

### 3

## Formulação Matemática e Modelos para a Descrição da Combustão Turbulenta em Queimadores

### 3.1

#### Equações de Transporte e de Estado que descrevem os Escoamentos Turbulentos Segundo a Abordagem Média de Reynolds

A maioria de escoamentos em sistemas práticos de combustão ocorre em regime turbulento, e são caracterizados pela presença de flutuações aleatórias que transportam, de forma similar ao transporte difusivo molecular, os campos de velocidade e de propriedades escalares. O transporte turbulento associado a estas flutuações aumenta com o número de Reynolds.

Todos os escoamentos turbulentos exibem estruturas rotacionais, também chamadas de turbilhões, que cobrem uma ampla faixa contínua de escalas de comprimento e de tempo. A maior destas é a integral, cujo comportamento é anisotrópico, enquanto que os de menores turbilhões são os característicos da escala de Kolmogorov, cujo comportamento é isotrópico.

A descrição mediante simulação computacional de todas as escalas de comprimento e de tempo requer que a razão entre o volume do domínio de análise e do menor volume elementar seja da ordem de  $Re_t^{9/4}$ , e os incrementos de tempo da ordem de  $Re_t^{3/4}$ . Aqui  $Re_t = \tilde{k}^2/\nu\varepsilon$ , onde,  $Re_t$ , é o número de Reynolds da turbulência, onde  $\tilde{k}$  é a energia cinética turbulenta,  $\nu$  é viscosidade cinemática do fluido, e  $\varepsilon$ , é a taxa de dissipação viscosa. Valores característicos de  $Re_t$  em escoamentos de interesse industrial situam-se na faixa 100-1.000. Esta é a razão pela qual a resolução das equações de transporte mediante a Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation, DNS*) somente é praticável em escoamentos turbulentos simples com número de Reynolds moderado.

Porém, na maioria de aplicações da engenharia, as propriedades médias são suficientes para caracterizar o comportamento macroscópico de um escoamento turbulento. A média de Reynolds ou RANS, (*Reynolds-Averaged Navier Stokes*), é o procedimento clássico de decomposição das equações de transporte, que utiliza a definição de operador valor médio de uma propriedade do escoamento,  $Q(\vec{x}, t)$ ,

$$\overline{Q(\vec{x}, t)} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0 + \tau} Q(\vec{x}, t) dt, \quad (3-1)$$

a flutuação em torno da média é dada por

$$Q'(\vec{x}, t) = Q(\vec{x}, t) - \overline{Q(\vec{x}, t)}. \quad (3-2)$$

A aplicação deste operador às equações de transporte que governam o escoamento faz surgir correlações não fechadas, tais como  $\overline{u'_j Q'}$  que devem ser modeladas.

Em escoamentos turbulentos reativos, no entanto, flutuações da densidade ocorrem e a aplicação direta da média de Reynolds resultam em termos de flutuação envolvendo a densidade,  $\overline{\rho' u'_i}$ , por exemplo. Para evitar o tratamento de tais correlações, a média de Favre, ponderada pela densidade,  $\tilde{Q}$ , é introduzida,

$$\tilde{Q} = \frac{\overline{\rho Q}}{\bar{\rho}}. \quad (3-3)$$

Note-se que a flutuação em torno de uma propriedade média de Favre é  $Q'' = Q - \tilde{Q}$ . Assim, o tratamento estatístico de média de Favre, quando aplicado às equações de continuidade, quantidade de movimento, espécies químicas e energia (em termos da entalpia total), leva a um conjunto de equações de transporte que, definido no referencial Euleriano e em notação indicial, é dado pelas seguintes expressões,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \bar{S}_1, \quad (3-4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] \\ &\quad - \frac{\partial \overline{\rho u'_j u'_i}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_{ui}, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (3-5)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial \overline{\rho u'_j Y'_i}}{\partial x_j} + \bar{\omega}_i + \bar{S}_{Y_i}, \quad i = 1, \dots, N \quad (3-6)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_t}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_t}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial \overline{\rho u'_j h'_t}}{\partial x_j} + \bar{S}_r + \bar{S}_h, \quad (3-7)$$

onde,  $Pr$  e  $Sc$  são, respectivamente, o número de Prandtl e de Schmidt, os quais representam a razão entre o transporte molecular de quantidade de movimento e, respectivamente, o térmico e de massa das espécies químicas.

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}, \quad (3-8)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}, \quad (3-9)$$

onde  $\rho$  é a densidade do fluido,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica,  $c_p$  é o calor específico a pressão constante,  $D$  é o coeficiente de difusão molecular das espécies químicas e  $\lambda$  é o coeficiente de transferência de calor por condução.

No conjunto de Equações (3-4)–(3-7), as grandezas  $\tilde{u}_i$ ,  $\tilde{Y}_i$  e  $\tilde{h}_t$ , representam a média (de Favre) dos campos de velocidade, fração de massa das espécies químicas e entalpia total. Na Equação (3-7), a energia devida às forças viscosas não foi levada em conta pois representa um valor insignificante diante os demais processos difusivos e de geração. Além disso, as Equações (3-4)–(3-7) são válidas apenas para escoamento subsônico a baixo número de Mach,  $Ma = u/c \ll 1$ , desta forma, a energia associada à variação temporal da pressão também foi negligenciada.

Note-se que, o primeiro termo do lado direito das Equações (3-5), (3-6) e (3-7) correspondem, respectivamente, aos divergentes de (i) tensor de tensões viscosas do escoamento médio, (ii) fluxos difusivos da média das espécies químicas e, (iii) fluxo difusivo da entalpia total média, os quais representam o transporte difusivo molecular de quantidade de movimento, massa das espécies químicas e energia. Classicamente, as hipóteses de fluido Newtoniano, difusão molecular por lei de Fick e ausência de transporte de energia por efeito Dufour foram empregados para escrever estas equações.

