

Elder Marino Mendoza Orbegoso

**Estudo Numérico da Radiação Térmica e sua
Interação com a Fuligem Formada na
Combustão Turbulenta de Combustíveis
Líquidos e Gasosos**

Tese de Doutorado

Tese de Doutorado apresentada ao programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica

Orientador : Prof. Luís Fernando Figueira da Silva
Co-Orientador: Dr. Ricardo Serfaty

Rio de Janeiro
Abril de 2013

Elder Marino Mendoza Orbegoso

**Estudo Numérico da Radiação Térmica e sua
Interação com a Fuligem Formada na
Combustão Turbulenta de Combustíveis
Líquidos e Gasosos**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

Dr. Ricardo Serfaty

Co-Orientador

Centro de Pesquisas – PETROBRAS

Prof. Andrés Fuentes

Universidad Técnica Federico Santa Maria de Chile – UTFSM

Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC

Prof. Guenther Carlos Krieger Filho

Universidade de São Paulo – USP

Prof. Angela Ourivio Nieckele

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico — PUC-Rio

Rio de Janeiro, 24 de Abril de 2013

Todos os direitos reservados. proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Elder Marino Mendoza Orbegoso

Formou-se Engenheiro Mecânico na Universidad Nacional de Trujillo – Peru. Fez mestrado em Engenharia Mecânica na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – Brasil. Atualmente, trabalha como pesquisador no Centro Técnico Científico da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – Brasil.

Ficha Catalográfica

Mendoza Orbegoso, Elder Marino

Estudo Numérico da Radiação Térmica e sua Interação com a Fuligem Formada na Combustão Turbulenta de Combustíveis Líquidos e Gasosos / Elder Marino Mendoza Orbegoso; orientador: Luís Fernando Figueira da Silva; co-orientador: Ricardo Serfaty. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Engenharia Mecânica, 2013.

v., 282 f: il. ; 29,7 cm

1. Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Mecânica – Tese. 2. Dinâmica dos fluidos computacional. 3. Combustão turbulenta não prémisturada. 4. Equação de transferência radiativa. 5. Teoria de Rayleigh. 6. Modelos de fase discreta. I. Figueira da Silva, Luís Fernando. II. Serfaty, Ricardo. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

A quens se encontram me aguardando na vida venidera: meu filho Gabriel Benjamín, meus avós Angel Marino e Floriza Consuelo, e meus tios Melver Marino e Maritza Luzmila.

Agradecimentos

A Deus por tudo o acontecido na minha vida.

A PUC-Rio, pela concessão de inscrição de pagamento no programa de Doutorado em Engenharia Mecânica.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio e ao Centro de Pesquisa da Petrobras, pela oportunidade de trabalhar no Projeto Conveniado “Desenvolvimento de Metodologia Baseada em CFD para Otimização de Queimadores Industriais”.

A meu orientador, o Professor Luis Fernando, graças a seus conhecimentos e ensinamentos e por ter acreditado em minha pessoa para trabalhar no desenvolvimento de projetos de pesquisa.

A meu Co-orientador Ricardo Serfaty, obrigado pelo suporte e pelas sugestões feitas, como responsável do Projeto Conveniado entre a PUC-Rio e a Petrobras, ao longo destes três anos.

A minha mãe Miriam Ofelia, fonte inesgotável de esforço e sacrifício, obrigado pelo amor, sabedoria e ajuda permanente em todas as etapas da minha vida.

A minha esposa Maica Carolin e meus filhos Andy Samuel, Franco Emiliano e Elder Gustavo; agradeço vocês pelo amor infinito que me concedem e pela muita paciência que vocês tiveram em todo este tempo.

A meu irmão, Oscar Salomón, obrigado pelo amor fraterno e por ser uma pessoa especial que inspira respeito e admiração.

A meus amigos, Américo Barbosa Cunha Jr., Andrea Carvalho dos Anjos, Fernando de Andrade Oliveira, Juan José Cruz Villanueva, Luís Enrique Alva Huapaya, Nattan Roberto Caetano, Paul Ortega Sotomayor, obrigado pelos momentos compartilhados ao longo de minha permanência na PUC-Rio.

Resumo

Mendoza Orbegoso, Elder Marino; Figueira da Silva, Luís Fernando; Serfaty, Ricardo. **Estudo Numérico da Radiação Térmica e sua Interação com a Fuligem Formada na Combustão Turbulenta de Combustíveis Líquidos e Gasosos**. Rio de Janeiro, 2013. 282p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O presente trabalho apresenta um estudo numérico da transferência de energia por radiação e sua interação com as propriedades radiantes cinzas e espectrais dos gases produtos da combustão e da fuligem que são formados em um processo de combustão turbulenta. Assim, utilizam-se sistemas de forno/-queimador que operam em regime de chama não pré-misturada de maneira a avaliar, através da dinâmica dos fluidos computacional (CFD), a influência que exercem os diversos modelos de propriedades radiantes sobre a representação da termoquímica do escoamento reativo. Com o objetivo de identificar as principais características e deficiências que apresentam cada um destes modelos, foram considerados dois cenários. O primeiro, correspondente a um problema de radiação unidimensional de um sistema homogêneo e não isotérmico onde são estudados, modelos de propriedades radiantes (i) disponíveis em um software comercial de CFD e (ii) aqueles que foram implementados neste trabalho. Além disso, foi empregado um código numérico que determina as propriedades radiantes espectrais de gases produtos da combustão e da fuligem através de uma abordagem de banda estreita. Para este fim, este código foi acoplado com o software de CFD. Em seguida, dois queimadores de porte laboratorial são empregados de forma a avaliar a capacidade preditiva dos modelos de propriedades radiantes: o primeiro queima propano gasoso e ar enriquecido com oxigênio e o segundo utiliza querosene líquido e oxigênio como reagentes. Dados experimentais de fluxo de calor radiante e de fração volumétrica da fuligem são utilizados para comparação com os resultados obtidos da simulação. Para ambas as configurações de queimador foi também estudado o modelo de Moss-Brookes para previsão da formação/consumo da fuligem. Os resultados obtidos demonstraram o bom desempenho da maioria dos modelos de propriedades radiantes estudados. Em particular, a abordagem de banda estreita foi o que melhor previu a radiação térmica. Além disso, a sua utilização com o modelo de Moss-Brookes levou à melhor previsão da fração volumétrica da fuligem.

