que existem variações nos resultados mudando-se a geometria, mas, de uma maneira geral as alterações não são significativas. Para as soluções do meio com concentração não homogênea os resultados são apresentados na Tabela 4.3, onde é possível verificar a diferença entre as situações onde as placas planas estão distantes 1,0 m e 0,2 m, para cada perfil de temperatura proposto, apresentando alterações na ordem dos erros, caso comparados com Tabela 4.2.

Tabela 4.2 - Comparação entre os erros médios do termo fonte radiante em meio homogêneo. Distância entre as placas planas de 1,0 e 0,2 m. Valores em porcentagem.

Equação da Temperatura	GG		WSGG		SLW		SLW (aproximação de escala)		CW	
	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m
10% CO ₂										
4.1	303,29	95,31	4,52	5,75	30,72	14,70	3,07	1,40	2,16	2,80
4.2	230,99	62,31	6,68	5,30	23,00	19,40	4,13	1,98	5,35	8,30
4.3	266,63	103,93	4,49	4,46	27,84	13,89	2,61	1,21	1,92	2,55
20% H ₂ O										
4.1	51,00	21,45	2,34	3,74	9,22	18,49	2,81	5,33	4,39	11,31
4.2	45,73	18,99	2,55	9,18	13,59	32,53	4,33	7,13	8,79	15,79
4.3	48,97	29,84	2,81	3,02	8,28	19,15	2,08	3,93	4,56	10,80
10% CO ₂ + 20% H ₂ O										
4.1	114,34	58,21	1,94	3,87	12,51	14,00	12,03	16,66	6,76	6,43
4.2	109,32	45,58	3,56	4,15	14,29	20,20	17,30	23,55	9,32	8,87
4.3	101,40	62,59	1,66	3,62	11,60	13,80	10,51	15,34	6,85	6,18
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + $f_v=1 \times 10^{-5}$										
4.1	3,23	3,61	2,95	1,48	3,40	6,06	18,49	8,53	35,51	20,91
4.2	3,62	2,25	1,76	1,95	4,92	6,65	13,82	12,21	14,63	25,76
4.3	2,38	3,24	1,36	1,05	2,26	5,04	11,84	7,86	3,60	18,31

Soluções envolvendo temperatura não uniforme e meio participante com concentração não homogênea são apresentadas na Figura 4.22 para o termo fonte radiante e na Figura 4.23

para o fluxo de calor radiante. As primeiras análises são feitas com placas planas distantes em 1,0 m, sendo que a não homogeneidade do meio possui relações definidas pelas Equações 4.4-4.6, onde, a Equação 4.1 relaciona-se com a Equação 4.4, a Equação 4.2 relaciona-se com a Equação 4.5 e a Equação 4.3 com a Equação 4.6, de forma que o ponto de maior temperatura também é o ponto de maior concentração do meio participante.

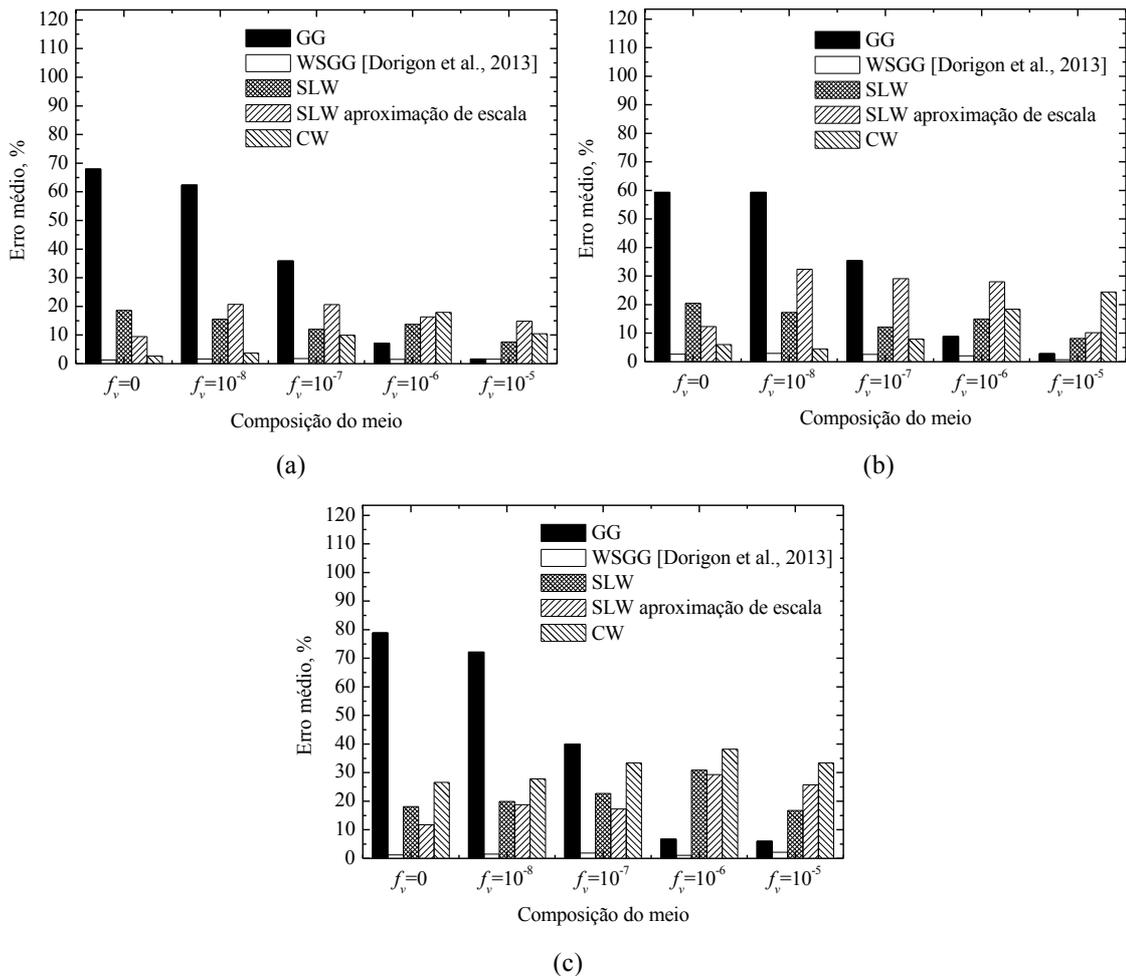


Figura 4.22 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante. Meio não homogêneo composto por 10% de CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L = 1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

Com um meio participante onde a concentração das espécies químicas não é homogênea, muitas vezes espera-se certa dificuldade de solução para modelos onde o sistema de equações não prevê flexibilidade de alteração do valor dos coeficientes de absorção durante a simulação. Nas relações que foram propostas, a concentração parte de zero na

parede até um máximo, sendo que esta ausência de meio ao longo da geometria pode resultar em menores erros computados. O que se observa pelos resultados é que modelos que já traziam bons resultados para os casos homogêneos continuam sem alterações significativas nos resultados, como é o caso do WSGG e do SLW aproximação de escala, no caso de meio gasoso. O modelo GG, que apresenta uma boa estabilidade numérica apesar dos erros inerentes de sua modelagem também mantém a relação estabelecida, diminuindo o erro com o aumento na concentração de meio particulado. O modelo SLW canônico e o modelo CW apresentam variações aleatórias com relação às simulações estabelecidas.

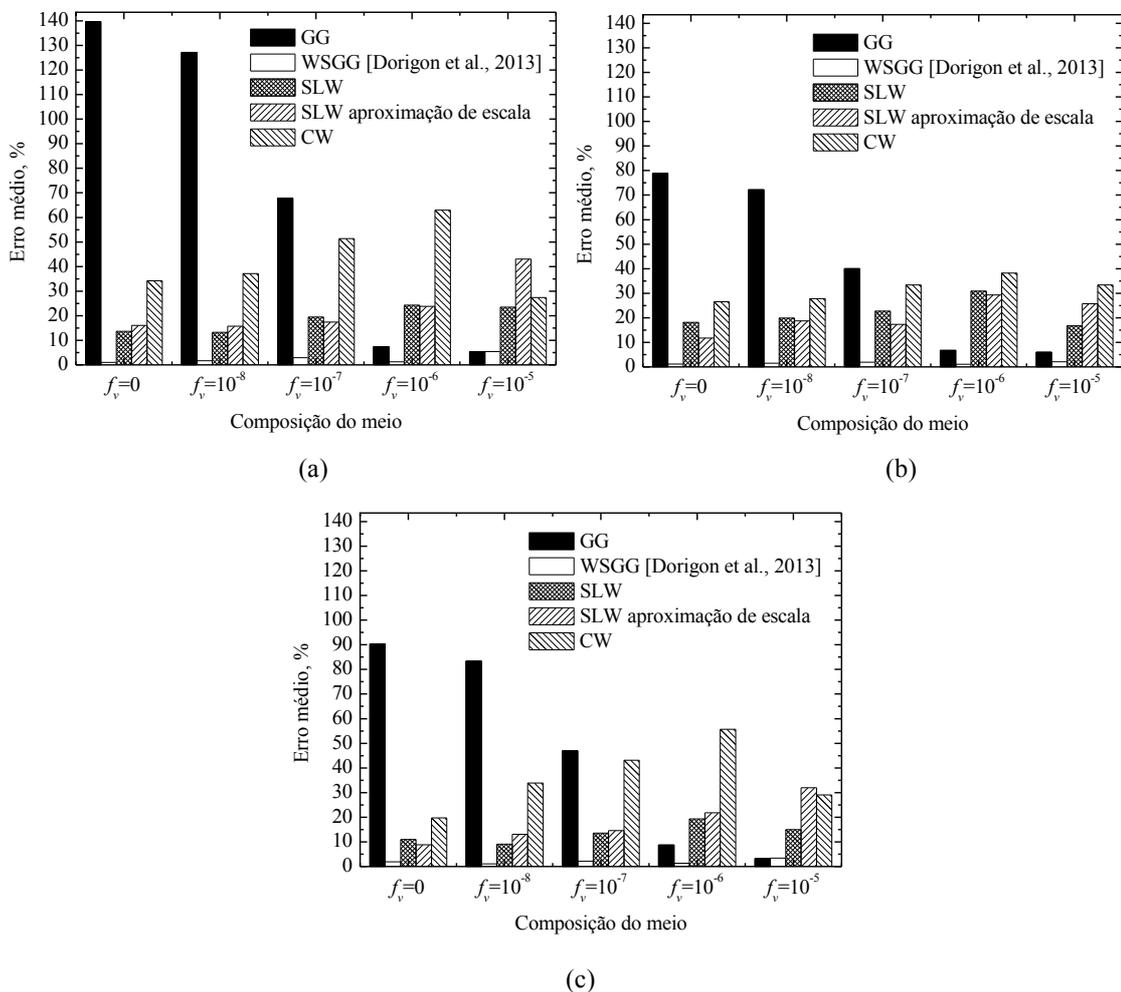


Figura 4.23 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante. Meio não homogêneo composto por 10% de CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. $L = 1,0$ m. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

Tabela 4.3 - Comparação entre os erros médios do termo fonte radiante em meio não homogêneo. Distância entre as placas planas de 1,0 e 0,2 m. Valores em porcentagem.