Na descrição da combustão turbulenta, os primeiros termos do lado direito das Equações (3-5), (3-6) e (3-7) correspondem ao transporte molecular (i) de quantidade de movimento, (ii) das frações mássicas das espécies químicas e, (iii) da energia, os mesmos que são pequenos diante os segundos termos do lado direito que representam o transporte turbulento das referidas grandezas. Os terceiros termos das Equações (3-6) e (3-7), correspondem aos termos fontes das equações de transporte das espécies químicas e da energia como resultado das reações químicas e da radiação. Finalmente, os últimos termos das Equações (3-4)–(3-7) constituem os termos fontes devido à interação entre a fase dispersa (gotículas de combustível, por exemplo) com a fase gasosa.

### 3.2

#### Modelos de Fechamento

O objetivo da modelagem em escoamentos turbulentos é propor aproximações para os termos desconhecidos (ou abertos) que aparecem ao se aplicar o operador média às equações de transporte. Além disso, são necessários mod-

elos que descrevam a interação de diversos fenômenos associados à combustão turbulenta (i.e., radiação, fuligem, “sprays”, etc.). Estes termos são:

**As tensões de Reynolds,  $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$ , os fluxos turbulentos das espécies químicas,  $-\overline{\rho u_i'' Y_i''}$  e da entalpia total,  $-\overline{\rho u_i'' h_t''}$ .** A maioria de trabalhos de combustão empregam modelos de turbulência simples e desenvolvidos para escoamentos turbulentos não reativos, tais como o modelo  $k - \varepsilon$ , para descrever os tensores de Reynolds. No caso da modelagem da combustão turbulenta não pré-misturada, os fluxos turbulentos de espécies químicas e da entalpia total são frequentemente fechados mediante a utilização de uma expressão similar à hipótese de Boussinesq.

**As taxas de reação das espécies químicas,  $\overline{\dot{\omega}_i}$ .** A maior parte dos estudos de modelagem da combustão em escoamentos turbulentos enfatiza o tratamento deste termo. É este termo que envolve a dependência não linear com a temperatura e com as concentrações das espécies químicas, associados à Lei de Arrhenius.

**O divergente do fluxo de calor da energia térmica por radiação,  $\overline{S_r} = -d\overline{q_r}/dx_i$ .** Este termo fonte é obtido a partir da Equação de Transferência Radiante [*Radiative Transfer Equation, RTE*] ou mediante a aplicação de modelos que a simplificam, tal e como é o caso do Modelo de Rosseland.

**Os termos fonte oriundos da interação interfásica,  $\overline{S_1}$ ,  $\overline{S_{ui}}$ ,  $\overline{S_{Y_i}}$  e  $\overline{S_{h_t}}$ .** Estes termos aparecem como resultado do acoplamento entre a fase contínua e a fase dispersa.

### 3.2.1

#### Modelo de Turbulência

Como foi visto acima, a aplicação da Média de Favre nas equações de transporte introduz novos termos tais como as tensões de Reynolds,  $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$ , e os fluxos turbulentos das espécies químicas,  $-\overline{\rho u_i'' Y_i''}$ , e da entalpia total,  $-\overline{\rho u_i'' h_t''}$ . Estes termos, abertos, precisam de modelos. Os modelos adotados neste estudo são descritos a seguir.

A hipótese de Boussinesq introduz a proporcionalidade entre as tensões de Reynolds,  $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$ , e a taxa de deformação média do escoamento através da seguinte expressão,

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \tilde{\rho} \tilde{k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}, \quad (3-10)$$

onde a viscosidade turbulenta,  $\mu_t$ , é dada pela relação de Prandtl-Kolmogorov,

$$\mu_t = C_\mu \frac{\bar{\rho} \tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}, \quad (3-11)$$

sendo que,

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_i''} = \frac{1}{2} \left( \overline{u''^2} + \overline{v''^2} + \overline{w''^2} \right), \quad (3-12)$$

é a energia cinética turbulenta,  $C_\mu$  é fator empírico empírica e  $\tilde{\varepsilon}$  é a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Note-se que a Equação (3-11) envolve as novas incógnitas,  $\tilde{k}$  e  $\tilde{\varepsilon}$ , cujas equações de transporte serão dadas mais adiante.

Os fluxos turbulentos das espécies químicas,  $-\overline{\rho u_i'' Y_i''}$  e da entalpia total  $-\overline{\rho u_i'' h_t''}$ , são determinados mediante o emprego de hipótese similar à de Boussinesq,

$$-\overline{\rho u_j'' Y_i''} = \frac{\mu_t}{\sigma_Y} \frac{\partial \tilde{Y}_i''}{\partial x_j}, \quad (3-13)$$

$$-\overline{\rho u_j'' h_t''} = \frac{\mu_t}{\sigma_h} \frac{\partial \tilde{h}_t''}{\partial x_j}, \quad (3-14)$$

onde  $\sigma_Y$  e  $\sigma_h$ , são respectivamente, os números de Schmidt e de Prandtl turbulentos.

Por muitas décadas, o modelo  $k$ - $\varepsilon$  Padrão tem sido empregado extensivamente para a descrição das tensões de Reynolds. Este modelo fornece bons resultados em escoamentos turbulentos em presença de camada limite (i.e., placa plana, duto circular, etc.). No entanto, o modelo  $k$ - $\varepsilon$  Padrão apresenta dificuldades de previsão da turbulência em escoamentos com elevadas taxas de deformação média. Este pode ser o caso de algumas configurações de combustão turbulenta, em particular, às do tipo jato, de expansão abrupta e zonas de recirculação (Yeoh e Yuen, 2009).

Para contornar as dificuldades intrínsecas do modelo  $k$ - $\varepsilon$  Padrão de descrição da turbulência em jatos, Shih *et al.* (1995) desenvolveram modelo  $k$ - $\varepsilon$  Realizável [do inglês *Realizable k- $\varepsilon$* ]. O termo Realizável significa que o modelo satisfaz algumas restrições matemáticas referentes às tensões de Reynolds de forma a garantir a consistência física do escoamento turbulento. O aspeto central do modelo consiste em assegurar a “realizabilidade” ( $\overline{u_i''^2} > 0$ ). Para isto, o valor de  $C_\mu$  da Equação (3-11) é modificado, como será visto abaixo.