Palavras-chave

Dinâmica dos fluidos computacional; Combustão turbulenta não prémisturada; Equação de transferência radiativa; Teoria de Rayleigh; Modelos de fase discreta;

Abstract

Mendoza Orbegoso, Elder Marino; Figueira da Silva, Luís Fernando (Advisor); Serfaty, Ricardo (Co-advisor). **Numerical study of the interaction between thermal radiation and soot formation in the turbulent combustion of liquid and gaseous fuels.** Rio de Janeiro, 2013. 282p. PhD Thesis – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This work presents a numerical study of radiation heat transfer and its interaction with gray and spectral radiation of combustion products and soot that are formed in a turbulent combustion process. Different burner/furnace systems operating in a non-premixed combustion regime were used in order to evaluate, through computational fluid dynamics (CFD), the influence of several radiant properties models. Aiming to identify the key features and shortcomings that exhibit each of these models, two scenarios were considered. The first corresponds to a 1-D radiation problem where radiative properties models of a homogeneous non isothermal system are studied as (i) available CFD commercial software and (ii) those implemented in this work. Moreover, a numerical code was used in order to determine, through a narrow band approach, the spectral radiative properties of soot and combustion products. For this purpose, this code was coupled with the CFD software. Then, two laboratory-scale burners are used to assess the predictive capacity of radiative properties models: the first, burning propane and enriched air oxygen, and the second uses kerosene and oxygen as reactants. Measurements of radiant heat flux and soot volumetric fraction are used for comparison with simulation results. For both configurations, the performance of the Moss-Brookes model for predicting the soot production was also studied. The results of this study demonstrated the good performance of the majority of the radiant properties models studied. Particularly, the narrow band approach was the model that provided the best thermal radiation prediction. Moreover, the combination of the narrow band approach with the Moss-Brookes model lead to the best prediction of soot volume fraction.

Keywords

Computational Fluid Dynamics; Non-Premixed Turbulent Combustion; Radiative Transfer Equation; Rayleigh Theory; Discrete Phase Models;

Sumário

1	Introdução	36
1.1	Motivação	36
1.2	Delimitação do Problema	41
1.3	Objetivo	43
1.4	Organização do trabalho	44
2	Revisão Bibliográfica	46
2.1	Estudos Experimentais de Queimadores Não Pré-Misturados	47
2.2	Estudos Numéricos de Queimadores Não Pré-Misturados	54
2.3	Estudos de Queimadores Desenvolvidos pela International Flame Research Foundation	68
2.4	Considerações Finais	72
3	Formulação Matemática e Modelos para a Descrição da Combustão Turbulenta em Queimadores	75
3.1	Equações de Transporte e de Estado que descrevem os Escoamentos Turbulentos Segundo a Abordagem Média de Reynolds	75
3.2	Modelos de Fechamento	77
3.3	Formulação Matemática do Transporte e Evaporação de Gotículas (<i>Droplets</i>) Segundo a Abordagem Euleriana-Lagrangiana	116
4	Descrição do Radcal e Estudo dos Modelos de Propriedades Radiantes de Gases Produtos da Combustão e da Fuligem	129
4.1	O Radcal como Ferramenta Complementar na Determinação da Propriedades Radiantes	130
4.2	Estudo das Propriedades Radiantes dos Produtos da Combustão e da Fuligem	141
4.3	Considerações Finais	164
5	Resultados do Estudo do Queimador de Endrud (2000)	167
5.1	Descrição da Geometria, Malha e Condições de Contorno	168
5.2	Resultados e Discussões	174
6	Resultados do Estudo Numérico do Queimador de "Spray" de Nakamura <i>et al.</i> (2011)	216
6.1	Geometria e da Malha do Queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011)	217
6.2	Condições de Operação e de Contorno	218
6.3	Resultados e Discussões	221
7	Conclusões e Recomendações	238
7.1	Conclusões	238
7.2	Recomendações para Trabalhos Futuros	242
	Referências Bibliográficas	244

A	Cinética Química das Reações de Combustão	256
A.1	Estado da Arte	256
A.2	Mecanismos de Cinética Química Detalhada	257
B	Dados de Entrada e Saída do Programa Radcal e Interface em UDF para o Acoplamento Radcal/Fluent TM	266
B.1	Parâmetros de Entrada	266
B.2	Parâmetros de Saída	269
B.3	Implementação da Interface em UDF para o Acoplamento entre o Radcal e o Fluent TM	271
C	Coeficiente de Absorção Global Mediante o Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) – Programação em UDF do modelo WSGGM(Mossi)	273
C.1	Função Definida Pelo Usuário (UDF) para o modelo WSGGM(Mossi)	273
D	Coeficiente de Absorção Espectral da Fuligem Segundo a Teoria de Rayleigh – Formulação e Programação em UDF	275
D.1	Teoria de Absorção/Espalhamento de Rayleigh para o Cálculo das Propriedades Radiantes da Fuligem	275
D.2	Cálculo do Coeficiente de Absorção Equivalente da Fuligem Através da Teoria de Rayleigh e Aplicando-se a Metodologia de Discretização Valor Médio	275
D.3	Funções Definidas Pelo Usuário (UDF)	277
E	Levantamento das Curvas de Vaporização para o n-heptano de n-dodecano(querosene)	280

Lista de figuras

1.1	Esquema simplificado de um sistema de combustão de fornos e caldeiras.	38
2.1	Diagrama esquemático da bancada experimental e do queimador "twin-fluid" (Fisher e Moss, 1998).	47
2.2	Perfis de fração de mistura, temperatura, fração volumétrica da fuligem e irradiância obtidos por Fisher e Moss (1998) no queimador de querosene líquido e ar a 2 bar.	48
2.3	Diagrama esquemático do (a) queimador Elco-Mat RPD60 e, (b) forno de teste VUB (Vrije Universiteit Brussel) de 20 MW (Colson <i>et al.</i> , 1999).	49
2.4	Evolução da temperatura e espécies químicas estáveis obtida por Colson <i>et al.</i> (1999) como função de distância radial, r/D , para a posição longitudinal $x/D = 0, 26$. L. esquerdo: Perfis de CO_2 (\square), $O_2/2$ (\circ), $NOx \times 10^3$ (\triangle) e T (\diamond). L. direito: Perfis de $CO/50$ (\circ), C_2H_2 (\triangle), C_2H_4 (\square), $CH_4/200$ (\diamond) e $C_2H_6/10$ (+).	50
2.5	Diagrama esquemático, fotografias do funcionamento e dados do queimador de Köhler <i>et al.</i> (2011).	51
2.6	Fração volumétrica da fuligem obtidos do queimador de Köhler <i>et al.</i> , (2011). (a) perfil longitudinal no eixo de simetria, (b) perfil radial, (c) campo instantâneo e, (d) campo médio.	52
2.7	Diagrama esquemático (a) do sistema de fornecimento de reagentes e, (b) dos equipamentos utilizados na experimentação: 1.- tanque de oxigênio, 2.- tanque de Nitrogênio, 3.- tanque de combustível líquido, 4.- medidor de vazão, 5.- queimador 6.- atomizador twin-fluid, 7.- câmara de alta pressão, 8.- válvula de alívio, 9.- válvula de controle de pressão, 10.- janela de quartzo, 11.- laser de Argônio, 12.- fibra óptica, 13.- transmissor PDA, 14.- Receptor PDA, 15.- Processador de sinais, 16.- osciloscópio, 17.- PC para PDA, 18. PC para travessia e, 19.- trilho óptico. (Nakamura <i>et al.</i> , 2011).	52
2.8	Visualização de chamas em "spray" (superior) e de gotículas de querosene (inferior) para faixas pressões entre 0,1 e 1,0 MPa (Nakamura <i>et al.</i> , 2011).	53
2.9	Distribuição longitudinal de (a) velocidade longitudinal das gotículas de querosene, (b) diâmetro médio Sauter e (c) temperatura média do gas, para pressões de 0, 1, 0,3, 0,5, 0,7 e 1,0 MPa (Nakamura <i>et al.</i> , 2011).	54
2.10	Ilustração esquemática do injetor protótipo de 200 kW (Spangelo, 2004).	55
2.11	Contornos da componente longitudinal de velocidade igual a zero obtidos empregando-se os modelos de turbulência (a) $k-\varepsilon$, (b) RNG $k-\varepsilon$, (c) RSM, (Spangelo, 2004). As siglas CRZ e CTRZ significam, respectivamente, à zona de recirculação no canto [Corner Recirculation Zone] e à zona de recirculação toroidal no centro [Central Toroidal Recirculation Zone].	56