Equação da Temperatura	GG		WSGG		SLW		SLW (aproximação de escala)		CW	
	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m	1,0 m	0,2 m
	10% CO ₂									
4.1	192,70	61,97	1,83	3,10	29,17	11,63	2,10	0,87	3,04	2,68
4.2	131,86	45,12	4,20	2,73	21,26	14,89	1,59	1,25	5,25	13,17
4.3	193,01	70,36	2,43	2,96	27,03	11,83	2,03	0,88	2,32	2,42
	20% H ₂ O									
4.1	23,14	10,95	2,02	4,44	15,23	22,96	2,07	3,46	7,04	6,07
4.2	20,23	10,05	2,17	5,75	21,47	36,42	3,03	4,22	6,35	5,86
4.3	27,30	14,70	2,12	3,65	13,40	23,88	1,66	3,05	5,55	3,55
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O									
4.1	67,98	32,72	1,27	3,18	18,64	16,83	9,45	11,15	2,65	2,98
4.2	59,33	25,62	2,65	3,42	20,50	22,75	12,36	18,58	6,04	10,02
4.3	73,63	38,78	1,04	3,34	16,44	16,40	9,29	12,02	2,03	3,54
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O + f _v =1×10 ⁻⁵									
4.1	1,62	3,34	1,59	1,01	7,58	14,13	14,82	12,19	10,43	20,13
4.2	2,89	2,25	0,73	1,33	8,18	17,42	10,16	22,54	24,47	23,30
4.3	1,72	3,04	0,97	0,93	4,08	10,31	11,07	9,78	10,49	19,86

Após a análise dos resultados, é possível concluir que, para a solução de problemas envolvendo misturas, o modelo WSGG mostra-se uma boa opção, onde a implementação é simples, apresenta resultados rápidos e garante a solução tanto para situações envolvendo apenas gases quanto gases e particulado, abrangendo assim todas as regiões da chama em um processo de combustão. Para um meio composto apenas por um único gás, como é o caso da radiação atmosférica, soluções envolvendo o modelo SLW com a aproximação de escala é o

mais indicado, pois garante a solução tanto para o termo fonte radiante quanto para o fluxo de calor radiante.

Nos Apêndices são apresentados resultados demonstrando a variação dos erros tanto médios quanto máximos de acordo com as variações de concentração de fuligem, com casos envolvendo a distância entre as placas planas de 1,0 m e 0,2 m, além de meio participante com concentração homogênea e não homogênea. O Apêndice A apresenta os resultados para o modelo GG, o Apêndice B apresenta os resultados para o modelo WSGG, o Apêndice C apresenta os resultados para o modelo SLW, o Apêndice D apresenta os resultados para o modelo SLW com aproximação de escala, o Apêndice E apresenta os resultados para o modelo CW, o Apêndice F apresenta os resultados para a nova proposição do WSGG e o Apêndice G apresenta resultados do modelo WSGG para misturas utilizando o método direto. Contabilizando todos os Apêndices, são apresentados um total de 2160 resultados em 540 simulações. Os resultados nas tabelas corroboram as conclusões apresentadas neste capítulo, apresentadas para um número mais restrito de simulações.

4.9 Análise Entre as Soluções WSGG

Como forma de aprimorar o modelo WSGG, que mostrou ser atualmente o modelo mais confiável para a modelagem da radiação em problemas de combustão, os quais envolvem mistura de meio participante contendo H_2O , CO_2 e fuligem, são apresentados nesta seção resultados considerando a implementação convencional (com mistura em uma dada razão, apresentadas previamente por Dorigon et al., 2013) e a implementação contendo as espécies químicas de forma individual, tanto para o método direto quanto para o método de mistura proposto. Os resultados são apresentados nas Figuras 4.24 e 4.25, para o termo fonte radiante e para o fluxo de calor radiante, respectivamente, na configuração de 1,0 m entre as placas planas, cujo meio participante apresenta 10% CO_2 , 20% H_2O com concentração homogênea, inicialmente sem a presença de fuligem.

Os resultados apresentados na Figura 4.24, para o termo fonte radiante, apresentam uma boa aproximação em todas as situações quando comparadas com a integração LBL, entretanto os melhores resultados são os apresentados pela método convencional, que, sendo obtido diretamente da mistura das espécies químicas, não sofre nenhuma aproximação referente à implementação de misturas. Por outro lado, deve-se observar que essa abordagem fica restrita a situações em que a razão entre as concentrações de H_2O e CO_2 igual a 2,0. As

principais diferenças entre os modelos ocorrem em regiões próximas das paredes ou em locais pontuais onde aparecem os pontos de máxima temperatura. Com a Figura 4.25, é possível observar maiores diferenças nos resultados para os métodos de mistura (direto e proposto), em que, para os resultados com perfil de temperatura dado pela Equação 4.3, o erro máximo é de 9,08% para a nova proposta e 9,70% para o método direto, enquanto o mesmo é de 3,38% para o WSGG convencional.

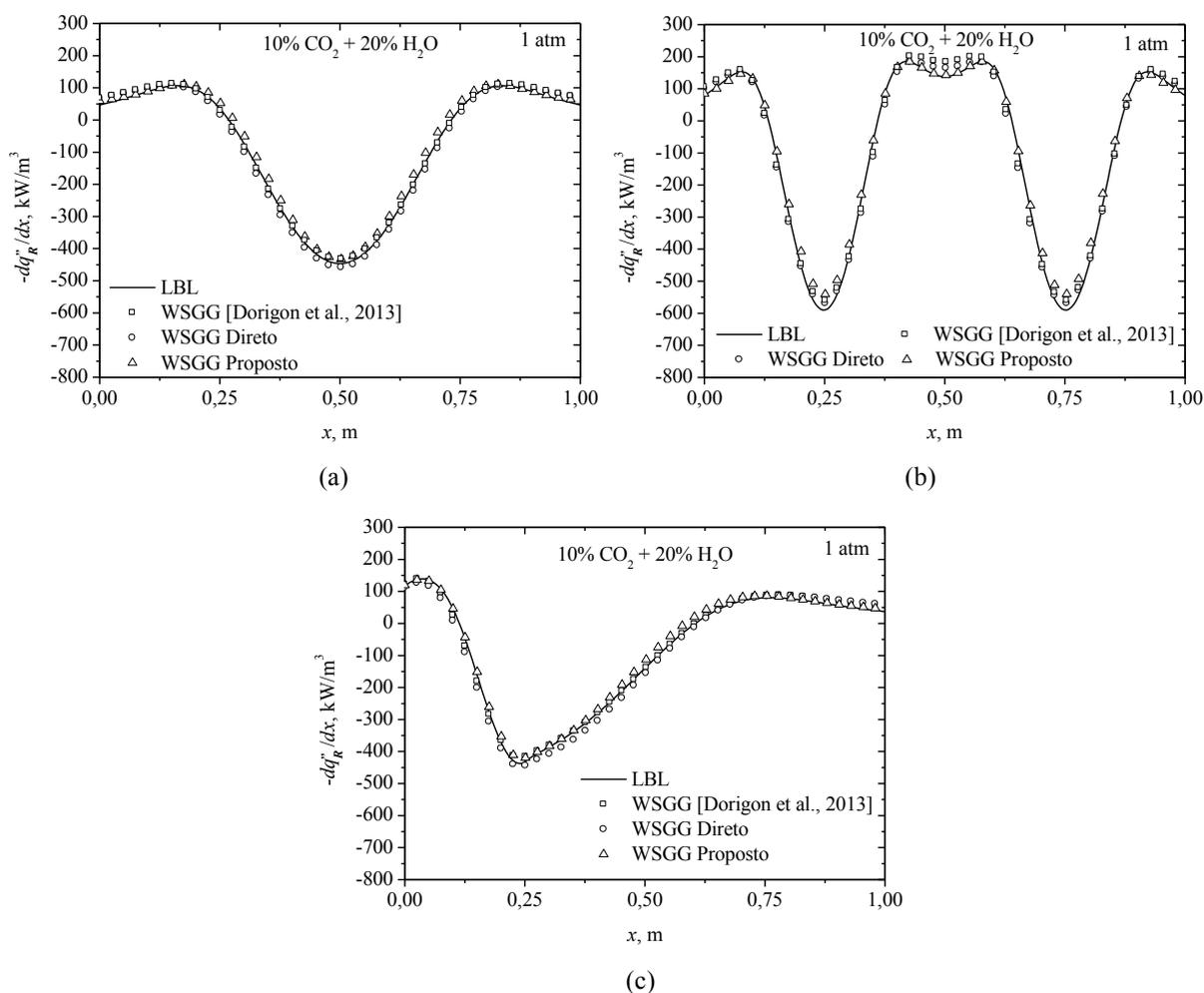


Figura 4.24 - Termo fonte radiante para as diversas implementações do modelo WSGG comparando com a solução LBL. Meio participante com concentração homogênea; mistura de 10% de CO_2 e 20% de H_2O . (a) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.3.

Com o intuito de comparar as diversas implementações para o modelo WSGG, são apresentados resultados em relação ao erro médio na Figura 4.26, para o termo fonte radiante,

com meio participante composto por 10% CO₂, 20% H₂O e fração volumétrica de fuligem aumentando progressivamente de 0 a 1×10^{-5} . Os resultados para o termo fonte radiante mostram que a acurácia no modelo é sensível ao perfil de temperatura. Em alguns casos, como no apresentado na Figura 4.26b, para a concentração volumétrica de fuligem de 1×10^{-6} , o WSGG convencional apresenta um resultado pouco satisfatório, sendo que uma implementação com espécies químicas individuais apresenta melhores soluções.

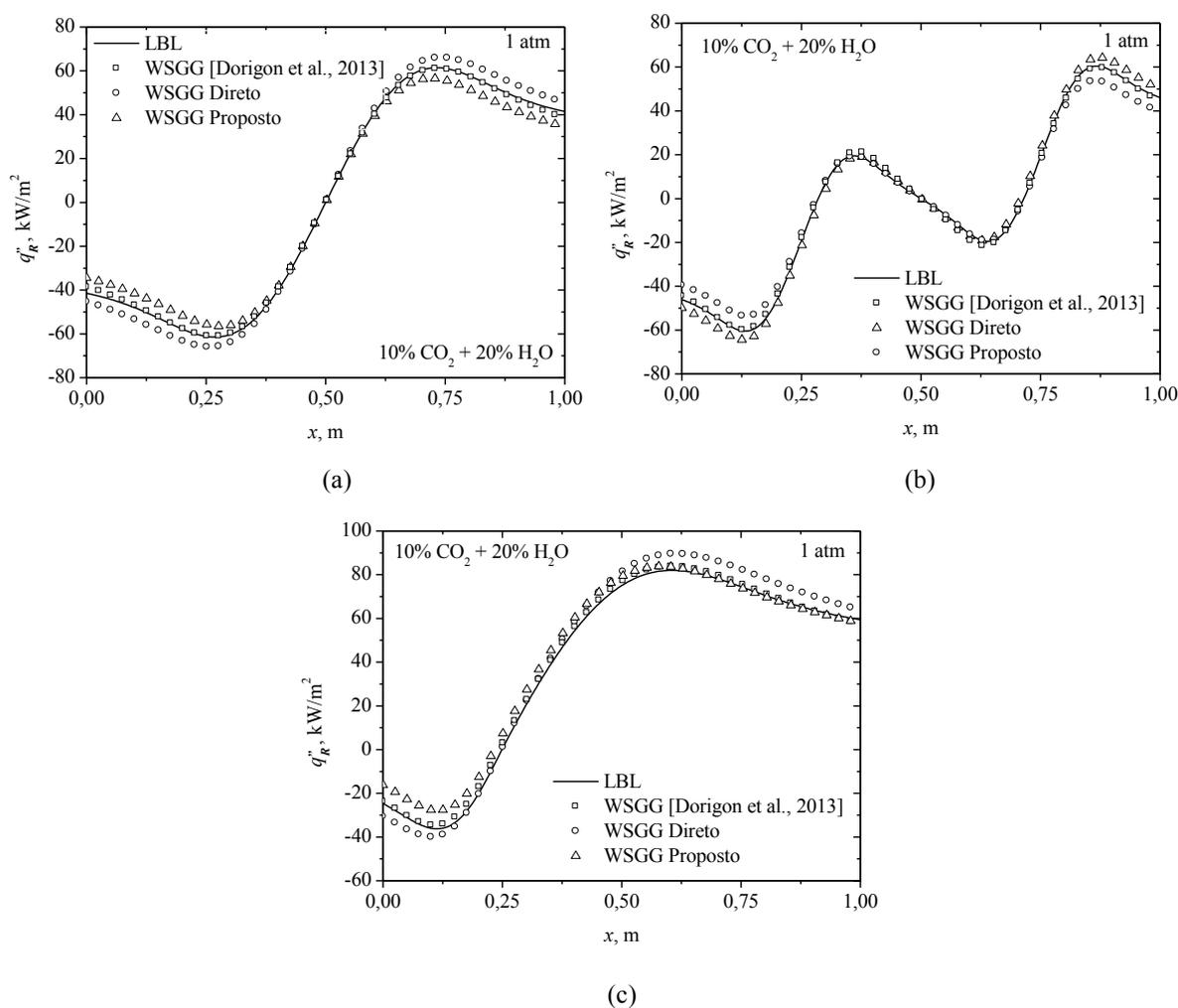


Figura 4.25 – Fluxo de calor radiante para as diversas implementações do modelo WSGG comparando com a solução LBL. Meio participante com concentração homogênea; mistura de 10% de CO₂ e 20% de H₂O. (a) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura dado pela Equação 4.3.