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  Realizável resolve as equações de transporte da energia cinética turbulenta,  $\tilde{k}$ , e de sua taxa de dissipação turbulenta,  $\tilde{\varepsilon}$ ,

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{k}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right] + \mathcal{P} - \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} - \mathcal{Y}_M, \quad (3-15)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right] + C_1 \bar{\rho} S \tilde{\varepsilon} - C_2 \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k + \sqrt{(\mu_t/\bar{\rho}) \tilde{\varepsilon}}}, \quad (3-16)$$

onde  $\mathcal{P}$ , é a produção da energia cinética turbulenta, dada por

$$\mathcal{P} = -\overline{\rho u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (3-17)$$

enquanto que  $\mathcal{Y}_M$  é o termo de dissipação por dilatação, o qual representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência de escoamentos compressíveis. Este termo é modelado, de acordo com Sarkar e Balakrishnan (1990), através da seguinte expressão

$$\mathcal{Y}_M = 2\bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \frac{\tilde{k}}{\gamma R T}, \quad (3-18)$$

onde  $\gamma$  é o coeficiente de expansão adiabática que é a razão entre os calores específicos a pressão constante e a volume constante,  $R$  é a constante universal dos gases perfeitos, e,  $T$  é a temperatura absoluta do escoamento.

Na Equação (3-16), o módulo da taxa de deformação média,  $S$ , é definido como,

$$S = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}, \quad (3-19)$$

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (3-20)$$

sendo que  $\tilde{S}_{ij}$  é o tensor da taxa de deformação média. Na Equação (3-16), a constante  $C_2$  é igual a 1,9, enquanto que  $C_1$  é obtida das seguintes expressões,

$$C_1 = \max \left[ 0, 43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \quad (3-21)$$

onde,

$$\eta = S \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (3-22)$$

O valor de  $C_\mu$  da Equação (3-11) é calculado através das seguintes expressões,

$$C_\mu = \frac{1}{A_o + A_s \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} U^*}, \quad (3-23)$$

$$U^* = \sqrt{\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} + \hat{\Omega}_{ij}\hat{\Omega}_{ij}}, \quad (3-24)$$

$$\hat{\Omega}_{ij} = \tilde{\Omega}_{ij} - 2e_{ijk}\omega_k, \quad (3-25)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \bar{\Omega}_{ij} - e_{ijk}\omega_k, \quad (3-26)$$

onde  $\bar{\Omega}_{ij}$  é a taxa de rotação média visto desde um referencial rotativo com vetor de rotação angular  $\omega_k$ , e  $e_{ijk}$  é o símbolo de permutação. A constante  $A_o$  é igual a 4,04, enquanto que  $A_s$  é determinada por

$$A_s = \sqrt{6} \cos \Theta, \quad (3-27)$$

$$\Theta = \frac{1}{3} \arccos(6W), \quad (3-28)$$

$$W = \frac{\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{jk}\tilde{S}_{ki}}{S^3}, \quad (3-29)$$

Cabe ressaltar que, para o modelo  $k - \varepsilon$  Realizável, os valores do número de Prandtl turbulento relativos à  $\tilde{k}$  e a  $\tilde{\varepsilon}$ , isto é,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$ , são iguais a 1,0 e 1,3, respectivamente.

### 3.2.2 Modelo de Combustão

A modelagem e simulação de processos de combustão envolve o desafio de descrever a taxa de produção química média,  $\bar{\dot{\omega}}_i$ , que se encontra presente na Equação (3-6). Como pode ser visto no anexo A, este termo possui uma forte não linearidade associada à Lei de Arrhenius. Assim, cabe enfatizar que o termo fonte,  $\bar{\dot{\omega}}_i$ , não pode ser simplesmente obtido a partir das propriedades termoquímicas médias, ou seja,

$$\bar{\dot{\omega}}_i \neq \dot{\omega}_i(\bar{p}, \bar{T}, \bar{Y}_i, \dots). \quad (3-30)$$

### Modelo de Elemento de Chama Não Adiabático [Non Adiabatic Flamelet]

Uma vez que a taxa média de produção química,  $\bar{\dot{\omega}}_i$ , não pode ser calculada no contexto RANS através da média da lei de Arrhenius, esta precisa ser modelada para descrever o processo da combustão turbulenta. Assim, esforços consideráveis foram feitos na área da modelagem da combustão com o objetivo de desenvolver modelos que sejam capazes de prever os processos de combustão turbulenta.

O modelo de Elemento de Chama Não Adiabático [*Non-Adiabatic Flamelet*], será usado neste estudo para descrever a combustão turbulenta não

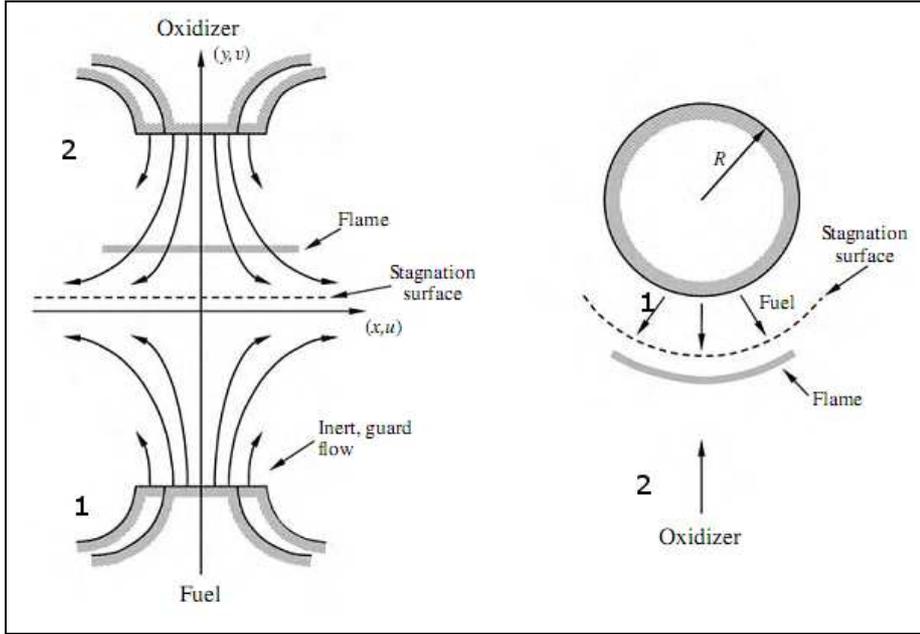


Figura 3.1: Diagrama esquemático de chamas não pré-misturada em contrafluxo, mostrando o processo de mistura entre combustível e oxidante (Law, 2006).