2.12	Campos de temperatura obtidos com os modelos de combustão (a) Eddy Dissipation, (b) PDF em equilíbrio, (c) PDF em elemento de chama (Spangelo, 2004).	57
2.13	Modelo geométrico de uma câmara de combustão com um queimador de dois estágios, e as 27 combinações radial/axial e tangencial dos injetores secundários (Sarlej <i>et al.</i> , 2007).	58
2.14	Campo de temperatura obtido nos caso do arranjo dos bicos injetores secundários que fornecem valores de <i>NO</i> (a) mínimo e (b) máximo (Sarlej <i>et al.</i> , 2007).	59
2.15	Perfis longitudinal e radial da fração volumétrica da fuligem obtidos com modelos de Moss-Brookes e Moss Brookes estendido (Wen <i>et al.</i> , 2003).	59
2.16	Diagrama esquemático do queimador industrial de Wu e Fricker (1976) e resultados de temperatura e fluxo de calor radiante obtidos por Cumber e Fairweather (2005).	60
2.17	Variação longitudinal e radial do fluxo de calor radiante no queimador laboratorial de Baillie <i>et al.</i> (1998).	62
2.18	Diagrama esquemático do queimador de Endrud (2000).	63
2.19	Casos analisados por Wang <i>et al.</i> (2005) no estudo da sensibilidade da fuligem sobre a radiação usando o método dos momentos, e levando em conta os seguintes parâmetros: mecanismo de crescimento de superfície, fator estérico e acoplamento radiação-fuligem.	63
2.20	Comparação dos resultados de simulação de Wang <i>et al.</i> (2005) com os dados experimentais de Wang <i>et al.</i> (2002) do fluxo de energia radiante ao longo da parede longitudinal do queimador de Endrud (2000).	64
2.21	Campos de temperatura obtidos mediante a simulação numérica (a) com radiação e (b) sem radiação (Bidi <i>et al.</i> , 2008).	65
2.22	Perfis longitudinais da temperatura e frações mássicas das espécies majoritárias no centro do queimador (Bidi <i>et al.</i> , 2008).	66
2.23	Vista esquemática do forno IFRF (Mahmud e Sangha, 2010).	67
2.24	Comparação entre os perfis radiais de temperatura preditos por Mahmud e Sangha (2010) e medidos por Michelfelder e Lowes (1974). As linhas tracejadas correspondem ao modelo $k - \varepsilon$ e as linhas contínuas ao modelo tensor de Reynolds (STR).	68
2.25	Configuração geral do queimador para forno de alumínio fundido e resultados numéricos do fluxo de calor por radiação e total, obtidos com (a) gás natural e (b) óleo combustível (Nieckele <i>et. al.</i> , 2011).	69
2.26	Diagrama esquemático do forno CAGCT e do queimador CGRI (Poirier <i>et. al.</i> , 2006).	70
2.27	Comparação entre os resultados experimentais (esquerda) e numéricos (direita) do processo da combustão turbulenta no plano transversal localizado a $x = 215$ mm a jusante do queimador CGRI (Fleck <i>et. al.</i> , 2003).	71
2.28	Lado esquerdo: Diagrama esquemático da câmara de combustão. Lado direito: (a) fotografia da chama, e distribuição da fração de mistura de oxidação obtida por (b) Modelo Elemento de Chama e, (c) Modelo Eddy Break-Up (Weihong e Wlodzimierz, 2006).	72

2.29	Forno de Teste HiTAC (a) Lado esquerdo.- Fotografia do equipamento e diagrama esquemático do domínio computacional, (b) Lado direito.- Resultados calculados e medidos de concentração de oxigênio (a $x = 0$ e $z = 0,6$) e de formação de NO_x na saída do queimador nas configurações de HCR (Weihong e Wlodzimierz, 2006).	73
3.1	Diagrama esquemático de chamas não pré-misturada em contrafluxo, mostrando o processo de mistura entre combustível e oxidante (Law, 2006).	82
3.2	Fotografia típica obtida através de microscópio de transmissão eletrônica que identifica a natureza física da fuligem em chamas de ar/acetileno (Koylu and Faeth 1994).	87
3.3	Método de ordenadas discretas em um octante de uma esfera unitária (a) S_2 , (b) S_4 e (c) S_6 .	100
3.4	Volume de controle usado na representação tridimensional do modelo de ordenadas discretas.	102
3.5	Interação entre ondas electormagnéticas e partículas esféricas (Modest, 2003).	110
3.6	Função Fase para os espalhamentos Rayleigh e isotrópico (Siegel, 2002). Neste gráfico β corresponde ao ângulo polar θ .	114
3.7	Comparação do índice de refração determinado por (a) — Chang e Charalampopoulos (1990) (b) - - - Lee e Tien (1980), e, (c) -.-.- Dalzell and Sarofim (1969). [Extraído de Chang e Charalampopoulos (1990)].	115
4.1	Estrutura do Programa Radcal (Grosshandler, 1993).	133
4.2	Diagrama esquemático do problema unidimensional de placa plana.	142
4.3	Malha e condições de contorno empregados na simulação.	143
4.4	Resultado típico de cálculo em CFD da radiação de gases confinados entre placas paralelas e infinitas (a) temperatura do meio, T , (b) coeficiente de absorção global, a , e (c) radiação incidente total, G .	144
4.5	Influência do número de discretização de ângulos sólidos, $NAS = N_\phi \times N_\theta$, no divergente do fluxo de calor radiante em placas planas paralelas, dq_r/dy .	146
4.6	Divergente do fluxo de calor radiante em placas plana paralelas. Resultados da simulação de radiação de gases produtos da combustão empregando-se os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi), Radcal e Linha por Linha de Mossi (2011).	148
4.7	Divergente do fluxo de calor radiante obtidos com os modelos (a) Radcal e (b) WSGGM(Smith), para comprimentos médio do feixe de $1,5L$ e $1,8L$. O modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$ é também apresentado para fins de referência.	150
4.8	Radiação incidente obtidos com os modelos (a) Radcal e (b) WSGGM(Smith), para comprimentos médio do feixe iguais a $1,0L$, $1,5L$ e $1,8L$. O modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$ é também apresentado para fins de referência.	151