Não é possível dizer que as correlações implementadas pela forma convencional do modelo não sejam recomendadas, pois tecnicamente o método de mistura agrega erros que

não existiam anteriormente. Nenhum resultado apresentou erros médios superiores a 8%, onde o maior erro médio foi de 7,61%. Eliminando-se os casos onde a fração volumétrica de fuligem é de 1×10^{-6} , um valor relativamente elevado, nenhum resultado apresentou erros médios superiores a 4%, em que o maior erro médio foi de 3,92%, indicando bons resultados para o modelo em termos gerais.

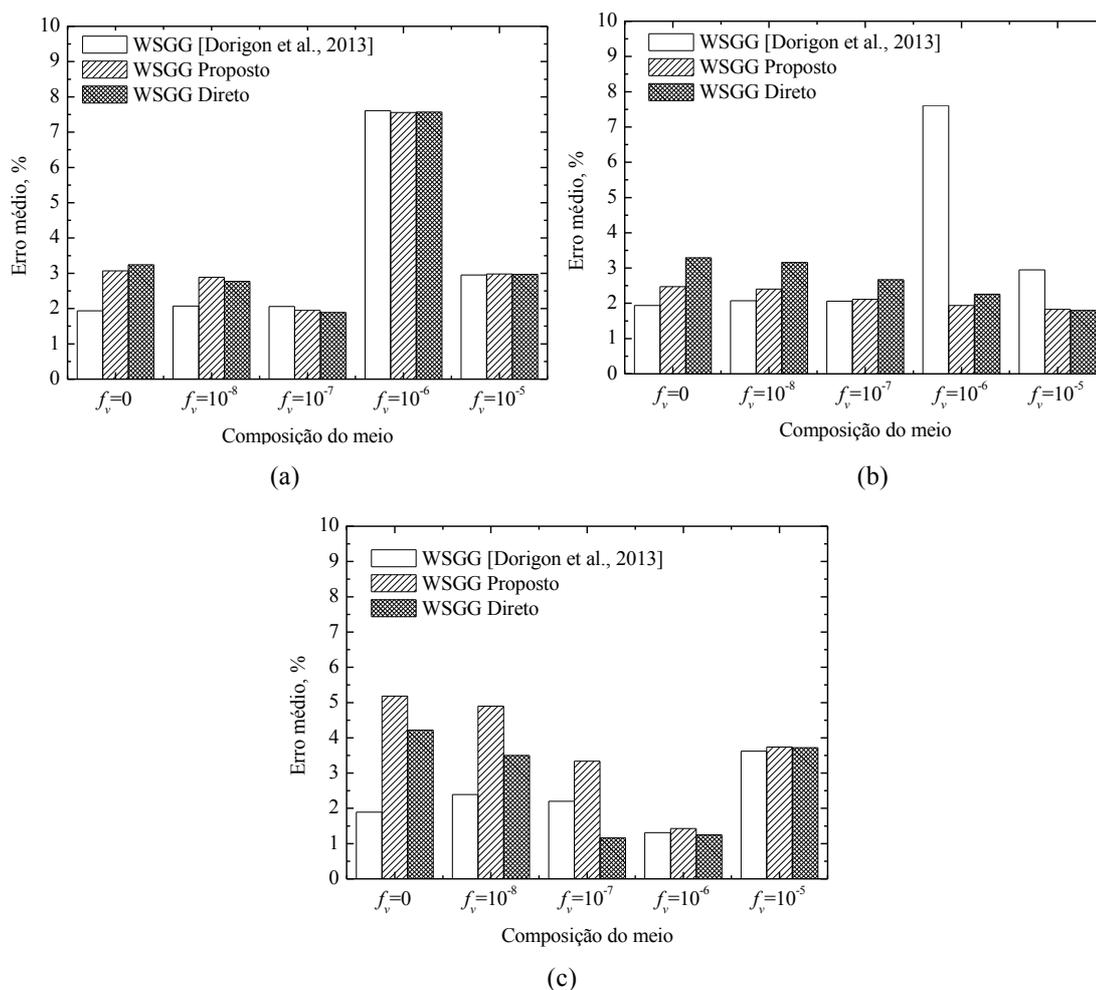


Figura 4.26 – Avaliação do erro médio para o termo fonte radiante no modelo WSGG. Meio composto por 10% e CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. (a) Perfil de temperatura conforme Equação 4.1. (b) Perfil de temperatura conforme Equação 4.2. (c) Perfil de temperatura conforme Equação 4.3.

Os resultados para o fluxo de calor radiante são apresentados na Figura 4.27. Como se observa, a nova proposta do modelo WSGG conduz a erros superiores aos demais métodos de implementação, em situações com pouca ou nenhuma presença de fuligem. Entretanto, em todas as situações os erros médios foram novamente menores que 8%, onde o maior erro

médio foi de 7,46%. Para a solução do fluxo de calor radiante, os erros apresentam valores mais elevados que na solução do divergente, salvo algumas exceções envolvendo os perfis de temperatura dados pela Equação 4.2 e 4.3, como o erro médio de 1,16% para solução envolvendo a nova proposta [Figura 4.27(c)]. Contudo, a nova proposta habilita mudanças da razão das espécies químicas participantes ao longo do meio, além de possuir um tempo computacional muito abaixo da implementação pelo método direto, com soluções até cinco vezes mais rápidas do que o método direto em situações unidimensionais. Assim, o moderado aumento nos erros observados não compromete sua implementação, principalmente em simulações de processos de combustão, em que a razão entre as espécies participantes não é constante, conforme pode ser observado na Figura 4.28(b), cujos estudos foram realizados por Centeno et al., 2012.

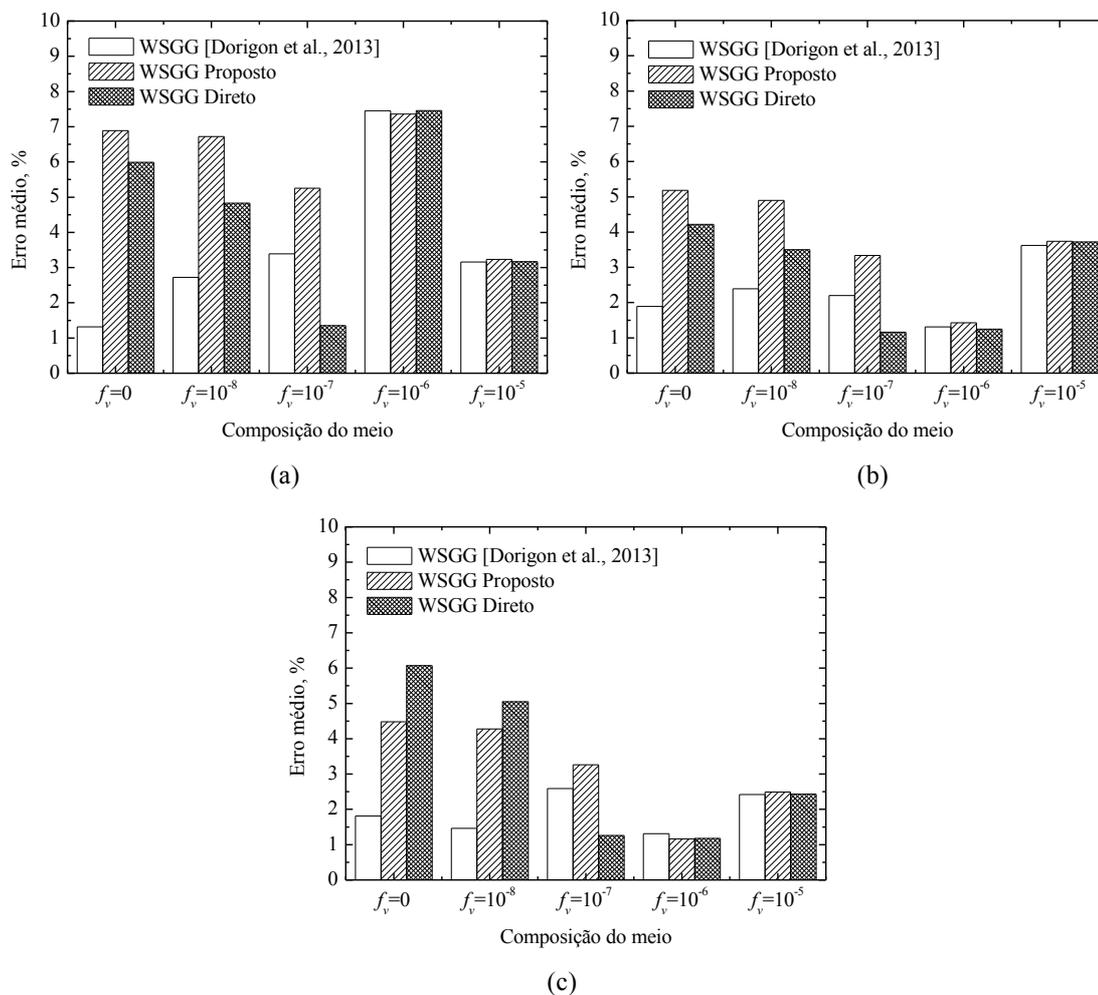


Figura 4.27 – Avaliação do erro médio para o fluxo de calor radiante utilizando o modelo WSGG. Meio composto por 10% e CO_2 e 20% de H_2O , com concentração de fuligem aumentando gradativamente. Perfil de temperatura conforme Equação 6.1.

De forma a ilustrar a estabilidade do modelo WSGG frente a situações de concentração não homogênea do meio participante, a Tabela 4.4 apresenta diferentes situações para uma configuração onde as placas planas estão distantes em 1,0 m e 0,2 m. O meio é composto por uma concentração máxima de 10% CO₂, 20% H₂O e fuligem com fração volumétrica de 1×10^{-5} . Na relação homogênea a concentração das espécies químicas é constante ao longo da geometria, sendo que no caso não homogêneo a concentração é de acordo com as Equações 4.4, 4.5 e 4.6. Como é possível perceber, são mantidos bons resultados em todas as situações, onde o maior erro é de 4,15% e o menor de 0,72%. Apesar das diferenças apresentadas, os modelos espectrais não possuem grande dependência em relação a variações na concentração do meio participante, sendo que a principal dificuldade na modelagem espectral está nas variações de temperatura.