pré-misturada em presença de transferência de calor. Este modelo parte da hipótese que a chama turbulenta é composta por um conjunto de elementos de chamas laminares que são continuamente transportados e estirados pelo escoamento. A estrutura de chama também é afetada por efeitos de transferência de calor devido à presença radiação térmica e/ou a interação entre meio disperso e o meio contínuo.

Para descrever um modelo elemento de chama, classicamente, define-se a fração de mistura,  $Z$ , a partir das vazões mássicas de combustível e oxidante,  $\dot{m}_F$  e  $\dot{m}_{Ox}$ , (ver Figura 3.1),

$$Z = \frac{\dot{m}_F}{\dot{m}_F + \dot{m}_{Ox}}, \quad (3-31)$$

que, em termos de frações mássicas de combustível e oxidante, é escrita como,

$$Z = \frac{sY_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{sY_{F,1} + Y_{O_2,2}}, \quad (3-32)$$

onde  $s = (Y_{Ox}/Y_F)_{st}$  é a razão das frações mássicas de oxidante/combustível na estequiometria,  $Y_{F,1}$  é a fração mássica de combustível no lado de fornecimento de combustível,  $Y_{O_2,2}$  é a fração mássica de oxigênio no lado de fornecimento de oxidante,  $Y_F$  e  $Y_{O_2}$  correspondem às frações mássica de combustível e oxigênio em uma posição  $x$ . A fração de mistura estequiométrica,  $Z_{st}$  é,

$$Z_{st} = \frac{1}{1 + \frac{sY_{F,1}}{Y_{O_2,2}}} = \frac{1}{1 + \phi}, \quad (3-33)$$

onde  $\phi$  é a riqueza da mistura,

$$\phi = \frac{X_F/X_{Ox}}{(X_F/X_{Ox})_{st}}, \quad (3-34)$$

sendo que  $X_F$  e  $X_{Ox}$  são as frações molares de combustível e de oxidante, respectivamente.

Outra propriedade utilizada para descrever elementos de chama é a taxa de dissipação instantânea do campo escalar,  $\chi$ , é definida como,

$$\chi = 2D \left( \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right)^2, \quad (3-35)$$

a qual costuma ser tomada com seu valor na estequiometria,

$$\chi_{st} = \chi(Z_{st}), \quad (3-36)$$

onde  $D$  é o coeficiente de difusão binário da mistura. A taxa de dissipação do campo escalar é a propriedade que representa a influência das pequenas escalas de flutuação do escoamento sobre a estrutura local da chama.

O efeito do aumento de  $\chi_{st}$  sobre um elemento de chama laminar é a progressiva interpenetração dos reagentes. Esta interpenetração resulta na presença de combustível não queimado na região oxidante da chama, e vice-versa, o que leva a uma diminuição da temperatura da chama, até o ponto em que não é mais possível manter a combustão estacionária. Assim, um aumento da taxa de dissipação do escalar acima de seu valor crítico leva à extinção abrupta do processo de combustão.

Para descrever os efeitos de troca de calor na estrutura da chama, introduz-se o conceito de “defeito de entalpia”,  $\xi$ , (Bray e Peters, 1994), que é definido como a diferença entre a entalpia total,  $h_t$ , e a entalpia total em sistema adiabático,  $h_{ad}$ ,

$$\xi = h_t - h_{ad} = h_t - (h_F - Z(h_F - h_O)), \quad (3-37)$$

onde  $h_F$  e  $h_O$  são as entalpias do combustível e do oxidante. Note-se que o parâmetro “defeito de entalpia” permite estimar condições locais não adiabáticas ao modelo clássico de elemento de chama (adiabático). Assim, o estado termoquímico do escoamento,  $T$ ,  $Y_i$ , é então função da fração de mistura  $Z$ , da taxa de dissipação do escalar na estequiometria,  $\chi_{st}$ , e do “defeito da entalpia”,  $\xi$ ,

$$Y_i = Y_i(Z, \chi_{st}, \xi), \quad (3-38)$$

$$T = T(Z, \chi_{st}, \xi). \quad (3-39)$$

Com isto, a fração mássica média,  $\tilde{Y}_i$ , e a temperatura média  $\tilde{T}$  podem ser escritas como,

$$\tilde{Y}_i = \int_0^\infty \int_0^1 \int_{\xi_{min}}^{\xi_{max}} Y_i(Z, \chi_{st}, \xi) P(Z, \chi_{st}, \xi) d\xi dZ d\chi_{st} \quad (3-40)$$

$$\tilde{T} = \int_0^\infty \int_0^1 \int_{\xi_{min}}^{\xi_{max}} T(Z, \chi_{st}, \xi) P(Z, \chi_{st}, \xi) d\xi dZ d\chi_{st}, \quad (3-41)$$

onde  $P(Z, \chi_{st}, \xi)$  é a função densidade de probabilidade conjunta da fração de mistura, da taxa de dissipação do escalar na estequiometria e do “defeito de entalpia”. Os valores de  $Y_i(Z, \chi_{st}, \xi)$  e  $T(Z, \chi_{st}, \xi)$  são calculados a priori para o caso de uma combustão não pré-misturada, mediante o emprego de uma cinética química detalhada, tal como o descrito no Anexo A, e levando-se em conta os decréscimos e acréscimos da entalpia. Estes valores constituem um conjunto de bibliotecas de elementos de chama, que são construídas empregando-se, por exemplo, a solução de uma chama de difusão elementar estirada pelo escoamento.