- 4.9 Coeficiente de absorção global obtidos com os modelos (a) Radcal e (b) WSGGM, para comprimentos médio do feixe iguais a $1,0L$, $1,5L$ e $1,8L$. O modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$ é também apresentado para fins de referência. 151
- 4.10 Divergente do fluxo de calor radiante de gases produtos da combustão em placa plana paralela empregando-se o modelo Radcal. 154
- 4.11 Intensidade de radiação espectral e coeficiente de absorção espectral obtidos do Radcal para uma mistura de gases homogênea e isotérmica empregando-se a abordagem de Modelo Gás Cinza. Coordenadas (a) Natural e (b) Logaritmica. 155
- 4.12 Intensidade de radiação espectral e coeficiente de absorção espectral obtidos do Radcal para uma mistura de gases homogênea e isotérmica mediante a abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) para $N_b = 2$ faixas de comprimento de onda (a) $[1 - 12, 5] \mu\text{m}$, (b) $[12, 5 - 200] \mu\text{m}$. 156
- 4.13 Divergente do fluxo de calor radiante da mistura de gases produto da combustão e fuligem obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. 158
- 4.14 Radiação Incidente da mistura de gases produto da combustão e fuligem obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. 159
- 4.15 Coeficiente de absorção global da mistura de gases produto da combustão e fuligem obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. 160
- 4.16 Divergente do fluxo de calor radiante da mistura de gases produtos da combustão e fuligem, obtido do modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, para os casos em que o espalhamento é e não é levado em conta. (a) $Y_{soot} = 0,01$ e (b) $Y_{soot} = 0,001$. 162
- 4.17 Radiação incidente da mistura de gases da mistura de gases produtos da combustão e fuligem, obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, para os casos em que o espalhamento é e não é levado em conta. (a) $Y_{soot} = 0,01$ e (b) $Y_{soot} = 0,001$. 163
- 4.18 Coeficientes global de absorção e de espalhamento da mistura de gases produtos da combustão e fuligem, obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, para os casos em que o espalhamento é e não é levado em conta. (a) $Y_{soot} = 0,01$ e (b) $Y_{soot} = 0,001$. 164
- 5.1 Diagrama esquemático do queimador empregado nas simulações (Wang *et al.*, 2005). 168
- 5.2 Domínio computacional desenvolvido nos softwares Design-Modeling e Meshing-Grid empregado nas simulações em Fluent (a) Disposição Frontal, (b) Disposição em perspectiva, e, (c) Detalhe da malha na região de entrada do propano ao queimador 170
- 5.3 Esquema representativo no cálculo da fração volumétrica da fuligem equivalente, F_V^* , a partir de resultados de coeficiente de absorção da fuligem, a_{soot} . 175
- 5.4 Comparação do campo de temperatura obtidos pelos modelos (a) DOM-WSGGM(Smith) e P1-FSK, e, (b) e DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin e P1-FSK&MM. 178

- 5.5 Comparação do campo de fração mássica de (a) dióxido de carbono, e (b) vapor de água, obtidos na presente simulação com os modelos DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin e P1-FSK&MM. 179
- 5.6 Comparação dos resultados numéricos de Wang *et al.* (2005) ao longo do eixo de simetria, com aqueles obtidos com os modelos DOM-WSGGM(Smith) e DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin. (a) Temperatura, (b) fração mássica de dióxido de carbono e, (c) fração mássica de vapor de água. 180
- 5.7 Comparação do modelo WSGGM(Smith) e do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin com os resultados experimentais e numéricos de Wang *et al.* (2005) referente ao (a) fluxo de calor radiante na parede do queimador, $q_{r,P}$, e, (b) fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* . 181
- 5.8 Resultado do acoplamento do modelo elementos de chama não adiabático com o conjunto de modelos DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin. Campos de (a) fração volumétrica da fuligem, f_V , e das frações molares do (b) acetileno, $X_{C_2H_2}$, e, (c) hidroxila, X_{OH} . 183
- 5.9 Balanço da taxa de geração de fração mássica de fuligem resultante da Equação (3-58) no modelo de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999). Campos de (a) fração volumétrica da fuligem, f_V , e taxas de (b) nucleação, $(\frac{dM}{dt})_{inception}$, (c) crescimento da superfície, $(\frac{dM}{dt})_{surf,growth}$, (d) oxidação, $(\frac{dM}{dt})_{oxidation}$, e, (e) líquido $\frac{dM}{dt}$, da fuligem. 185
- 5.10 Campos de temperaturas do escoamento obtidos com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K. 186
- 5.11 Radiação incidente, G , obtidos com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K. 191
- 5.12 Coeficiente de absorção global, a , obtidos com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K. 192
- 5.13 Fração volumétrica da fuligem, f_V , obtidas com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (b) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K. 193
- 5.14 Fluxo de calor radiante na parede longitudinal do queimador de Endrud (2000) calculado com os modelos, (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ e 400 K, e (b) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ e 400 K. 193
- 5.15 Fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , do queimador de Endrud (2000) calculado com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e para $T_P = 300$ e 400 K. 194

5.16	Campos de temperatura e radiação incidente obtidos da simulação usando o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para (a) $T_P = 300$ K, e, (b) $T_P = 700$ K.	195
5.17	Campos de fração mássica de CO_2 e coeficiente de absorção obtidos da simulação usando o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para (a) $T_P = 300$ K, e, (b) $T_P = 700$ K.	195
5.18	Fluxo de calor radiante na parede longitudinal do queimador de Endrud (2000) calculado com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para $T_P = 300$ e 700 K.	196
5.19	Campos de temperaturas do escoamento obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	198
5.20	Radiação incidente do escoamento obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	200
5.21	Fração mássica de dióxido de carbono obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	201
5.22	Fração volumétrica de fuligem obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	202
5.23	Coeficiente de absorção global obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	202
5.24	Comparação com resultados experimentais e numéricas de Wang <i>et al.</i> (2005) ao longo do queimador de Endrud (2000) dos resultados obtidos com modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal, no que diz respeito (a) ao fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, e (b) à fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* .	203
5.25	Campos de temperatura do escoamento, T , obtidos com os modelos (a) WSGGM de Smith <i>et al.</i> (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.	206
5.26	Coeficiente de absorção dos gases produtos da combustão, a_g , obtido com os modelos (a) WSGGM de Smith <i>et al.</i> (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.	206
5.27	Razão das pressões parciais, p_{H_2O}/p_{CO_2} obtidos com o modelo elementos de chama não adiabático acoplado com os modelos ordenadas discretas e (a) WSGGM de Smith <i>et al.</i> (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.	207
5.28	Radiação incidente, G , obtida com os modelos (a) WSGGM de Smith <i>et al.</i> (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.	208
5.29	Fração mássica de vapor de água, Y_{H_2O} , obtida com os modelos (a) WSGGM de Smith <i>et al.</i> (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.	209