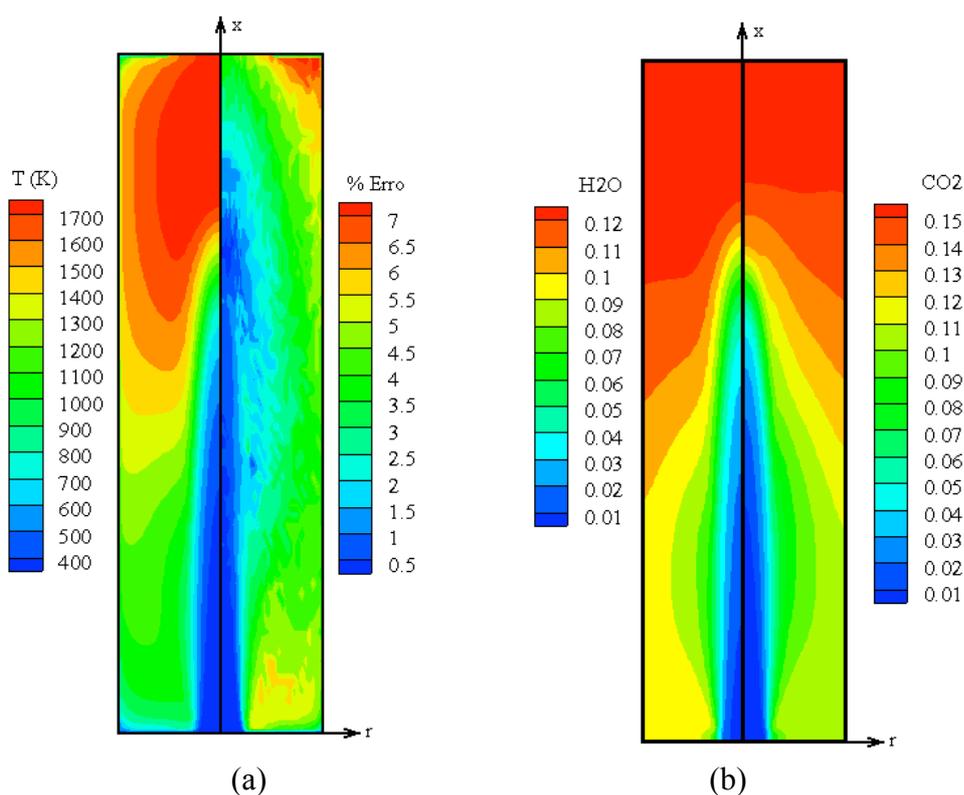


Figura 4.28 – (a) Campo de temperatura e seu erro relativo para o modelo WSGG convencional. (b) Fração mássica do H₂O e CO₂. [Centeno et al., 2012].

Tabela 4.4 - Comparação entre os erros médios do termo fonte radiante em meio homogêneo e não homogêneo. Distância entre as placas planas de 0,2 e 1,0 m. Valores em porcentagem.

Equação da Temperatura	WSGG (convencional)		WSGG (direto)		WSGG (proposto)	
	1,0 m (homogêneo)	1,0 m (não homogêneo)	1,0 m (homogêneo)	1,0 m (não homogêneo)	1,0 m (homogêneo)	1,0 m (não homogêneo)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O					
4.1	1,94	1,27	3,24	2,21	3,07	2,48
4.2	3,56	2,65	3,29	2,67	2,47	3,22
4.3	1,66	1,04	3,92	2,75	2,18	1,77
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O + $f_v=1 \times 10^{-5}$					
4.1	2,95	1,59	2,97	1,63	2,98	1,62
4.2	1,76	0,73	1,80	0,77	1,83	0,72
4.3	1,36	0,97	1,36	0,97	1,37	0,98
	0,2 m (homogêneo)	0,2 m (não homogêneo)	0,2 m (homogêneo)	0,2 m (não homogêneo)	0,2 m (homogêneo)	0,2 m (não homogêneo)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O					
4.1	3,87	3,18	2,53	1,92	4,19	3,66
4.2	4,15	3,42	3,41	1,82	3,06	3,02
4.3	3,62	3,34	2,30	2,11	4,14	3,34
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O + $f_v=1 \times 10^{-5}$					
4.1	1,48	1,01	1,47	1,01	1,42	1,00
4.2	1,95	1,33	1,92	1,27	1,86	1,27
4.3	1,05	0,93	1,05	0,93	1,03	0,92

4.10 Tempos Computacionais

A Tabela 4.5 apresenta a razão entre os tempos computacionais dos diferentes modelos espectrais, normalizados com respeito ao tempo computacional exigido pelo modelo de gás cinza (GG), o de solução mais rápida dentre todos. Entre os modelos comparados na

tabela, o mais eficiente é a implementação do modelo WSGG proposta, exigindo apenas 1,2 vezes o tempo computacional do modelo GG, mas apresentando uma qualidade de resultados muito superior para as condições testadas, incluindo situações envolvendo meios não homogêneos e quantidades variáveis de fuligem. O modelo WSGG direto leva em conta trocas radiantes entre todos os gases cinza fracionais das espécies químicas do meio participante, estendendo a matriz de solução, e, portanto, conduz a um tempo computacional aproximadamente cinco vezes superior ao WSGG proposto, ou 6,5 vezes o tempo computacional do modelo GG. Em seguida, aparece o modelo SLW (aproximação de escala), que exige um tempo 415 superior, e finalmente a integração LBL, com tempo computacional mais de 2000 vezes superior ao GG. É importante observar que a questão do tempo computacional pode se tornar muito mais crítica em cálculos em que a radiação térmica é acoplada a outros mecanismos de transporte de energia e massa presentes nas equações governantes, em geometrias 2D ou 3D, como ocorre na modelagem de combustão. Nesses problemas, a rotina de radiação térmica deve ser acionada um grande número vezes, o que amplificaria ainda mais o tempo computacional.

Tabela 4.5 - Tempos computacionais para os modelos espectrais.

Método	Tempo computacional relativo ao modelo GG
WSGG (convencional)	1,2 vezes
WSGG (proposto)	1,2 vezes
WSGG (direto)	6,5 vezes
SLW (aproximação de escala)	415 vezes
LBL	2147,5 vezes

5 CONCLUSÕES

O crescimento da demanda por geração de energia tem estabelecido uma forte necessidade do desenvolvimento científico para o aumento da eficiência energética. Na geração de eletricidade utilizando processos térmicos, temos como principal fonte de calor a combustão de gás natural, óleos combustíveis e carvão mineral. Nestes processos, a radiação térmica pode ser o mecanismo dominante de transferência de calor, com impacto direto no campo de temperatura, que por sua vez influencia os diversos parâmetros de eficiência do processo.

Diversos métodos de cálculo para a radiação térmica estão disponíveis na literatura, tanto para integração espacial quanto para a modelagem espectral. Entre os métodos de integração espacial, o método das ordenadas discretas é um dos métodos mais empregados em soluções de transferência radiante, devido à sua estabilidade, acurácia e flexibilidade para incorporar com facilidades os diferentes modelos de integração espectral. Por essas razões, foi o método escolhido neste trabalho. A solução do problema espectral foi realizada através dos principais modelos disponíveis na literatura: GG (gás cinza), WSGG (soma-ponderada-dos-gases-cinza), SLW (soma-ponderada-dos-gases-cinza baseado em linhas espectrais), CW (número de onda cumulativo) e soluções LBL (linha-por-linha).

O *benchmark* para a solução espectral é a integração LBL, que resolve exatamente a radiação através de todo o espectro, a menos de aproximações envolvidas na própria integração numérica, por considerar todas as linhas de absorção. Por outro lado, cálculos LBL requerem o domínio do uso do banco de dados espectral (HITRAN ou HITEMP), uma tarefa não trivial. Além disso, são soluções com elevada demanda computacional, sendo limitadas atualmente a casos unidimensionais. Para casos bidimensionais ou tridimensionais, principalmente quando a radiação térmica deve ser resolvida acoplada a outros mecanismos, a solução LBL é inviável. Por ser a solução exata, a integração LBL é utilizado para verificar a acurácia dos modelos espectrais.

Modelos para a solução espectral ainda estão em constante desenvolvimento, visto que, apesar dos avanços nas últimas décadas, ainda podem resultar em erros consideráveis. Além disso, os modelos mais avançados, como o SLW ou o CW, são de difícil implementação. Soluções através do método GG apresentam, para determinados casos, resultados com erros consideráveis, o que compromete a solução final. A implementação

através do método WSGG por sua vez é teoricamente dependente de razões fixas do meio participante, o que nem sempre acontece.

Como forma de quantificar o erro apresentado pelos principais modelos espectrais disponíveis na literatura, é necessário testar diversos casos, envolvendo variações de concentração e temperatura em misturas de gases e particulados, para assim localizar em quais condições a solução é comprometida, e, principalmente, em quais condições é possível utilizar um modelo espectral menos detalhado. Para a avaliação, perfis de temperatura condizentes com a realidade são necessários, visto que a utilização de temperatura uniforme ou variações muito tênues podem gerar resultados satisfatórios para os modelos, mas que podem resultar em erros consideráveis em processos com gradientes elevados de temperatura e concentrações das espécies participantes.

Em relação à geometria do problema, também deve-se tomar certas precauções, visto que, para problemas envolvendo uma distância muito pequena entre as superfícies, a RTE apresenta soluções somente em termos da emissão. Para casos envolvendo uma distância muito elevada entre as superfícies, a solução se aproxima à da emissão do corpo negro, onde isto ocorre devido à espessura óptica elevada. Para estes casos, onde a espessura óptica é elevada, mesmo métodos como o GG tendem a apresentar bons resultados.

Para o presente trabalho, é considerada a presença de H_2O , CO_2 e fuligem, sendo escolhidos por serem produtos típicos nos processos de combustão. Para as espécies químicas gasosas do meio participante, a determinação das absorções é fortemente dependente da variação de concentração, temperatura e número de onda, por isso a escolha correta da modelagem espectral é de extrema importância. Para partículas sólidas, como a fuligem, não ocorrem variações no valor da absorção com a variação da temperatura, apenas com a variação da concentração, e a variação com o comprimento de onda é linear. Para baixa concentração de gases e partículas muito pequenas a solução da radiação térmica é feita apenas com os campos de absorção e emissão, sendo o fenômeno do espalhamento desconsiderado.

Os resultados apresentados pela modelagem com o modelo de gás cinza mostram que a solução é superestimada na solução do coeficiente de absorção para o meio gasoso, resultando em valores muito mais elevados para a intensidade radiante, comparando com os resultados LBL. Com a solução da intensidade apresentando valores muito superiores dos valores *benchmark*, o modelo GG não é indicado quando se deseja boa precisão na solução da radiação onde o meio participante é composto unicamente espécies químicas gasosas. A

exceção é na solução de um meio participante com concentrações consideráveis de particulado, onde o modelo GG é recomendado por apresentar bons resultados e uma forma simples e rápida de solução.

Os testes executados no modelo WSGG mostram um bom desempenho em qualquer situação, inclusive em meios não homogêneos, o que comprova a estabilidade do método e a possibilidade de executar simulações para casos não previstos teoricamente (situações de meio participante não homogêneo) mantendo a precisão do mesmo. Além disso, pelo método de misturas desenvolvido no presente trabalho, cujos resultados são muito próximos das relações originais, é possível colocar o modelo WSGG como o mais indicado para processos de combustão. Uma ressalva é feita quando utilizada a solução do modelo WSGG com união de misturas, tanto em relação ao método direto quanto à nova proposta, onde em alguns casos o resultado para o fluxo de calor radiante não apresenta a mesma acurácia da solução convencional do modelo.

Resultados mostram que a solução SLW é dependente das considerações de solução da função ALB, em que pode ser utilizada a consideração da aproximação de escala como forma de aperfeiçoar soluções não isotérmicas e não homogêneas. A solução SLW se aproxima da solução LBL apenas para casos onde é considerada a aproximação de escala e para soluções com uma única espécie química. As soluções via SLW se afastam dos resultados *benchmark* para casos envolvendo misturas (para ambas as soluções envolvendo a forma canônica e por aproximação de escala). Meios isotérmicos apresentam soluções mais satisfatórias que os meios não isotérmicos, indicando que o modelo perde acurácia em situações que apresentam variação de temperatura. Desta forma, o modelo SLW em termos gerais não apresentou um bom desempenho nos testes realizados, ficando apenas com a vantagem de poder ser modelado para espécies químicas individuais, onde em alguns casos o resultado apresentado é melhor que o dos demais modelos apresentados. O modelo CW, da mesma forma que o SLW, também não apresentou um bom comportamento para os casos apresentados e, devido aos diversos problemas citados, incluindo principalmente o fato de ser um modelo não conservativo, não se apresentou como uma opção recomendável para a maior parte dos problemas resolvidos.