A determinação da PDF conjunta de  $Z$  de  $\chi_{st}$  e de  $\xi$  é usualmente simplificada assumido-se uma independência estatística entre os três parâmetros, isto é,

$$P(Z, \chi_{st}, \xi) = P(Z)P(\chi_{st})\delta(\xi - \tilde{\xi}). \quad (3-42)$$

Nos escoamentos com elevados números de Reynolds a separação entre as grandes escalas e as pequenas escalas do processo de mistura é hipótese clássica. No presente caso, as flutuações de entalpia são independentes do valor de entalpia, ou seja, as perdas de calor não exercem impacto significativo nas flutuações turbulentas da entalpia.

Assim, na Equação (3-42), a PDF marginal do “defeito de entalpia”,  $P(\xi)$ , foi tomada como sendo a função delta de Dirac,  $\delta(\xi - \tilde{\xi})$  o que é uma hipótese de modelagem cuja validade é desconhecida. Resultados experimentais poderiam permitir a realização de uma análise crítica desta hipótese. No entanto, esta análise ainda não parece ter sido feita (Haworth, 2010).

A PDF marginal da fração de mistura,  $P(Z)$ , depende do tipo de escoamento considerado. Neste trabalho será adotada a formulação clássica da função Beta,

$$P(Z) = \frac{1}{B(a, b)} Z^a (1 - Z)^b = \frac{Z^a (1 - Z)^b}{\int_0^1 Z^{a-1} (1 - Z)^{b-1} dZ}, \quad (3-43)$$

onde,

$$a = \tilde{Z} \left[ \frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\widetilde{Z'^2}} - 1 \right], \quad (3-44)$$

$$b = (1 - \tilde{Z}) \left[ \frac{\tilde{Z}(1 - \tilde{Z})}{\widetilde{Z'^2}} - 1 \right]. \quad (3-45)$$

Esta função não é solução exata da equação de transporte da função densidade de probabilidade de um escalar (Sabel'nikov *et al.*, 1998). Entretanto, seu uso é consagrado em modelos de elementos de chama (Peters, 2000).

Assim,  $P(Z)$  é uma função dos dois primeiros momentos estatísticos de  $Z$ , isto é, da fração de mistura média,  $\tilde{Z}$  e de sua variância,  $\widetilde{Z'^2}$ , os quais são obtidos a partir das respectivas equações de transporte,

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{Z}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_j \tilde{Z}}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_Z} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] + \overline{S}_Z \quad (3-46)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho \widetilde{Z'^2}}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_j \widetilde{Z'^2}}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_{Z'^2}} \frac{\partial \widetilde{Z'^2}}{\partial x_j} \right] + \frac{2\mu_t}{\sigma_{Z'^2}} \left( \frac{\partial \widetilde{Z'^2}}{\partial x_j} \right)^2 - \overline{\rho \tilde{\chi}} + \overline{S}_{Z'^2}. \quad (3-47)$$

Nas Equações (3-46) e (3-47),  $\overline{S}_Z$  e  $\overline{S}_{Z'^2}$  são os termos fonte da fração de mistura média e sua variância devido ao acoplamento interfásico, e os parâmetros  $\sigma_Z$  e  $\sigma_{Z'^2}$  são os números de Schmidt turbulentos cujos valores são da ordem da unidade (Poinsot e Veynante, 2005). O segundo termo do lado direito da Equação (3-47) representa a produção, enquanto que o terceiro termo é a dissipação da variância do escalar passivo. O modelo de analogia entre flutuações do escalar passivo e da velocidade é empregado para descrever a taxa de dissipação média do escalar,

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \widetilde{Z'^2}, \quad (3-48)$$

onde  $C_\chi$  é uma constante do modelo da ordem da unidade (Poinsot e Veynante, 2005).

A extensão da terceira hipótese de Kolmogorov para campos escalares permite assumir uma PDF marginal para a taxa de dissipação escalar,  $P(\chi_{st})$ , que é equivalente à de uma distribuição Log-normal (Peters, 1984),

$$P(\chi_{st}) = \frac{1}{\chi_{st}\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2\sigma^2} (\ln \chi_{st} - \mu)^2 \right], \quad (3-49)$$

onde os parâmetros  $\mu$  e  $\sigma$  estão relacionados ao primeiro e segundo momentos estatísticos de  $\chi_{st}$  mediante as seguintes expressões,

$$\tilde{\chi}_{st} = \exp \left[ \mu + \frac{\sigma^2}{2} \right], \quad (3-50)$$

$$\tilde{\chi}_{st}''^2 = \tilde{\chi}_{st}^2 \exp [\sigma^2 - 1]. \quad (3-51)$$

Desta forma,  $P(\chi_{st})$  é avaliada a partir dos valores de  $\tilde{\chi}_{st}$  e  $\sigma$ . Frequentemente,  $\sigma^2$  é adotada como sendo igual a 2.0 (Peters, 1984; Venkata, 2008).

### 3.2.3 Modelo de Produção de Fuligem

Em quase todo processo de combustão de hidrocarbonetos com ar observa-se a formação de material particulado de origem carbonácea e de peso molecular elevado, o qual é denominado fuligem. Sua formação é o resultado da queima incompleta de hidrocarbonetos, o que se dá geralmente nas regiões de mistura com excesso de combustível. Embora numerosas restrições venham sendo colocadas nas emissões deste poluente, por ser um dos principais causantes do aquecimento global assim como de doenças respiratórias, a presença da fuligem no processo de combustão em fornos e caldeiras desempenha um papel favorável, pois aumenta a potência emissiva da chama, levando a um incremento considerável da taxa de transferência de calor entre a chama e a carga.