5.30	Fluxo de calor radiante ao longo da parede longitudinal do queimador, $q_{r,P}$, calculados com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal. Comparação com dados experimentais de Wang <i>et al.</i> (2005).	209
5.31	Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de fração volumétrica de fuligem obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin e (b) Radcal.	211
5.32	Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de coeficiente de absorção global obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin e (b) Radcal.	211
5.33	Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de radiação incidente obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, e, (b) Radcal.	212
5.34	Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de temperatura obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, e, (b) Radcal.	213
5.35	Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de fração mássica do dióxido de carbono obtidos da simulação com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, e, (b) Radcal.	214
5.36	Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. (a) Fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, e (b) fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* .	215
6.1	Diagrama esquemático do queimador (a) sistema de fornecimentos e(b) bancada experimental PDA (Nakamura <i>et al.</i> , 2011).	217
6.2	Domínio computacional do queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011) empregado nas simulações. (a) Vista global, (b) Detalhe da malha na região de entrada dos reagentes.	218
6.3	Fração mássica da fuligem e temperatura obtidos da simulação do queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011) a 0,1 MPa. O campo de temperatura foi comparado com imagens de chama.	222
6.4	Fração mássica da fuligem e temperatura obtidos da simulação do queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011) a 0,3 MPa. O campo de temperatura foi comparado com imagens de chama.	223
6.5	Campos de componente longitudinal de velocidade, temperatura e pressão obtidos para o queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011) para 0,1 MPa.	224
6.6	Campos de componente longitudinal de velocidade, temperatura e pressão obtidos pela simulação do queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011) para 0,3 MPa.	225
6.7	Distribuição radial de temperatura para z iguais a (a) 66,9 mm e (b) 111,5 mm, obtidos do experimento de Nakamura <i>et al.</i> (2011) e da simulação numérica para 0,1 MPa. .	226
6.8	Distribuição radial de temperatura para z iguais a (a) 15,45 mm e (b) 51,5 mm, obtidos do experimento de Nakamura <i>et al.</i> (2011) e da simulação numérica. Para 0,3 MPa	227

6.9	Operação do queimador a 0,1 MPa. (a) Fração mássica da fuligem calculada e distribuição radial da fração volumétrica da fuligem obtida para (b) 66,9 mm e (c) 111,5 mm.	228
6.10	Operação do queimador a 0,3 MPa. (a) Fração mássica da fuligem calculada e distribuição radial da fração volumétrica da fuligem obtida para (b) 30,9 mm e (c) 51,5 mm.	229
6.11	Operação do queimador a 0,1 MPa. (a) Campo simulado de radiação global incidente, G , com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e (b) Comparação qualitativa ao longo da parede, entre a radiação global incidente, G , obtida da simulação, e a radiação espectral incidente, G_λ , obtida nos experimentos de Nakamura <i>et al.</i> (2011).	230
6.12	Operação do queimador a 0,3 MPa. a) Campo calculado de radiação global incidente, G , com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e (b) Comparação qualitativa ao longo da parede, entre a radiação global incidente, G , obtido da simulação, e a radiação espectral incidente, G_λ , obtida nos experimentos de Nakamura <i>et al.</i> (2011).	232
6.13	Operação do queimador a 0,1 MPa. Visualização das gotículas obtidos, (a) dos experimentos de Nakamura <i>et al.</i> (2011) e (b) da simulação numérica.	233
6.14	Operação do queimador a 0,3 MPa. Visualização das gotículas obtidos, (a) dos experimentos de Nakamura <i>et al.</i> (2011) e (b) da simulação numérica.	234
6.15	Distribuição do diâmetro gota calculada para (a) $z = 10$ mm, e (b) $z = 50$ mm, na operação do queimador a 0,1 MPa.	235
6.16	Distribuição do diâmetro de gota para (a) $z = 10$ mm, e (b) $z = 50$ mm, obtidos dos resultados experimentais de Nakamura <i>et al.</i> (2008), na operação do queimador a 0,1 MPa.	236
6.17	Comparação entre os resultados de simulação e os dados experimentais de Nakamura <i>et al.</i> (2008) para 0,1 MPa: (a) velocidade longitudinal e (b) diâmetro médio das gotículas de combustível líquido.	236
6.18	Comparação entre os resultados de simulação e os dados experimentais de Nakamura <i>et al.</i> (2008) para 0,3 MPa: (a) velocidade longitudinal e (b) diâmetro médio das gotículas de combustível líquido.	237
B.1	Discretização considerada pelo programa Radcal para: (a) sistemas não homogêneos e (b) sistemas homogêneos e isotérmicos.	267
B.2	Dados de saída do RCOUT.dat fornecido pela simulação do Radcal para as condições iniciais descrito pela Tabela A.1 (Grosshandler, 1993).	270
B.3	Transmitância espectral de um sistema de 0,5 m de diâmetro a 1 atm e 320 K, para uma mistura de gases composto por CO_2 , H_2O , CH_4 , CO , e fuligem (Grosshandler, 1993).	270

D.1	Curva do coeficiente de absorção espectral da fuligem segundo a teoria de espalhamento Rayleigh e seu equivalente aplicando a abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB).	276
D.2	Comparação entre os valores analíticos e de discretização de $C_\lambda(\lambda)$ e $K(\lambda) = C_\lambda(\lambda)/\lambda$ como função do comprimento de onda.	278
E.1	Curvas de pressão de saturação do n-heptano e do n-dodecano.	281

Lista de tabelas

3.1	Quadraturas S_N sobre um octante (Jamaluddin e Smith, 1988).	101
3.2	Coeficientes polinomiais de Smith <i>et al.</i> (1982) utilizados no modelo WSGGM.	107
3.3	Coeficientes polinomiais de Mossi (2011) utilizados no modelo WSGGM.	107
3.4	Formulações aplicadas segundo o tipo de partícula e processo de transferência de massa e calor.	122
4.1	Bandas Moleculares Incluídas no Radcal (Grosshandler, 1993).	132
4.2	Tempo de processamento como função do número ordenadas discretas $NAS = N_\phi \times N_\theta$.	146
4.3	Tempo de processamento obtido com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal.	149
4.4	Descrição dos casos simulados para o estudo da influência da separação das faixas de comprimento de onda e do tipo de coeficiente de absorção.	153
4.5	Resultado da simulação em Radcal aplicando-se as abordagens de Modelo de Gás Cinza (GGM) e Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) para uma problema de radiação unidimensional de uma mistura homogênea e isotérmica.	156
4.6	Tempo de processamento associado aos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal.	161
5.1	Condições de contorno utilizada na simulação do queimador de Endrud (2000).	172
5.2	Constantes do modelo Moss-Brookes empregados para simulação do queimador de Endrud (2000).	173
5.3	Balanco térmico nos contornos obtido com modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.	188
5.4	Taxa de transferência de calor por radiação nos contornos obtidos com modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) DWSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.	189
5.5	Propriedades médias na saída do queimador Endrud (2000) fornecidos pelos modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.	190
5.6	Balanco térmico na parede longitudinal do queimador obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e para temperaturas da parede, T_P , de (a) 300 K, e, (b) 700 K. Estes resultados são comparado com aquele do experimento de Wang <i>et al.</i> (2002)	197

5.7	Taxas de transferência de energia sensível na parede longitudinal e temperatura média na saída do Queimador de Endrud (2000) obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	199
5.8	Propriedades máximas do escoamento obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.	199
6.1	Condições de contorno utilizadas nas simulações do queimador de Nakamura <i>et al</i> (2011).	219
6.2	Constantes do modelo Moos-Brookes empregados para simulação do queimador de Nakamura <i>et al.</i> (2011).	220
B.1	Dados de entrada típicos do arquivo RC.dat para o caso de um sistema isotérmico e homogêneo (Grosshandler, 1993).	268
B.2	Dados de entrada típicos do arquivo RC.dat para o caso de um sistema não-isotérmico (Grosshandler, 1993).	268
D.1	Discretização “valor médio”. Valores de $C_{o,j}$ e K_j aplicados à UDF para cada faixa de comprimento de onda.	277
E.1	Parâmetros empíricos da Equação de Antoine para o n-heptano e o n-dodecano obtidos do trabalho de Williamham <i>et al.</i> (1945).	280
E.2	Temperaturas de ebulição do n-heptano e do n-dodecano para 0, 1 e 0, 3 MPa, obtidas das formulações de Sazhin (2006) e dos dados reportados pelo NIST [Williamham <i>et al.</i> (1945)].	282