A solução da transferência radiante para a fuligem não exige o mesmo nível de detalhamento espectral aplicado nos gases, sendo que o espectro da fuligem é uma função linear, baseada em equacionamentos empíricos. Problemas na solução de gás e particulado ficam a cargo de relações para a combinação de seus efeitos, visto a grande diferença das

propriedades espectrais entre ambos. A necessidade da aplicação do método de acoplamento de mistura torna necessária a aplicação da mesma modelagem espectral no gás e na fuligem.

Um importante fato na modelagem do meio participante é que diferentes bancos de dados podem resultar em diferentes resultados para o fluxo radiante e para o termo fonte radiante. Dessa maneira, é sempre importante utilizar um banco de dados atualizado, ou, de certa forma, precaver-se de que, ao comparar diversos resultados, é necessário assegurar a utilização do mesmo banco de dados. Como observado, a tarefa de avaliar modelos espectrais envolve diversos fatores que devem ser levados em conta. O fato de que modelos como o SLW são apresentados com excelentes precisões em outras literaturas e no presente trabalho apresenta resultados não tão satisfatórios, justifica-se principalmente pela utilização de perfis de temperatura arbitrários.

Como conclusão final é possível estabelecer que, para casos envolvendo um único gás, como, por exemplo, soluções atmosféricas ou particulares de laboratório, o modelo SLW é indicado desde que resolvido utilizando a aproximação de escala, mas mesmo nesses casos o WSGG apresenta resultados competitivos em termos de acurácia e eficiência computacional. Para situações de combustão, envolvendo misturas de diversos gases e particulados, os modelos mais avançados ainda não são capazes de apresentar boas soluções, ficando a recomendação de utilização do modelo WSGG. Em situações onde existe grande concentração de meio particulado, como combustão em leito fluidizado, pode ser recomendada a utilização do modelo GG. A solução envolvendo a nova proposta de mistura para o modelo WSGG é uma boa alternativa, pois pode ser resolvido com a independência das razões de concentração dos gases e os resultados apresentam boa acurácia, sendo o tempo computacional equivalente ao do WSGG convencional.

5.1 Proposta de Continuidade

No presente trabalho foi demonstrada a possibilidade de obtenção de resultados para diversos métodos de modelagem espectral para o cálculo envolvendo o meio participante, gasoso e particulado, na determinação da radiação térmica. Nos cálculos envolvendo transferência de calor por radiação, algumas dessas técnicas de modelagem espectral ainda são muito recentes, possibilitando inúmeras sugestões para trabalhos futuros.

Tendo em vista a eficiência do modelo WSGG, apresentada no presente trabalho, as sugestões para futuras implementações são:

- Resolver o modelo WSGG utilizando parede cinza e meio com espalhamento, visto que as soluções atuais são implementadas para parede com superfície negra e o espalhamento não é previsto no modelo WSGG;

- Estender as correlações para os gases CO e CH₄, combinando com as correlações apresentadas do CO₂, H₂O e fuligem, com o intuito de ampliar o detalhamento nas simulações de processos de combustão, aplicando a nova metodologia proposta para misturas de forma a verificar a viabilidade de solução com mais de duas espécies químicas;

- Implementar o modelo WSGG em simulações multidimensionais, comparando com a solução LBL e verificando se o modelo mantém a acurácia;

Com o intuito de continuar o aprimoramento do modelo SLW, é sugerido:

- Buscar alternativas na solução de misturas envolvendo o modelo SLW, de forma que o erro na solução do modelo em função do acoplamento de misturas seja o mínimo possível.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abramowitz, M.; Stegun, I.A. **Handbook of Mathematical Functions**. Federal Bureau of Standards, Washington, 1972.

Apostol, T.M. **Calculus, vol II: Multi-variable calculus and linear algebra, with applications to differential equations and probability**. Blaisdell Publishing Company, Waltham, Massachusetts, 1969.

Bahador, M.; Sundén, B. **Investigation on the Effects of Fly Ash Particles on the Thermal Radiation in Biomass Fired Boilers**. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 51, p. 2411-2417, 2008.

Bressloff, N.W. **The Influence of Soot Loading on Weighted Sum of Grey Gases Solutions to the Radiative Transfer Equation Across Mixtures of Gases and Soot**. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 42, p. 3469-3480, 1999.

Brewster, M.Q., Tien, C.L. **Radiative Transfer in Packed Fluidized Beds: Dependent Versus Independent Scattering**. Journal of Heat Transfer, v. 104, p. 573-579, 1982.

Borjini, M.N.; Guedri, K.; Said, R. **Modeling of Radiative Heat Transfer in 3D Complex Boiler with Non-Gray Sooting Media**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 105, p. 167-179, 2007.

Cassol, F., Brittes, R., França, F.H.R., Cardoso, C.A.L. **Soot Particulate Medium Influence in Radiation Heat Transfer Using Gray Gas Model**. 14th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Rio de Janeiro, RJ, 2012.

Centeno, F.R., França, F.H.R., Cassol, F., Dorigon, L., Vitorino da Silva, C. **Evaluation of New WSGG Model Correlations on Radiative Source Term in a 2D Axisymmetric Turbulent Diffusion Flame**. 14th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Rio de Janeiro, RJ, 2012.

Chang, H.; Charalampopoulos, T.T. **Determination of the Wavelength Dependence of Refractive Indices of Flame Soot**. Proceedings of Mathematical and Physical Sciences, v. 430, n. 1880, p. 577-591, 1990.

Chalhoub, E.S. **Discrete-ordinates Solution for Radiative-Transfer Problems**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 76, p. 193-206, 2002.

Chandrasekhar S. **Radiative Transfer**. Dover Publications, New York, 1960.

Chu, H.; Liu, F.; Zhou, H. **Calculations of Gas Thermal Radiation Transfer in One-Dimensional Planar Using LBL and SNB Models**. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 54, p. 4736-4745, 2011.

Denison, M.K; Webb, B.W. **An Absorption-line Blackbody Distribution Function for Efficient Calculation of Total Gas Radiative Transfer**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 50, n. 5, p. 499-510, 1993.

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. 1813–21, 1995a.

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

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, 1995c.

Dorigon, L.J. **Determinação de Coeficientes do Modelo da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinzas a Partir do Banco de Dados HITEMP 2010**. Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre, RS, 2012.

Dorigon, L.J, Duciak, G, Brittes, R, Cassol, F, Galarça, M, França, F.H.R. **WSGG Correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ Mixtures**. International Journal of Heat and Mass transfer, v.64, p. 863-873, 2013.

Duciak, G. **Aplicação do Modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas em Meios Não-Isotérmicos e Não-Homogêneos**. Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre, RS, 2013.

Edge, P.; Gubba, S.R.; Ma, L.; Porter, R.; Pourkashanian, M.; Williams, A. **LES Modelling of Air and Oxy-Fuel Pulverised Coal Combustion – Impact on Flame Properties**. Proceedings of the Combustion Institute, v. 33, p. 2709-2716, 2011.

Fiveland, W.A. **Discrete-Ordinates Solution of the Radiative Transport Equation for Rectangular Enclosures**. Journal of Heat Transfer, v. 106, p. 699-706, 1984.

Fiveland, W.A. **Discrete Ordinates Methods for Radiative Heat Transfer in Isotropically and Anisotropically Scattering Media**. Journal of Heat Transfer, v. 109, p. 809-812, 1987.

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**. 12th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Belo Horizonte, MG, 2008.

Galarça, M.M.; Mossi, A.; França, F.H.R. **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.

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

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

Hua, Y.; Flamant, G.; Lu, J.; Gauthier, D. **3D Modelling of Radiative Heat Transfer in Circulating Fluidized Bed Combustors: Influence of the Particulate Composition**. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 48, p. 1145-1154, 2005.

Im, K.H.; Ahluwalia, R.K. **Radiation Properties of Coal Combustion Products**. Work supported by the U. S. Department of Energy, Office of Fossil Energy, Advanced Combustion and Alternative Fuels, Argonne, Illinois, 1990.

Johansson, R.; Leckner, B.; Anersson, K.; Johnsson, F. **Account for Variations in the H₂O to CO₂ Molar Ratio when Modeling Gaseous Radiative Heat Transfer with the Weighted-Sum-of-Grey-Gases Model**. Combustion and Flame, v, 158, p. 893-901, 2011.

Klason, T.; Bai, X.S.; Bahador, M.; Nilsson, T.K.; Sundén, B. **Investigation of Radiative Heat Transfer in Fixed Bed Biomass Furnaces**. Fuel, v.87. p. 2141-2153, 2008.

Krishnamoorthy, G. **A New Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for CO₂-H₂O Gas Mixtures**. International Communications in Heat and Mass Transfer. V.37, p. 1182-1186, 2010.

Kock, R.; Krebs, W.; Wittig, S.; Viskatas, R. **Discrete Ordinates Quadrature Schemes for Multidimensional Radiative Transfer**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 53, p. 353-372, 1994.

Lathrop, K.D., Carlson, B.G. **Discrete-Ordinates Angular Quadrature of The Neutron Transport Equation**. Technical Information Series Report LASL-3186, Los Alamos Scientific Laboratory, 1965.

Lee, S.C.; Tien, C.L. **Optical Constants of Soot in Hydrocarbon Flames**. 18th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburg, PA, p. 1159-1166, 1981.

Levenberg, K. **A Method for the Solution of Certain Non-linear Problems in Least Squares**. Quarterly of Applied Mathematics, v. 2, p. 164-168, 1944.

Lewis, E.E.; Miller, W.F.Jr. **Computational Methods of Neutron Transport**. John Wiley and Sons, New York, 1984.

Li, H.S.; Flamant, G.; Lu, J.D. **A New Discrete Ordinate Algorithm for Computing Radiative Transfer in One-Dimensional Atmospheres**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 83, p. 407-421, 2004.

Lin, J.C.; Greif, R. **Total Band Absortance of Carbon Dioxide and Water Vapor Including the Effect of Overlapping**. Journal of Heat and Mass Transfer, v. 17, p. 793-795, 1973.

Marquardt, D.W. **An Algorithm for the Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters**. SIAM Journal of Applied Mathematics, v. 11, p. 431-441, 1963.

Mengüç, M.P.; Manickavasagam, S.; D'Sa, D.A. **Determination of Radiative Properties of Pulverized Coal Particles from Experiments**. *Fuel*, v. 73, n. 4, p. 613-625, 1994.

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

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

Modest, M.F., Zhang, H. **The full-spectrum correlated- κ distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures**. *Journal of Heat Transfer*, v. 124, p. 30-38, 2002.

Modest, M.F. **Narrow-band and full-spectrum k -distributions for radiative heat transfer – correlated- k vs. scaling approximation**. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, v. 76, p. 69-83, 2003.

Mossi, A.; Barve, V.; Galarça, M.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R.; Ezekoye, O. **Treatment of Spectral Effects in Participating Media Radiation Modeling**. 13th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Uberlândia, MG, 2010.

Mossi, A.; Galarça, M.M.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. **The Accuracy of the Radiative Heat Transfer Gas Models in Non-Isothermal and Non-Homogeneous Media With Soot**. 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Natal, RN, 2011.

Predoi-Cross, A., Holladay, C., Heung, H., Bouanich, J.P., Mellau, G.C., Keller, R., Hurtmans, D. **Nitrogen-broadened lineshapes in the oxygen A-band: experimental results and theoretical calculations**. *Journal of Molecular Spectroscopy*, v. 251, p.159-175, 2008.