A fuligem é uma substância química composta de um número elevado de átomos de carbono e um máximo de 1% (em massa) de hidrogênio. Isto, na base atômica, representa uma fórmula empírica de  $C_8H$ , o qual resulta em uma densidade que é próxima de 2.000 kg/m<sup>3</sup>. O tamanho e estrutura da fuligem varia desde partículas esféricas contendo apenas uns poucos átomos de carbono, até grandes aglomerados contendo milhões de átomos. Estudos de microscopia eletrônica, tal como o mostrado na Figura 3.2, evidenciaram que a fuligem aparece como um número de “partículas esféricas” que se aglomeram formando estruturas em cadeia de configuração geométrica similar à de um colar de pérolas. Estas partículas esféricas são chamados de partículas primárias, as quais contêm entre 10<sup>5</sup> e 10<sup>6</sup> átomos de carbono e, usualmente, apresentam diâmetros que oscilam entre 10 e 50 nm (Glassman e Yetter, 2008). Enquanto as pequenas partículas são comuns em chamas luminosas não fuliginosas,

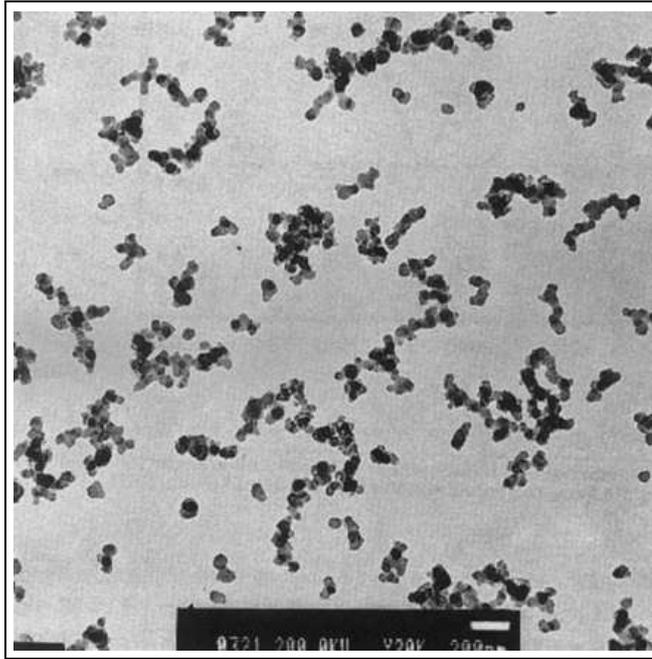


Figura 3.2: Fotografia típica obtida através de microscópio de transmissão eletrônica que identifica a natureza física da fuligem em chamas de ar/acetileno (Koylu and Faeth 1994).

maiores diâmetros de partículas são encontradas em chamas que são fortemente fuliginosas.

A produção da fuligem envolve processos físico-químicos altamente complexos e pouco compreendidos. Não obstante, esta pode ser classificada em quatro processos sequenciais, a saber (Turns, 2000),

1. **A formação de espécies precursoras da fuligem.**- Concentrações de acetileno,  $C_2H_2$ , que é formado como resultado da pirólise e da oxidação pobre em oxigênio de combustíveis alifáticos, passam por um processo cinético de decomposição e adição de radicais até criar os primeiros hidrocarbonetos aromáticos tais como o benzeno,  $C_6H_6$  e o fenil,  $C_6H_5$ . Estes anéis aromáticos representam a matéria prima para a formação, mediante o processo de abstração de hidrogênio e adição de acetileno (*H-abstraction-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-addition, HACA*), dos hidrocarbonetos policíclicos (*Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, PAHs*), sendo estes os principais precursores na formação da fuligem.
2. **A nucleação de partículas de fuligem (*inception*).**- A transição das espécies de fase gasosa para formar as primeiras partículas de fuligem é, talvez, o processo menos entendido. Ainda não existe uma teoria consensual que determine quais são os precursores responsáveis na formação da primeira partícula de fuligem (espécies ionizantes, poliacetilenos ou

hidrocarbonetos aromáticos policíclicos). A teoria mais aceita, estabelece que hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) crescem com a presença do etileno até atingir um tamanho suficientemente grande para desenvolver núcleos de partículas.

3. **O crescimento da superfície e aglomeração.**- Estes núcleos de partículas de carbono na fase condensada contém quantidades apreciáveis de hidrogênio. Não obstante, a presença de temperaturas elevadas ( $T > 1.800$  K) conduz sua deshidrogenação enquanto que os núcleos de partículas absorvem as espécies gasosas (produto da decomposição dos hidrocarbonetos) que são rapidamente desidrogenados. Este processo simultâneo leva ao incremento da massa e volume das partículas de fuligem. Estas partículas em crescimento também se aglomeram e se conglomeram formando estruturas em cadeia.
4. **A oxidação da fuligem.**- As espécies químicas em fase gasosa contribuem não apenas para o crescimento das partículas de fuligem. A fuligem também é oxidada pela presença de espécies oxidantes tais como o oxigênio ( $O$ ,  $O_2$ ) e o radical hidroxila ( $OH$ ).

Nas últimas quatro décadas diversos estudos teóricos e experimentais foram realizados na previsão da fuligem em chamas laminares e turbulentas (Tesner *et al.*, 1971; Khan e Greeves, 1974; Magnussen e Hjertager 1976; Brookes e Moss, 1999; Wen *et al.*, 2003). Estes estudos demonstraram que as condições nas quais a fuligem é formada ou consumida dependem de diversas parâmetros (tipo de combustível e oxidante, cinética química, pressão temperatura e riqueza do sistema, radiação e propriedades radiantes, etc.). A influência da variação destes parâmetros sobre a predição da fuligem ainda não é completamente entendida. No que diz respeito à cinética química, ainda não existe um modelo abrangente capaz de descrever os processos cinéticos químicos da fuligem, no entanto, modelos semiempíricos operacionais foram desenvolvidos para descrever, de maneira simplificada, a suas taxas de formação e oxidação.

A seguir, são detalhadas as equações que modelam o transporte da fração mássica da fuligem e a densidade de núcleos de partículas da fuligem. Estas equações, junto com as formulações de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999) dos termos fonte destas duas propriedades, formam um sistema fechado de equações utilizado para descrever a produção da fuligem nas chamas turbulentas não pré-misturadas aqui estudadas.