Nomenclatura

Caracteres Latinos

a	Raio de uma partícula ou gotícula esférica (μm).
a	Coeficiente de absorção cinza do meio participante ($1/\text{m}$).
a_g	Coeficiente de absorção cinza do gás como meio participante ($1/\text{m}$).
a_{soot}	Coeficiente de absorção cinza da fuligem como meio participante ($1/\text{m}$).
$a_{\epsilon,i}$	Fator peso da emissividade o i -ésimo gás cinza.
a_E	Coeficiente de absorção/emissão médio efetivo ($1/\text{m}$).
a_I	Coeficiente de absorção média incidente ($1/\text{m}$).
a_P	Coeficiente de emissão média de Planck ($1/\text{m}$).
a_{Geom}	Coeficiente médio geométrico ($1/\text{m}$).
a_{Patch}	Coeficiente de Patch ($1/\text{m}$).
a_λ	Coeficiente de absorção espectral do meio participante ($1/\text{m}$).
$a_{\lambda,g}$	Coeficiente de absorção espectral do gas ($1/\text{m}$).
$a_{\lambda,soot}$	Coeficiente de absorção espectral da fuligem ($1/\text{m}$).
\vec{a}_p	Vetor aceleração de uma gotícula (m/s^2).
A	Área de uma superfície (m^2).
A_o, A_s	Coeficientes relativos ao modelo $k-\epsilon$ realizável.
A_k	Fator pre-exponencial da k -ésima reação elementar direta.
A_p	Área da seção transversal de uma gotícula (m^2).
\tilde{b}_{nuc}^*	Conc. dos núcleos radicais de fuligem normalizada a 10^{15} mol/part.
b_1, b_T	Constantes do modelo de Sazhin.
$b_{\epsilon,ij}$	j -ésimo coeficiente polinomial do i -ésimo gás cinza.
c	Distância entre partículas (μm).

c	Velocidade da luz (m/s).
c_p	Calor específico a pressão constante do fluido (J/kg).
$c_{p,p}$	Calor específico a pressão constante da gotícula (J/kg).
$c_{p,\infty}$	Calor específico a pressão constante da fase contínua (J/kg).
C	Coefficiente da função fase.
C_1, C_2	Coefficientes relativos ao modelo k- ε realizável.
C_s, C_t	Constantes de Talbot.
C_D	Coefficiente de arrasto.
$C_{D,esf}$	Coefficiente de arrasto de gotículas de forma esférica.
$C_{i,s}$	Concentração de vapor da i -ésima espécie na superfície da gotícula (kmol/m ³).
$C_{i,\infty}$	Concentração de vapor da i -ésima espécie no meio contínuo (kmol/m ³).
C_L	Constante do modelo k- ε segundo a abordagem de rastreamento estocástico.
C_{abs}	Seção transversal de absorção (m ²).
C_{ext}	Seção transversal de extinção (m ²).
C_{sca}	Seção transversal de espalhamento (m ²).
C_{oxid}	Fator de escala da taxa de oxidação da fuligem.
C_α	Constante associada à taxa de nucleação da fuligem.
C_β	Constante associada à taxa de coagulação da fuligem.
C_γ	Fator de escala do crescimento da superfície da fuligem.
C_μ	Fator empírico na relação Prandtl-Kolmogorov.
C_χ	Constante do modelo elemento de chama [<i>Flamelet</i>].
C_ω	Constante do consumo da fração mássica da fuligem devido à oxidação.
d	Diâmetro interno do injetor (m).
d_p	Diâmetro de uma partícula ou gotícula (m).
D	Diâmetro interno do queimador (m).

D	Coeficiente de difusão molecular das espécies químicas (m^2/s).
$D_{i,m}$	Coeficiente de difusão do vapor no volume [<i>bulk</i>] (m^2/s).
$D_{T,p}$	Coeficiente de termoforese.
E_k	Energia de ativação da k -ésima reação elementar direta.
$f_{v,0}$	Fração de compostos voláteis na gotícula.
f_V	Fração volumétrica da fuligem.
F_V^*	Fração volumétrica equivalente da fuligem.
F_D	Frequência de arrasto ($1/\text{s}$).
\vec{F}	Vetor forças adicionais (N).
\vec{F}_{tf}	Força de termoforese (N).
g_i	Aceleração da gravidade na direção do i -ésimo componente de \vec{x} (m/s^2).
\vec{g}	Vetor aceleração da gravidade (m/s^2).
G	Radiação incidente total (W/m^2).
G_λ	Radiação incidente espectral ($\text{W}/\text{m}^2 \mu\text{m}$).
h	Coeficiente de transferência de calor por convecção ($\text{W}/\text{m}^2\text{K}$).
h_{ad}	Entalpia total em sistema adiabático (J).
$h_{fg,p}$	Entalpia [calor latente] de vaporização da gotícula (J).
h_F	Entalpia do combustível (J).
h_O	Entalpia do oxidante (J).
h_t	Entalpia total (J).
i_1, i_2	Intensidades polarizadas.
I	Intensidade de radiação total ($\text{W}/\text{m}^2\text{sr}$).
I_b	Intensidade de radiação total emitida por um corpo negro ($\text{W}/\text{m}^2\text{sr}$).
I_λ	Intensidade de radiação espectral ($\text{W}/\text{m}^2\text{sr}\mu\text{m}$).
$I_{b,\lambda}$	Intensidade de radiação espectral que emite um corpo negro ($\text{W}/\text{m}^2\text{sr}\mu\text{m}$).

$I_{\lambda,P}$	Intensidade de radiação espectral da parede isotérmica (W/m ² srμm).
\mathcal{I}_t	Intensidade turbulenta.
k_c	Coeficiente de transferência de massa (m/s).
k	Condutividade térmica do fluido (W/m K).
k_p	Condutividade térmica da gotícula como elemento discreto (W/m K).
k_∞	Condutividade térmica da fase contínua (W/m K).
k_k^f, k_k^b	Coeficientes direto e reverso de velocidade da k -ésima reação.
K_n	Número de Knudsen.
Ke_k	Constante de equilíbrio da k -ésima reação elementar.
\tilde{k}	Energia cinética turbulenta (m ² /s ²).
l	Expoente de nucleação no modelo Moss-Brookes.
l_t	Comprimento integral característico da turbulência.
L	Distância de separação entre as placas planas (m).
L_m	Comprimento médio do feixe (m).
\mathcal{L}	Escala de comprimento integral do turbilhão (m).
m	Expoente da taxa de crescimento de superfície no modelo Moss-Brookes.
m	Índice complexo de refração.
m_k	Expoente da temperatura da k -ésima reação elementar direta.
m_p	Massa atual de uma gotícula (kg).
$m_{p,0}$	Massa inicial de uma gotícula (kg).
\dot{m}_F	Vazão mássica de combustível.
\dot{m}_{Ox}	Vazão mássica de oxidante.
M_P	Massa molecular de uma partícula incipiente de fuligem (kg/kmol).
\overline{M}_{soot}	Concentração mássica média da fuligem (kg/m ³).
\overline{MW}	Peso molecular de uma mistura de fase contínua (kg/kmol).