Rehfeldt, S., Christian, K., Ehmann, M., Bergins, C. **Modeling of radiative properties of an Oxyfuel atmosphere with a weighted sum of gray gases for variable carbon dioxide and water vapor concentrations**. *Energy Procedia*, v. 4, p. 980-987, 2011.

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

Santos, F.J. **Mecanismos da Queima de Combustíveis Vegetais em Leito Fluidizado Borbulhante**. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1991.

Saldo, K.; Giedt, W.H. **Spectral Absorption of Water Vapor and Carbon Dioxide Mixtures in 2.7 Micron Band**. *Journal of Heat Transfer*, v. 99, p. 53-59, 1977.

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

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. **SLW Modeling of Radiative Transfer in Multicomponent Gas Mixtures**. Journal of Quantitative transfer in multicomponent gas mixtures, v. 65, p. 665-672, 2000.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. **An Efficient Method for Modeling Radiative Transfer in Multicomponent Gas Mixtures with Soot**. Transactions of the ASME. v. 123, p. 450-457, 2001.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. **A Local-Spectrum Correlated Model for Radiative Transfer in Non-Uniform gas Media**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 73, p. 361-373, 2002.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. **The Cumulative Wavenumber Method for Modeling Radiative Transfer in Gas Mixtures with Soot**. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, v. 93, p. 273-287, 2005.

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. **Global Spectral Methods in Gas Radiation: The Exact Limit of the SLW Model and Its Relationship to the ADF and FSK Methods**. Journal of Heat Transfer, v. 133, p. 1-9, 2011.

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.

Smith, T.F.; Al-Turki, A.M.; Byun, K.H.; Kim, T.K. **Radiative and Conductive Transfer for a Gas/Soot Mixture Between Diffuse Parallel Plates**. Journal of Thermophysics, v. 1, p. 50-55, 1987.

Strapasson, A.B. **A Energia Térmica e o Paradoxo da Eficiência Energética**. Dissertação de Mestrado, Pós-Graduação em Energia, USP, São Paulo, 2004.

Tanin, K., França, F.H.R., da Silva, R.C., Smith Schneider, P., 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.

Turns, S.R. **An Introduction to Combustion – Concepts and Applications**. Second Edition, McGraw-Hill International Editions, 2006.

Yagi, S.; Iino, H. **Radiation From Soot Particles in Luminous Flames**. 18th International Symposium on Combustion, v.8, p. 288-293, Pasadena, CA, 1961.

Yu, M.J.; Baek, S.W.; Park, J.H. **An Extension of the Weighted Sum of Gray Gases Non-Gray Gas Radiation Model to a Two Phase Mixture of Non-Gray Gas with Particles**. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 43, p. 1699-1713, 2000.

APÊNDICE A - Resultados para o Modelo de Gás Cinza (GG).

Tabela A.1 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
	10% CO ₂			
Equação 4.1	580,89	303,29	684,12	440,33
Equação 4.2	402,15	230,99	485,42	260,72
Equação 4.3	530,02	266,63	249,54	119,99
20% H ₂ O				
Equação 4.1	88,15	51,00	82,45	48,73
Equação 4.2	106,01	45,73	53,21	29,27
Equação 4.3	86,91	48,97	67,06	33,23
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	192,24	114,34	193,42	103,49
Equação 4.2	165,86	109,32	145,23	78,96
Equação 4.3	190,66	101,40	180,75	80,22
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	174,49	105,01	175,27	93,22
Equação 4.2	154,29	102,62	136,36	71,63
Equação 4.3	173,00	92,82	167,40	74,52
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	93,46	61,23	93,28	50,37
Equação 4.2	100,06	67,15	95,44	42,55
Equação 4.3	97,65	52,80	101,02	46,95
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	13,76	5,74	18,93	6,15
Equação 4.2	26,39	16,14	36,41	16,89
Equação 4.3	26,53	8,99	28,02	11,71
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	11,31	3,23	7,99	3,46
Equação 4.2	11,03	3,62	11,37	6,98
Equação 4.3	10,97	2,38	8,99	3,20

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela A.2 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL.
 Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	185,02	95,31	307,72	223,49
Equação 4.2	113,69	62,91	263,52	126,13
Equação 4.3	189,68	103,93	70,38	40,31
20% H ₂ O				
Equação 4.1	29,36	21,45	45,09	29,78
Equação 4.2	32,22	18,99	36,65	17,60
Equação 4.3	65,86	29,84	18,48	9,36
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	96,06	58,21	133,59	92,88
Equação 4.2	68,37	45,58	103,65	51,25
Equação 4.3	102,39	62,59	57,76	34,38
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	91,55	55,78	127,42	88,38
Equação 4.2	65,72	44,06	98,24	48,68
Equação 4.3	97,38	59,76	60,16	33,90
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	63,71	40,63	89,18	60,53
Equação 4.2	51,18	33,99	65,26	33,09
Equação 4.3	66,77	42,38	59,83	28,93
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	18,56	11,85	20,57	11,72
Equação 4.2	24,01	11,52	15,43	7,62
Equação 4.3	17,59	10,73	20,56	10,07
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	8,74	3,61	15,87	11,74
Equação 4.2	4,67	2,25	18,34	7,40
Equação 4.3	8,11	3,24	15,74	8,74

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela A.3 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	572,71	192,70	630,05	491,13
Equação 4.2	376,28	131,86	533,03	257,52
Equação 4.3	523,62	193,01	215,55	148,71
20% H ₂ O				
Equação 4.1	59,19	23,14	73,06	56,01
Equação 4.2	48,60	20,23	66,44	32,68
Equação 4.3	64,57	27,30	53,35	34,38
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	190,53	67,98	190,16	139,67
Equação 4.2	156,11	59,33	162,14	78,89
Equação 4.3	189,71	73,63	160,70	90,34
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	173,89	62,36	174,06	127,16
Equação 4.2	145,19	59,33	148,20	72,17
Equação 4.3	172,89	67,46	149,89	83,33
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	95,39	35,86	97,50	67,82
Equação 4.2	88,71	35,44	81,54	40,02
Equação 4.3	94,01	38,48	93,60	46,98
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	13,85	7,15	14,65	7,40
Equação 4.2	17,59	8,88	15,15	6,76
Equação 4.3	17,35	7,11	18,49	8,74
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	9,84	1,62	6,59	5,42
Equação 4.2	10,72	2,89	11,32	6,02
Equação 4.3	10,58	1,72	9,12	3,25

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela A.4 - Erro máximo e médio para o modelo GG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	166,74	61,97	238,84	185,21
Equação 4.2	108,15	45,12	222,16	111,17
Equação 4.3	174,67	70,36	63,34	44,27
20% H ₂ O				
Equação 4.1	24,48	10,95	35,44	26,36
Equação 4.2	20,94	10,05	34,20	17,40
Equação 4.3	30,51	14,70	13,03	9,33
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	88,87	32,72	113,15	88,77
Equação 4.2	64,99	25,62	105,26	53,10
Equação 4.3	96,30	38,78	53,15	35,62
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	84,93	31,26	108,39	85,06
Equação 4.2	62,47	24,58	100,84	50,86
Equação 4.3	91,79	36,95	51,74	35,20
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	60,21	22,14	78,05	61,29
Equação 4.2	46,05	17,84	72,55	36,51
Equação 4.3	63,89	25,77	48,12	31,67
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	14,03	5,39	19,43	14,93
Equação 4.2	11,66	4,66	17,54	8,64
Equação 4.3	13,72	5,88	17,31	10,29
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	8,96	3,34	16,88	12,14
Equação 4.2	4,23	2,25	15,13	7,63
Equação 4.3	8,17	3,04	16,25	10,34

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

**APÊNDICE B - Resultados para o Modelo Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza (WSGG).
Convencional.**

Tabela B.1 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.
Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	4,80	1,94	4,52	1,32
Equação 4.2	7,77	3,56	4,70	1,89
Equação 4.3	5,06	1,66	3,38	1,81
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	5,14	2,07	5,36	2,72
Equação 4.2	6,87	1,94	4,18	2,39
Equação 4.3	5,92	1,87	4,39	1,46
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	7,03	2,06	4,58	3,39
Equação 4.2	7,74	2,96	4,56	2,20
Equação 4.3	7,64	2,05	5,04	2,59
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	20,30	7,61	14,75	7,45
Equação 4.2	6,87	2,29	3,73	1,31
Equação 4.3	6,04	1,75	3,76	1,31
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	5,04	2,95	7,24	3,16
Equação 4.2	4,07	1,76	6,58	3,62
Equação 4.3	3,13	1,36	5,15	2,42

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela B.2 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	9,13	3,87	4,99	2,07
Equação 4.2	8,85	4,15	3,07	1,51
Equação 4.3	8,64	3,62	4,04	1,67
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	10,76	4,07	6,29	2,96
Equação 4.2	7,90	4,25	3,73	1,59
Equação 4.3	10,24	3,89	4,38	1,52
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	10,01	3,48	5,97	3,05
Equação 4.2	7,77	3,66	3,73	1,53
Equação 4.3	9,83	3,40	4,26	1,49
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	7,57	2,46	4,47	1,80
Equação 4.2	7,25	2,58	2,73	1,08
Equação 4.3	7,95	2,54	4,53	1,90
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	3,67	1,48	3,65	1,81
Equação 4.2	4,35	1,95	4,19	1,86
Equação 4.3	3,96	1,05	3,27	1,64

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela B.3 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\xi_{\text{máximo}}$ (%)	$\xi_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	2,79	1,27	1,56	0,97
Equação 4.2	7,65	2,65	3,05	1,19
Equação 4.3	4,76	1,04	2,72	1,91
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	4,83	1,62	3,19	1,63
Equação 4.2	9,29	2,94	3,63	1,49
Equação 4.3	5,77	1,43	3,71	1,11
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	6,68	1,79	4,51	2,89
Equação 4.2	9,28	2,60	4,45	1,89
Equação 4.3	7,42	1,77	4,58	2,14
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	5,23	1,53	3,22	1,24
Equação 4.2	7,24	2,06	2,85	1,06
Equação 4.3	5,83	1,51	3,44	1,31
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	5,44	1,59	7,59	5,41
Equação 4.2	1,71	0,73	3,81	2,12
Equação 4.3	3,05	0,97	5,09	3,39

δ =termo fonte radiante, ξ =fluxo de calor radiante.

Tabela B.4 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\xi_{\text{máximo}}$ (%)	$\xi_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	8,47	3,18	4,62	2,28
Equação 4.2	8,41	3,42	3,44	1,69
Equação 4.3	8,37	3,34	20,93	13,62
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	10,18	3,42	5,96	2,78
Equação 4.2	9,64	3,69	4,19	2,14
Equação 4.3	10,00	3,62	3,65	1,48
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	9,54	2,94	5,74	2,96
Equação 4.2	9,10	3,15	4,21	2,09
Equação 4.3	9,61	3,14	3,74	1,54
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	7,25	2,03	4,34	1,92
Equação 4.2	7,38	2,10	2,88	1,27
Equação 4.3	7,74	2,21	4,30	2,06
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	3,23	1,01	1,87	0,87
Equação 4.2	5,00	1,33	2,45	0,68
Equação 4.3	3,76	0,93	1,80	0,72

δ =termo fonte radiante, ξ =fluxo de calor radiante.

APÊNDICE C - Resultados para o Modelo da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza Baseado em Linhas Espectrais (SLW).