### Equações de Transporte da Fração Mássica da Fuligem e do Número de Densidade da Fuligem

A fuligem, que é originada e consumida em um processo de combustão turbulenta não pré-misturada, pode ser caracterizada descrevendo-se a fração mássica e sua concentração de núcleos (radicais) de partículas.

Assim, define-se a fração mássica média da fuligem,  $\tilde{Y}_{soot}$ , como a razão entre a concentração mássica média da fuligem,  $\overline{M}_{soot}$ , e a densidade média da mistura gasosa,  $\bar{\rho}$ ,

$$\tilde{Y}_{soot} = \frac{\overline{M}_{soot}}{\bar{\rho}} = \frac{\overline{\rho Y_{soot}}}{\bar{\rho}}. \quad (3-52)$$

A concentração média de partículas de fuligem dos núcleos radicais,  $\overline{N}_{nuc}$ , é um parâmetro que está associado ao número de densidade da fuligem,  $\tilde{b}_{nuc}^*$ , através de

$$\tilde{b}_{nuc}^* = \frac{\overline{N}_{nuc}}{\bar{\rho} N_{norm}}, \quad (3-53)$$

onde  $\tilde{b}_{nuc}^*$  corresponde à variável associada à concentração de núcleos radicais normalizada a  $N_{norm} = 10^{15}$  mol/partículas, com unidades de  $10^{-15}$  partículas/kg. As equações que descrevem o transporte turbulento da fração mássica média da fuligem,  $\tilde{Y}_{soot}$ , e do número de densidade média da fuligem,  $\tilde{b}_{nuc}^*$ , são dadas por

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_{soot}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_{soot}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_{soot}} \frac{\partial \tilde{Y}_{soot}}{\partial x_j} \right) + \overline{\mathcal{R}}_{soot}, \quad (3-54)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{b}_{nuc}^*}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{b}_{nuc}^*}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_{nuc}} \frac{\partial \tilde{b}_{nuc}^*}{\partial x_j} \right) + \overline{\mathcal{R}}_{nuc}^*, \quad (3-55)$$

onde,  $\sigma_{soot}$  e  $\sigma_{nuc}$  são os números de Prandtl turbulento para o transporte da fração mássica da fuligem e do número de densidade da fuligem, e, as variáveis,  $\overline{\mathcal{R}}_{soot}$  e  $\overline{\mathcal{R}}_{nuc}^*$  representam as taxas de produção/geração da fuligem e seu núcleos radicais, as quais descrevem a competição entre a formação e a oxidação da fuligem.

### Formulação de Moss-Brookes na Descrição das Taxas de Geração da Fração mássica da Fuligem e de Concentração dos Núcleos Radicais

Diversas formulações semi-empíricas foram propostas com o intuito de descrever os termos fontes das Equações (3-54) e (3-55). Assim, Khan e Greeves (1974) propuseram um modelo de características similares à formulação de

Arrhenius para estimar a taxa de formação da fração mássica da fuligem, enquanto que Magnussen e Hjertager (1976) desenvolveram uma formulação de característica similar ao modelo dissipação dos turbilhões [*Eddy Dissipation Model, (EDM)*] de forma a levar em conta a taxa de oxidação da fração mássica da fuligem. Ambas formulações são empregadas simultaneamente para estimar a taxa de produção/geração da fração mássica da fuligem (formação e oxidação).

O emprego simultâneo das formulações de formação de fuligem de Tesner *et al.* (1971) e de oxidação de fuligem de Magnussen e Hjertager (1976) permite calcular as taxas de produção da fração mássica da fuligem,  $\overline{\mathcal{R}}_{soot}$ , e de sua concentração dos núcleos radicais,  $\overline{\mathcal{R}}_{nuc}^*$ . A formulação de Brookes e Moss (1999) estimam estas taxas utilizando expressões mais complexas e abrangentes do que as propostas por Khan e Greeves (1974), Tesner *et al.* (1971) e Magnussen e Hjertager (1976).

Assim, na formulação de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999), o termo fonte da equação de transporte do número de densidade média da fuligem,  $\overline{\mathcal{R}}_{nuc}^*$ , que é associado à taxa de produção/geração de concentração média de núcleos radicais,  $d\overline{N}_{nuc}/dt$ , é dado por,

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{R}}_{nuc}^* &= \frac{1}{N_{norm}} \frac{d\overline{N}_{nuc}}{dt} = \frac{1}{N_{norm}} \left( \frac{d\overline{N}_{nuc}}{dt} \right)_{inception} - \frac{1}{N_{norm}} \left( \frac{d\overline{N}_{nuc}}{dt} \right)_{coagulation} \quad (3-56) \\ &= \frac{1}{N_{norm}} \left[ C_{\alpha} N_A \left( \frac{\tilde{X}_{prec} \bar{p}}{R\tilde{T}} \right)^l \exp \left( \frac{T_{\alpha}}{\tilde{T}} \right) - C_{\beta} \left( \frac{24R\tilde{T}}{\rho_{soot} N_A} \right)^{\frac{1}{2}} d_p^{\frac{1}{2}} \overline{N}_{nuc}^2 \right], \end{aligned}$$

o qual é o resultado do balanço entre o processo de nucleação, oriundo da fase gasosa, e o processo de coagulação de partículas de fuligem. Nesta equação, a concentração de núcleos radicais,  $\overline{N}_{nuc}$ , é dada em partículas/m<sup>3</sup>,  $N_A$  é o número de Avogadro (igual a  $6,022045 \times 10^{23}$  partículas/mol),  $\tilde{X}_{prec}$  é a fração molar da espécie precursora da fuligem. No caso da combustão do metano, o precursor considerado para  $\tilde{X}_{prec}$  é o acetileno  $C_2H_2$ . Os termos  $C_{\alpha}$  e  $C_{\beta}$ , (iguais a  $54s^{-1}$  e 1, no caso da combustão de metano com o ar) são as constantes associada respectivamente, à taxa de nucleação e à de coagulação da fuligem, as quais foram determinadas a partir da modelagem de uma chama laminar.  $T_{\alpha}$  é a temperatura de ativação de nucleação da fuligem (igual a 21.000 K para a combustão do metano),  $\rho_{soot}$  é a densidade das partículas de fuligem (cujos valores oscilam entre 1.800 – 2.000 kg/m<sup>3</sup>),  $d_p$  é o diâmetro médio da partícula e, finalmente,  $\bar{p}$  e  $\tilde{T}$  são, respectivamente, a pressão média e a temperatura média.