\overline{MW}_i	Peso molecular i -ésima espécie química (kg/kmol).
\overline{MW}_p	Peso molecular da gotícula (kg/kmol).
Ma	Número de Mach.
\mathcal{M}_i	Símbolo químico da espécies i .
n	Parte real do índice de refração.
n	Expoente da taxa de crescimento de superfície no modelo Moss-Brookes.
\vec{n}	Vetor unitário normal à uma superfície.
N	Número de espécies químicas.
N_A	Número de Avogadro [$6,022045 \times 10^{23}$ part/mol].
N_g	Número de gases cinzas no modelo WSGGM.
N_{norm}	Fator de conversão, igual a 10^{15} mol/part de fuligem.
\overline{N}_{nuc}	Concentração média das partículas de fuligem dos núcleos radicais (part/m ³).
N_p	Número de gotículas dentro de um volume de controle.
\dot{N}_i	Fluxo molar de vapor da i -ésima espécie (kmol/m ² s).
Nu	Número de Nusselt.
p	Pressão (Pa).
\bar{p}	Pressão média (Pa).
p_{sat}	Pressão de vapor saturado da gotícula (Pa).
Pr	Número de Prandtl.
\mathcal{P}	Produção da energia cinética turbulenta.
q	Parte imaginária do índice de refração.
q_r	Fluxo total de calor por radiação normal à superfície (W/m ²).
\dot{q}_k	Taxa de progresso da k -ésima reação elementar.
\dot{q}_{ik}	Taxa de conversão da i -ésima espécie na k -ésima reação elementar.
\vec{q}_r	Vetor fluxo total de calor por radiação (W/m ²).
Q_{abs}	Fator de eficiência referente à absorção.

Q_{ext}	Fator de eficiência referente à extinção.
Q_{sca}	Fator de eficiência referente ao espalhamento.
$Q(\vec{x}, t)$	Propriedade qualquer do escoamento.
$\overline{Q(\vec{x}, t)}$	Média temporal da propriedade $Q(\vec{x}, t)$.
$Q'(\vec{x}, t)$	Flutuação temporal da propriedade $Q(\vec{x}, t)$.
$\dot{Q}_{r,P}$	Taxa de transferência de calor por radiação transferida à parede (W).
$\dot{Q}_{T,P}$	Taxa de transferência de calor total transferida à parede (W).
\vec{r}	Vetor posição (m).
\vec{r}_P	Vetor posição da parede (m).
\mathcal{R}_0	Parâmetro associado ao coeficiente de espalhamento.
R	Constante universal dos gases perfeitos (kJ/kmol K).
$\overline{\mathcal{R}}_{soot}$	Taxa de produção/geração de fuligem.
$\overline{\mathcal{R}}_{nuc}^*$	Taxa de produção/geração dos núcleos radicais de fuligem.
Re_d	Número de Reynolds baseado no diâmetro e velocidade relativa de uma gotícula.
Re_t	Número de Reynolds turbulento.
s	Razão entre frações mássicas oxidante/combustível na estequiometria.
s	Caminho óptico (m).
\vec{s}	Vetor unitário na direção do espalhamento (m).
\vec{s}'	Vetor unitário na direção da radiação incidente (m).
S	Módulo do tensor taxa de deformação média.
S_1, S_2	Funções de amplitude complexa.
\tilde{S}_{ij}	Tensor da taxa de deformação média.
Sc	Número de Schmidt.
Sh	Número de Sherwood.
\overline{S}_1	Termo fonte da equação de conservação da massa resultante da interação interfásica.

\overline{S}_{ht}	Termo fonte da equação de conservação de energia resultante da interação interfásica.
\overline{S}_r	Termo fonte da equação de conservação de energia como resultado da radiação térmica.
\overline{S}_{ui}	i-ésimo termo fonte da equação de conservação de quantidade de movimento produto da interação interfásica.
\overline{S}_Z	Termo fonte da equação de conservação da fração de mistura média.
$\overline{S}_{Z''2}$	Termo fonte da equação de conservação da variância da fração de mistura.
t	Tempo (s).
t_0	Tempo inicial (s).
T	Temperatura instantânea do fluido (K).
T_{bp}	Temperatura de ebulição do líquido (K).
T_p	Temperatura de uma gotícula (K).
T_P	Temperatura de contorno [parede] (K).
T_{vap}	Temperatura de evaporação do líquido (K).
T_α	Temperatura de ativação da nucleação da fuligem (K).
T_γ	Temperatura de ativação do crescimento da fuligem (K).
T_∞	Temperatura local da fase contínua (K).
\tilde{T}	Temperatura média do fluido (K).
\tilde{T}_{saida}	Temperatura média do fluido na saída do queimador (K).
\mathcal{T}_L	Escala de tempo integral lagrangeana do fluido (s).
$\mathcal{T}_{\vec{u}_p}$	Escala de tempo integral da gotícula (s).
u_i	i-ésima componente do vetor velocidade \vec{u} (m/s).
$u_{p,i}$	i-ésima componente da velocidade de uma gotícula \vec{u}_p (m/s).
\vec{u}	Vetor velocidade (m/s).
\vec{u}_p	Vetor velocidade de uma gotícula (m/s).
U^*	Parâmetro do modelo k- ε realizável.

w_i	Pesos de quadratura associados às direções \vec{s}_i .
\mathcal{W}_λ	Espessura óptica espectral.
\vec{x}	Vetor posição (m).
x_i	i -ésima componente do vetor posição \vec{x} .
X_i	Fração molar da i -ésima espécie química.
$[X_i]$	Concentração [molar] da i -ésima espécie química (kmol/m ³).
$[X_{soot}]$	Concentração mássica da fuligem (kg/m ³).
X_F	Fração molar de combustível.
X_O	Fração molar de oxigênio.
\tilde{X}_{prec}	Fração molar média da espécie precursora na formação da fuligem.
\tilde{X}_{sgs}	Fração molar média das espécies precursoras na crescimento da fuligem.
\tilde{X}_{OH}	Fração molar média do radical hidroxila.
Y_i	Fração mássica da i -ésima espécie química.
$Y_{F,1}$	Fração mássica de combustível no lado de fornecimento de combustível.
$Y_{O_2,2}$	Fração mássica de oxigênio no lado de fornecimento de oxidante.
\tilde{Y}_{soot}	Fração mássica média da fuligem.
\mathcal{Y}_M	Termo de dissipação por dilatação.
Z	Fração de mistura.
Z_{st}	Fração de mistura estequiométrica.