Tabela C.1 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	77,39	30,72	71,10	50,27
Equação 4.2	60,74	23,00	48,77	27,83
Equação 4.3	75,90	27,84	32,62	16,68
20% H ₂ O				
Equação 4.1	16,22	9,22	27,06	9,41
Equação 4.2	30,84	13,59	25,89	13,57
Equação 4.3	18,91	8,28	20,90	5,43
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	30,04	12,51	16,04	9,35
Equação 4.2	42,04	14,29	19,18	9,07
Equação 4.3	39,10	11,60	17,97	8,90
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	19,37	9,46	20,93	5,68
Equação 4.2	30,24	11,74	19,28	10,19
Equação 4.3	23,91	8,15	21,18	5,44
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	12,84	7,29	27,65	12,70
Equação 4.2	20,44	7,76	27,87	13,95
Equação 4.3	16,38	5,82	25,20	9,51
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	12,98	4,57	15,20	11,93
Equação 4.2	11,65	5,98	31,44	14,35
Equação 4.3	11,80	4,34	18,21	8,11
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	8,94	3,40	9,68	5,66
Equação 4.2	10,30	4,92	13,45	6,56
Equação 4.3	12,98	2,26	10,72	3,61

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela C.2 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	27,93	14,70	11,04	6,42
Equação 4.2	48,55	19,40	17,34	6,21
Equação 4.3	40,43	13,89	4,63	2,16
20% H ₂ O				
Equação 4.1	60,02	18,49	20,32	8,83
Equação 4.2	118,37	32,53	25,55	10,01
Equação 4.3	82,61	19,15	9,74	3,57
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	44,56	14,00	14,34	5,06
Equação 4.2	76,42	20,20	17,90	6,33
Equação 4.3	62,83	13,80	8,03	3,19
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	33,14	12,51	12,25	6,79
Equação 4.2	63,28	18,53	16,43	6,86
Equação 4.3	49,45	12,27	7,18	2,62
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	27,31	9,65	20,35	12,15
Equação 4.2	40,56	14,59	21,33	9,89
Equação 4.3	37,22	9,46	11,77	5,48
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	13,41	7,33	26,65	11,46
Equação 4.2	16,96	8,46	27,36	13,73
Equação 4.3	16,20	6,27	20,87	8,08
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	11,52	6,06	21,05	10,60
Equação 4.2	11,78	6,65	29,29	11,36
Equação 4.3	15,68	5,04	15,44	7,00

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela C.3 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	78,00	29,17	54,26	34,75
Equação 4.2	61,67	21,26	28,57	18,18
Equação 4.3	79,08	27,03	25,75	15,30
20% H ₂ O				
Equação 4.1	24,98	15,23	49,31	16,23
Equação 4.2	46,96	21,47	45,74	22,72
Equação 4.3	23,70	13,40	35,43	8,78
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	31,67	18,64	40,63	13,65
Equação 4.2	47,85	20,50	37,14	18,13
Equação 4.3	42,33	16,44	34,86	11,01
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	25,80	15,54	44,13	13,27
Equação 4.2	42,78	17,28	40,94	19,90
Equação 4.3	27,36	13,10	37,62	9,08
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	19,81	12,05	48,90	19,49
Equação 4.2	33,68	12,16	46,59	22,73
Equação 4.3	16,76	9,39	43,87	13,56
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	20,70	13,78	63,68	24,31
Equação 4.2	36,53	14,97	62,37	30,90
Equação 4.3	18,51	10,03	58,86	19,32
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	17,15	7,58	41,44	23,52
Equação 4.2	21,41	8,18	52,29	16,74
Equação 4.3	22,13	4,08	24,45	15,03

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela C.4 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
	10% CO ₂			
Equação 4.1	31,60	11,63	25,99	13,90
Equação 4.2	47,17	14,89	31,48	12,20
Equação 4.3	40,13	11,83	5,12	2,25
20% H ₂ O				
Equação 4.1	62,21	22,96	27,63	13,63
Equação 4.2	124,73	36,42	30,81	13,83
Equação 4.3	87,75	23,88	12,48	5,14
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	41,55	16,83	32,21	13,42
Equação 4.2	79,57	22,75	32,56	14,61
Equação 4.3	62,88	16,40	15,66	5,09
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	30,78	15,11	35,18	14,95
Equação 4.2	66,45	20,57	35,57	15,93
Equação 4.3	49,96	14,53	17,32	5,44
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	26,93	11,88	38,97	18,52
Equação 4.2	41,93	16,02	39,20	18,00
Equação 4.3	35,32	11,14	21,66	7,12
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	18,32	11,42	46,61	17,79
Equação 4.2	29,25	13,13	44,57	22,03
Equação 4.3	16,91	9,64	39,41	12,23
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	21,77	14,13	62,96	25,61
Equação 4.2	30,23	17,42	66,07	31,16
Equação 4.3	26,10	10,31	51,50	18,85

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

APÊNDICE D - Resultados para o Modelo da Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza Baseado em Linhas Espectrais (SLW). Solução Através da Aproximação de Escala.

Tabela D.1 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
10% CO ₂				
Equação 4.1	7,92	3,07	6,72	3,92
Equação 4.2	8,69	4,13	7,25	4,36
Equação 4.3	7,37	2,61	2,68	1,36
20% H ₂ O				
Equação 4.1	9,39	2,81	4,78	2,37
Equação 4.2	12,82	4,33	5,16	2,78
Equação 4.3	7,43	2,08	3,22	1,31
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	29,75	12,03	22,26	12,09
Equação 4.2	36,90	17,30	22,13	12,18
Equação 4.3	29,60	10,51	19,75	7,59
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	35,98	17,64	28,37	14,56
Equação 4.2	52,71	27,44	32,93	17,04
Equação 4.3	39,42	15,69	29,82	11,22
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	44,84	18,86	33,11	17,43
Equação 4.2	57,32	25,92	31,65	16,93
Equação 4.3	42,68	16,12	32,20	13,55
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	8,42	4,93	22,47	15,24
Equação 4.2	38,48	19,38	39,01	18,38
Equação 4.3	31,31	8,47	28,15	14,85
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	59,23	18,49	57,70	30,28
Equação 4.2	41,51	13,82	45,37	27,37
Equação 4.3	45,42	11,84	53,46	22,47

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela D.2 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
10% CO ₂				
Equação 4.1	2,72	1,40	2,62	1,75
Equação 4.2	4,90	1,98	2,62	1,58
Equação 4.3	3,15	1,21	0,95	0,42
20% H ₂ O				
Equação 4.1	13,45	5,33	7,17	3,77
Equação 4.2	16,70	7,13	6,07	3,46
Equação 4.3	11,30	3,93	2,19	1,07
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	34,54	16,66	27,13	16,41
Equação 4.2	49,61	23,55	23,89	14,50
Equação 4.3	41,11	15,34	16,27	5,36
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	57,98	29,93	50,99	30,97
Equação 4.2	76,43	40,68	44,22	26,31
Equação 4.3	66,40	28,34	23,90	10,14
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	61,42	27,03	51,51	33,54
Equação 4.2	75,35	35,74	44,73	25,38
Equação 4.3	63,53	25,01	36,37	14,91
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	54,76	27,10	43,53	23,21
Equação 4.2	70,51	34,69	45,40	21,03
Equação 4.3	55,11	23,58	41,74	19,56
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	13,64	8,53	34,99	24,13
Equação 4.2	25,21	12,21	41,23	16,01
Equação 4.3	24,19	7,86	34,47	20,68

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela D.3 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	8,17	2,10	6,66	5,24
Equação 4.2	5,86	1,59	5,85	2,94
Equação 4.3	7,51	2,03	2,72	1,77
20% H ₂ O				
Equação 4.1	9,20	2,07	5,01	3,25
Equação 4.2	11,78	3,03	5,19	2,48
Equação 4.3	7,31	1,66	2,74	1,39
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	30,12	9,45	23,39	16,11
Equação 4.2	34,79	12,36	23,01	11,77
Equação 4.3	29,83	9,29	19,63	8,85
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	33,04	20,73	27,25	15,74
Equação 4.2	53,94	32,37	41,15	18,76
Equação 4.3	37,06	17,72	30,27	13,10
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	44,13	20,60	31,18	17,39
Equação 4.2	59,90	29,13	37,33	17,30
Equação 4.3	42,35	17,42	31,23	14,58
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	25,03	16,36	61,62	23,84
Equação 4.2	53,14	28,05	55,84	29,31
Equação 4.3	33,47	12,66	60,17	21,78
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	71,51	14,82	59,10	43,03
Equação 4.2	40,57	10,16	53,26	25,75
Equação 4.3	52,84	11,07	55,78	31,94

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela D.4 - Erro máximo e médio para o modelo SLW comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	2,25	0,87	2,43	1,63
Equação 4.2	3,12	1,25	2,75	1,26
Equação 4.3	2,92	0,88	0,79	0,42
20% H ₂ O				
Equação 4.1	13,77	3,46	8,25	6,11
Equação 4.2	15,60	4,22	7,60	3,76
Equação 4.3	11,53	3,05	2,08	1,42
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	33,69	11,15	28,76	21,64
Equação 4.2	76,47	18,58	31,98	16,01
Equação 4.3	40,84	12,02	16,67	7,11
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	53,70	29,99	51,55	30,97
Equação 4.2	76,47	43,82	43,75	26,87
Equação 4.3	63,23	28,90	25,34	9,57
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	58,33	26,46	50,41	32,41
Equação 4.2	75,73	37,59	41,80	25,17
Equação 4.3	61,35	24,95	35,91	14,24
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	57,76	25,54	43,02	23,35
Equação 4.2	74,93	33,16	42,78	19,19
Equação 4.3	58,58	23,22	39,97	19,52
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	20,77	12,19	63,45	31,48
Equação 4.2	40,32	22,54	65,42	31,24
Equação 4.3	31,14	9,78	53,33	27,26

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

APÊNDICE E - Resultados para o Modelo Número de Onda Cumulativo (CW).

Tabela E.1 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL.
Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	4,99	2,16	58,74	27,34
Equação 4.2	15,57	5,35	60,02	20,26
Equação 4.3	3,81	1,92	14,21	6,04
20% H ₂ O				
Equação 4.1	12,32	4,39	44,06	16,93
Equação 4.2	25,75	8,79	47,68	15,54
Equação 4.3	14,64	4,56	17,53	8,79
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	17,74	6,76	41,24	16,31
Equação 4.2	22,94	9,32	44,89	13,08
Equação 4.3	18,68	6,85	19,56	7,98
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	10,02	4,39	43,54	16,65
Equação 4.2	16,90	7,30	47,17	14,58
Equação 4.3	10,76	4,39	24,75	9,41
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	26,41	7,06	49,57	31,64
Equação 4.2	18,26	5,52	54,40	20,89
Equação 4.3	25,70	7,14	34,52	21,53
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	66,98	23,54	60,21	32,80
Equação 4.2	63,17	22,96	52,41	29,85
Equação 4.3	60,64	19,13	58,30	27,66
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	61,59	35,51	143,32	93,98
Equação 4.2	34,41	14,63	68,20	28,06
Equação 4.3	57,15	3,60	122,98	73,36

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela E.2 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL.
Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
10% CO ₂				
Equação 4.1	6,53	2,80	49,98	23,64
Equação 4.2	21,40	8,30	53,18	17,16
Equação 4.3	9,98	2,55	8,67	3,24
20% H ₂ O				
Equação 4.1	32,00	11,31	40,55	16,86
Equação 4.2	40,62	15,79	41,80	11,64
Equação 4.3	31,48	10,80	21,37	9,46
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	16,04	6,43	40,99	15,06
Equação 4.2	22,14	8,87	42,97	10,80
Equação 4.3	17,79	6,18	13,42	4,56
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	11,86	5,16	42,47	15,38
Equação 4.2	18,51	7,73	44,42	11,15
Equação 4.3	13,40	4,81	14,48	5,34
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	14,31	4,08	51,00	26,19
Equação 4.2	6,47	2,89	53,08	17,67
Equação 4.3	14,34	4,23	15,09	8,84
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	64,00	19,19	60,89	50,68
Equação 4.2	60,50	18,72	62,55	30,84
Equação 4.3	63,82	19,68	54,69	36,82
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	60,12	20,91	51,75	22,83
Equação 4.2	70,47	25,76	57,02	30,76
Equação 4.3	61,69	18,31	55,97	21,97

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela E.3 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	8,44	3,04	88,16	42,28
Equação 4.2	17,47	5,25	87,22	28,12
Equação 4.3	6,59	2,32	57,66	14,25
20% H ₂ O				
Equação 4.1	26,42	7,04	91,10	38,73
Equação 4.2	19,30	6,35	92,99	29,22
Equação 4.3	17,14	5,55	41,82	17,00
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	7,76	2,65	88,61	34,21
Equação 4.2	17,94	6,04	90,19	26,60
Equação 4.3	4,91	2,03	61,98	19,74
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	13,70	3,74	89,22	37,17
Equação 4.2	16,34	4,48	90,73	27,82
Equação 4.3	8,70	2,98	422,72	33,91
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	42,24	9,97	91,30	51,40
Equação 4.2	30,44	7,93	92,91	33,42
Equação 4.3	38,57	9,93	91,09	43,10
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	75,44	17,88	81,89	62,98
Equação 4.2	73,45	18,43	89,56	38,23
Equação 4.3	72,48	18,03	77,90	55,75
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	29,48	10,43	50,55	27,39
Equação 4.2	79,36	24,47	75,18	33,37
Equação 4.3	42,16	10,49	99,70	29,04

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela E.4 - Erro máximo e médio para o modelo CW comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	5,89	2,68	82,51	39,55
Equação 4.2	29,03	13,17	88,60	28,73
Equação 4.3	6,93	2,42	53,47	10,55
20% H ₂ O				
Equação 4.1	22,83	6,07	96,85	38,54
Equação 4.2	19,71	5,86	97,00	24,40
Equação 4.3	9,12	3,55	28,35	15,28
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	5,74	2,98	90,54	35,64
Equação 4.2	21,19	10,02	93,20	24,95
Equação 4.3	10,21	3,54	55,29	14,88
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	5,42	1,99	90,85	36,97
Equação 4.2	18,24	8,93	93,42	25,67
Equação 4.3	6,36	2,44	664,55	33,46
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	23,06	5,92	92,75	46,76
Equação 4.2	11,34	4,47	94,77	30,30
Equação 4.3	20,45	5,74	165,45	37,82
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	71,61	17,15	94,05	67,82
Equação 4.2	66,15	16,07	96,57	39,83
Equação 4.3	69,46	17,83	94,05	51,75
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	78,86	20,13	81,14	63,21
Equação 4.2	88,94	23,30	88,50	42,81
Equação 4.3	77,83	19,86	76,32	49,85

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

**APÊNDICE F - Resultados para o Modelo Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza (WSGG).
Nova Proposta.**

Tabela F.1 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.
Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração uniforme.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	8,50	4,52	9,79	3,16
Equação 4.2	14,59	6,68	10,45	4,19
Equação 4.3	9,61	4,49	26,71	23,21
20% H ₂ O				
Equação 4.1	5,37	2,34	7,26	3,57
Equação 4.2	6,68	2,55	6,91	3,55
Equação 4.3	8,23	2,81	9,42	6,05
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	6,10	3,07	11,31	6,89
Equação 4.2	7,15	2,47	11,13	5,18
Equação 4.3	5,69	2,18	9,08	4,48
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	5,54	2,89	10,67	6,72
Equação 4.2	7,16	2,40	10,55	4,90
Equação 4.3	5,15	2,14	8,80	4,28
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	5,39	1,95	6,77	5,25
Equação 4.2	7,53	2,11	7,11	3,34
Equação 4.3	5,70	1,75	7,25	3,26
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	19,81	7,56	14,51	7,36
Equação 4.2	6,63	1,94	3,69	1,43
Equação 4.3	5,49	1,50	3,92	1,16
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	5,06	2,98	7,36	3,23
Equação 4.2	4,17	1,83	6,79	3,74
Equação 4.3	3,19	1,37	5,41	2,49

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela F.2 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
10% CO ₂				
Equação 4.1	12,83	5,75	15,36	7,35
Equação 4.2	23,67	5,30	12,07	7,00
Equação 4.3	11,49	4,46	29,15	26,26
20% H ₂ O				
Equação 4.1	8,20	3,74	8,38	5,46
Equação 4.2	15,16	9,18	12,58	6,39
Equação 4.3	7,82	3,02	7,07	4,87
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	12,39	4,19	12,54	10,07
Equação 4.2	6,26	3,06	11,62	5,59
Equação 4.3	10,77	4,14	7,98	2,98
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	12,19	4,06	12,18	9,80
Equação 4.2	6,02	2,98	11,25	5,40
Equação 4.3	10,63	4,03	7,89	2,97
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	10,95	3,29	9,86	8,01
Equação 4.2	5,21	2,43	8,75	4,21
Equação 4.3	9,79	3,36	7,18	2,80
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	7,68	2,30	5,03	2,83
Equação 4.2	6,31	1,83	2,89	1,36
Equação 4.3	7,57	2,35	4,47	2,30
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	3,70	1,42	3,79	2,01
Equação 4.2	4,25	1,86	4,19	1,93
Equação 4.3	3,90	1,03	3,27	1,73

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela F.3 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂			
Equação 4.1	3,69	1,83	2,82	1,27
Equação 4.2	13,42	4,20	4,68	2,01
Equação 4.3	9,18	2,43	24,22	21,86
20% H ₂ O				
Equação 4.1	5,52	2,02	6,27	3,01
Equação 4.2	7,62	2,17	6,38	2,37
Equação 4.3	6,95	2,12	8,93	5,33
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	5,97	2,48	8,46	6,10
Equação 4.2	9,85	3,22	8,94	4,27
Equação 4.3	4,71	1,77	7,34	3,12
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	5,66	2,40	8,27	6,06
Equação 4.2	9,77	3,12	8,72	4,17
Equação 4.3	4,43	1,80	7,29	3,09
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	5,67	1,89	6,73	5,35
Equação 4.2	9,27	2,60	7,11	4,46
Equação 4.3	5,87	1,73	6,70	3,04
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	4,77	1,31	3,08	1,22
Equação 4.2	7,03	1,95	2,95	1,36
Equação 4.3	5,35	1,33	3,73	1,22
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	5,49	1,62	7,79	5,58
Equação 4.2	1,79	0,72	4,11	2,19
Equação 4.3	3,07	0,98	5,35	3,47

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela F.4 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
	10% CO ₂			
Equação 4.1	12,06	3,10	7,11	4,42
Equação 4.2	7,25	2,73	4,36	2,20
Equação 4.3	10,91	2,96	26,61	25,19
20% H ₂ O				
Equação 4.1	10,53	4,44	14,10	10,22
Equação 4.2	15,24	5,75	15,19	6,71
Equação 4.3	8,26	3,65	7,41	4,84
10% CO ₂ + 20% H ₂ O				
Equação 4.1	12,64	3,66	11,40	9,24
Equação 4.2	6,65	3,02	9,81	5,24
Equação 4.3	11,05	3,34	6,41	2,80
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	12,44	3,55	11,13	9,04
Equação 4.2	6,52	2,94	9,59	5,13
Equação 4.3	10,91	3,27	6,37	2,83
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	11,15	2,89	9,35	7,70
Equação 4.2	6,25	2,46	8,07	4,30
Equação 4.3	10,01	2,81	5,95	2,50
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	7,61	1,81	5,02	3,34
Equação 4.2	6,27	1,43	3,77	1,68
Equação 4.3	7,51	1,97	4,21	2,63
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	3,29	1,00	1,96	0,71
Equação 4.2	4,82	1,27	2,53	0,62
Equação 4.3	3,71	0,92	1,94	0,80

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

**APÊNDICE G - Resultados para o Modelo Soma-Ponderada-dos-Gases-Cinza (WSGG).
Método Direto.**

Tabela G.1 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.
Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	5,62	3,24	9,20	5,99
Equação 4.2	9,26	3,29	7,65	4,22
Equação 4.3	9,61	3,92	9,70	6,07
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	5,08	2,77	7,67	4,83
Equação 4.2	8,66	3,16	6,25	3,50
Equação 4.3	8,72	3,35	8,28	5,05
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	3,57	1,89	2,16	1,35
Equação 4.2	6,27	2,67	3,06	1,16
Equação 4.3	5,57	1,88	2,60	1,26
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	20,07	7,57	14,54	7,46
Equação 4.2	6,86	2,26	3,58	1,25
Equação 4.3	5,70	1,73	3,47	1,18
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	5,04	2,97	7,24	3,17
Equação 4.2	4,13	1,80	6,78	3,72
Equação 4.3	3,20	1,36	5,14	2,43

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela G.2 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL. Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	5,10	2,53	2,57	1,21
Equação 4.2	10,83	3,41	4,47	2,43
Equação 4.3	5,06	2,30	2,20	1,24
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	5,24	2,50	2,67	1,19
Equação 4.2	10,47	3,26	4,31	2,26
Equação 4.3	5,21	2,28	2,22	1,17
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	6,11	2,31	3,33	1,41
Equação 4.2	8,03	2,29	3,29	1,41
Equação 4.3	6,17	2,19	2,45	0,93
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	6,68	2,12	3,86	1,48
Equação 4.2	4,96	1,95	1,65	0,77
Equação 4.3	6,95	2,22	4,30	1,76
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	3,71	1,47	3,75	1,91
Equação 4.2	4,15	1,92	4,12	1,91
Equação 4.3	3,92	1,05	3,33	1,73

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela G.3 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 1$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}}$ (%)	$\delta_{\text{médio}}$ (%)	$\zeta_{\text{máximo}}$ (%)	$\zeta_{\text{médio}}$ (%)
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	5,07	2,21	8,51	5,20
Equação 4.2	7,04	2,67	7,75	3,81
Equação 4.3	8,17	2,75	8,99	5,50
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	4,67	1,86	7,21	4,23
Equação 4.2	6,57	2,58	6,57	3,22
Equação 4.3	7,47	2,31	7,79	4,67
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	3,94	1,60	2,11	1,43
Equação 4.2	6,93	2,28	3,05	1,13
Equação 4.3	4,81	1,46	2,69	1,40
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	5,09	1,53	3,12	1,29
Equação 4.2	7,09	2,01	2,88	1,01
Equação 4.3	5,55	1,49	3,23	1,31
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	5,51	1,63	7,67	5,44
Equação 4.2	1,83	0,77	3,87	2,12
Equação 4.3	3,06	0,97	5,08	3,38

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.

Tabela G.4 - Erro máximo e médio para o modelo WSGG comparando com resultados LBL.

Distância entre as placas planas $L = 0,2$ m. Meio participante com concentração não homogênea.

Perfil de temperatura	$\delta_{\text{máximo}} (\%)$	$\delta_{\text{médio}} (\%)$	$\zeta_{\text{máximo}} (\%)$	$\zeta_{\text{médio}} (\%)$
	10% CO ₂ + 20% H ₂ O			
Equação 4.1	3,96	1,92	3,43	1,74
Equação 4.2	3,89	1,82	3,91	1,37
Equação 4.3	4,40	2,11	2,31	1,03
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-8}$				
Equação 4.1	4,13	1,89	3,14	1,64
Equação 4.2	3,76	1,75	3,61	1,25
Equação 4.3	4,57	2,07	2,13	0,98
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-7}$				
Equação 4.1	5,19	1,78	2,63	1,25
Equação 4.2	2,89	1,49	1,81	0,71
Equação 4.3	5,62	1,94	1,75	0,84
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-6}$				
Equação 4.1	6,19	1,72	3,54	1,37
Equação 4.2	5,15	1,44	1,93	0,70
Equação 4.3	6,63	1,89	3,95	1,77
10% CO ₂ + 20% H ₂ O + fuligem com $f_v = 1 \times 10^{-5}$				
Equação 4.1	3,24	1,01	1,89	0,82
Equação 4.2	4,77	1,27	2,41	0,64
Equação 4.3	3,70	0,93	1,87	0,78

δ =termo fonte radiante, ζ =fluxo de calor radiante.