Caracteres Gregos

α	Parâmetro de tamanho.
β	Coefficiente de extinção global (1/m).
γ	Coefficiente de expansão adiabática.
Δs	Distância que percorre um feixe dentro de ΔV (m).
Δt_p	Passo de tempo de integração do meio disperso (s).
ΔV	Volume de controle (m ³).
ϵ_p	Emissividade cinza de uma gotícula.
ϵ_P	Emissividade cinza da parede.
ϵ_T	Emissividade total do gás no modelo WSGGM.
ε	Taxa de dissipação viscosa (m ² /s ³).
$\tilde{\varepsilon}$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (m ² /s ³).
η	Coefficiente do modelo k- ε realizável.
η_{col}	Eficiência de colisão no modelo de Moss-Brookes.
θ	Ângulo polar.
θ_R	Temperatura de radiação (K).
κ_i	Coefficiente de absorção dependente da pressão (1/atm m).
λ	Coefficiente de transferência de calor por condução (W/m K).
λ	Comprimento de onda (μ m).
μ	Primeiro momento estatístico [média] de χ_{st} .
μ	Viscosidade dinâmica do fluido (Pa.s).
μ_t	Viscosidade turbulenta (Pa.s).
ν	Viscosidade cinemática do fluido (m ² /s).
ν_t	Viscosidade cinemática turbulenta (m ² /s).
ν'_{ik}, ν''_{ik}	Coefficientes estequiométricos das espécies químicas, \mathcal{M}_i .
ξ	Defeito de entalpia (J).
ρ_P	Refletividade cinza da parede.
ρ	Densidade instantânea do fluido (kg/m ³).
$\bar{\rho}$	Densidade média do fluido (kg/m ³).

ρ_p	Densidade de uma gotícula (kg/m^3).
ρ_{soot}	Densidade de uma partícula incipiente de fuligem (kg/m^3).
σ	Constante de Stefan-Boltzman [igual a $5,67 \times 10^8 \text{ W/m}^2 \text{ K}^4$].
σ^2	Segundo momento estatístico [variância] de χ_{st} .
σ_Y	Número de Schmidt turbulento.
σ_h	Número de Prandtl turbulento.
σ_k	Número de Prandtl turbulento relativo à energia cinética turbulenta.
σ_{nuc}	Número de Prandtl turbulento relativo ao número de densidade da fuligem.
σ_s	Coeficiente de espalhamento cinza ($1/\text{m}$).
$\sigma_{s,\lambda}$	Coeficiente de espalhamento espectral ($1/\text{m}$).
σ_{soot}	Número de Prandtl turbulento relativo à fração mássica da fuligem.
σ_Z	Número de Schmidt turbulento relativo à fração de mistura média.
$\sigma_{Z''2}$	Número de Schmidt turbulento relativo à variância da fração de mistura.
σ_ε	Número de Prandtl turbulento relativo à taxa de dissipação turbulenta.
τ	Variável que relaciona ao tempo (s).
τ_{cross}	Tempo de travessia de uma gotícula (s).
τ_e	Tempo de vida característico de um turbilhão (s).
τ_p	Tempo de arrasto de uma gotícula (s).
τ_λ	Transmitância espectral.
ϕ	Riqueza de combustível na mistura.
χ	Taxa de dissipação instantânea do campo escalar ($1/\text{s}$).
χ_{st}	Taxa de dissipação instantânea do campo escalar na estequiometria ($1/\text{s}$).

ω	Espalhamento albedo.
$\dot{\omega}_i$	Taxa de produção da i -ésima espécie química.
$\bar{\omega}_i$	Média temporal da taxa de reação da i -ésima espécie química.
ω_k	Vetor de rotação angular.
Ω'	Ângulo sólido.
$\tilde{\Omega}_{ij}$	Tensor taxa de rotação média.
$\bar{\Omega}_{ij}$	Tensor taxa de rotação média visto desde um referencial rotativo.

Simbologia de Operadores e Funções

$B(a, b)$	Função Beta de valores complexos a e b , ($\Re\{a\}, \Re\{b\} > 0$).
e_{ijk}	Símbolo de permutação.
\exp	Função exponencial.
$\int_a^b f(x)dx$	Integral definida de $f(x)$ e de limites $a \leq x \leq b$.
$\lim f(x)$	Limite de uma função $f(x)$.
\ln	Função logaritmo natural.
\max	Função máximo.
$\partial/\partial x$	Operador derivada parcial em x .
$N(d_p)$	Distribuição de diâmetros de partículas de fuligem.
$P(Q)$	Função Densidade de Probabilidade da variável de amostragem Q .
\overline{Q}	Média temporal de Reynolds da propriedade Q .
Q'	Flutuação temporal da prop. Q em torno da média de Reynolds.
\tilde{Q}	Média temporal de Favre da propriedade Q .
Q''	Flutuação temporal da prop. Q em torno da média de Favre.
$\widetilde{Q''^2}$	Variância da prop. Q em torno da média de Favre.
δ	Função delta de Dirac.
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
Φ	Função fase de espalhamento.
∇ .	Operador divergente.
∇^2	Operador Laplaciano.
$\Im\{z\}$	Parte imaginária de um número complexo z .
$\Re\{z\}$	Parte real de um número complexo z .
\sum	Operador Somatória.
\prod	Operador Produtório.

Abreviações

BM	Modelos de banda.
CRZ	Zona de recirculação no canto.
CTRZ	Zona de recirculação toroidal no centro.
DNS	Simulação numérica direta.
DPM	Modelos de fase discreta.
DTRM	Modelo de radiação de transferência discreta.
EDM	Modelo dissipação dos turbilhões.
EBU	Modelo de quebra dos turbilhões.
FRC	Modelo taxa química finita.
FTIR	Espetroscopia infravermelha de transformada de Fourier.
g-RTE	Equação de transferência [transporte] radiante cinza.
GBM	Abordagem de banda cinza.
GGM	Abordagem de gás cinza.
GWB	Abordagem de banda larga-cinza.
HACA	Abstração de hidrogênio e adição de acetileno.
LES	Simulação de grandes escalas.
LII	Incandescência induzida por laser.
LII-2D	Incandescência induzida por laser bidimensional.
LBL	Abordagem linha por linha.
MM	Método dos momentos.
NAS	Número de ângulos sólidos.
NBM	Abordagem de banda estreita.
PAH	Hidrocarbonetos aromáticos policíclicos.
PDA	Anemometria de fase Doppler.
PIV	Velocimetria por imagens de partículas.
PLIF	Incandescência induzida por laser plano.
RANS	Média de Reynolds da equação de Navier-Stokes.
RNG	Grupo de renormalização.

RSM	Modelo de tensões de Reynolds.
RTE	Equação de transferência [transporte] de energia radiante.
s-RTE	Equação de transferência radiante sob a forma espectral.
SNB	Modelo de banda estreita estatística.
SNBCK	Modelo de banda estreita estatística correlacionada no comprimento de onda.
SVCARS	Espectrometria anti-Stokes coerente de deslocamento vibracional.
TTNH	Modelo não Homogêneo de transmitância total.
UDF	Função definido pelo usuário.
WBM	Abordagem de banda larga.
WSGGM	Soma ponderada dos gases cinzas.

*Lo único que se yergue entre un hombre y lo
que desea de la vida, a menudo simplemente
es la voluntad de intentarlo y la fe de creer
que es posible.*

Richard M. Devos, *La Universidad del Éxito de Og Mandino.*