No modelo de Brookes e Moss (1999) o termo fonte da equação de transporte da fração mássica de fuligem,  $\overline{\mathcal{R}}_{soot}$ , isto é, a taxa de produção/geração da concentração mássica média da fuligem,  $d\overline{M}_{soot}/dt$ , inclui contribuições devidas à nucleação, crescimento da superfície, consumo por oxidação,

$$\overline{\mathcal{R}}_{soot} = \frac{d\overline{M}_{soot}}{dt} = \left( \frac{d\overline{M}_{soot}}{dt} \right)_{inception} + \left( \frac{d\overline{M}_{soot}}{dt} \right)_{surf.growth} - \left( \frac{d\overline{M}_{soot}}{dt} \right)_{oxidation}, \quad (3-57)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{R}}_{soot} = \frac{d\overline{M}_{soot}}{dt} = & M_P C_\alpha \left( \frac{\tilde{X}_{prec\bar{p}}}{R\tilde{T}} \right)^l \exp \left( \frac{T_\alpha}{\tilde{T}} \right) \\ & + C_\gamma \left( \frac{\tilde{X}_{sgs\bar{p}}}{R\tilde{T}} \right)^m \exp \left( \frac{T_\gamma}{\tilde{T}} \right) \left[ (\pi \overline{N}_{nuc})^{\frac{1}{3}} \left( \frac{6\overline{M}_{soot}}{\rho_{soot}} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^n \\ & - C_{oxid} C_\omega \eta_{coll} \left( \frac{\tilde{X}_{OH\bar{p}}}{R\tilde{T}} \right) \sqrt{\tilde{T}} (\pi \overline{N}_{nuc})^{\frac{1}{3}} \left( \frac{6\overline{M}_{soot}}{\rho_{soot}} \right)^{\frac{2}{3}}. \end{aligned} \quad (3-58)$$

O primeiro termo desta equação representa a criação de massa de fuligem devido à nucleação de partículas de fuligem, onde a constante,  $M_P$ , (igual a 144 kg/ kmol) é a massa molecular de uma partícula de fuligem incipiente, assumida como sendo equivalente à de 12 átomos de carbono. Segundo Brookes e Moss (1999), o modelo não é sensível a este valor, o qual é indispensável para iniciar o processo de crescimento da superfície.

O segundo termo descreve a criação da fração mássica da fuligem por crescimento de superfície, onde  $\tilde{X}_{sgs}$  é a fracção molar média das espécies participantes no crescimento da superfície das partículas de fuligem. No caso de hidrocarbonetos parafínicos, este crescimento é realizado principalmente pela adição de espécies gasosas, em particular, o acetileno encontrado em chamas de difusão quando da combustão do metano com o ar (Smyth *et al.*, 1985). O mecanismo de criação de fuligem por crescimento da sua superfície, tal como proposto no modelo de Brookes e Moss (1999) é proporcional a área efetiva da fuligem elevada à potência  $n$ .

O terceiro termo descreve o consumo de fuligem como resultado de sua oxidação. Neste processo, o radical hidroxila (cuja fracção molar média é  $\tilde{X}_{OH}$ ) é assumido como o único agente oxidante quando da combustão do metano e ar, assumindo-se uma eficiência de colisão de  $\eta_{col} = 0,04$ .

O processo de determinação dos expoentes  $l$ ,  $m$  e  $n$ , é detalhado por Brookes e Moss (1999), sendo que valores de  $l = 1$ ,  $m = 1$  e  $n = 1$ , con-

duzem a melhores resultados, quando comparados com dados experimentais da combustão turbulenta não pre-misturada do metano e ar a pressões atmosféricas.  $C_{oxid}$  é uma constante que representa o fator de escala da taxa de oxidação da fuligem, cujo valor de 0,015 é o que melhor ajusta os resultados de combustão turbulenta não pré-misturada de metano e ar. A constante  $C_\gamma$  é o fator de escala do crescimento da superfície da fuligem, cujo valor encontra-se diretamente relacionado ao expoente  $m$  (para  $m = 1$ ,  $C_\gamma = 11.700 \text{ kg-m/kmol-s}$ ).  $C_\omega = 105,8125 \text{ kg-m/kmol-K}^{1/2}\text{-s}$  é uma constante do consumo da fração mássica da fuligem por oxidação.

O modelo de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999) é recomendado por Al-Oamri (2007) para descrever a combustão turbulenta não pré-misturada de metano e ar a pressão ambiente, pois este modelo garante boa estimativa da formação da fuligem, quando comparado com experimentos de Syed *et al.* (1990). Este modelo também foi aplicado à combustão turbulenta do querosene (Moss *et al.*, 2003). Neste caso, as principais espécies precursoras responsáveis pela formação da fuligem foram admitidas como sendo o benzeno  $C_6H_6$  e o acetileno,  $C_2H_2$ . Contudo, ainda não existe estudo conhecido da validade das constantes do modelo de Moss-Brookes para descrever a queima turbulenta de combustíveis mais complexos, tais como propano ou gasolina.

Wen *et al.* (2003) estenderam o modelo de Brookes e Moss (1999) com o objetivo de descrever a formação/consumo da fuligem de combustíveis pesados, tais como querosenes e diesel. Este modelo, chamado de modelo Estendido de Moss-Brookes (Wen *et al.*, 2003), é similar ao modelo de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999), porém, modificações das taxas de nucleação e de oxidação foram realizadas. Assim, a formulação de Hall (1997) foi levada em conta para a descrição da taxa de nucleação de hidrocarbonetos pesados, enquanto a formulação de Lee *et al.* (1962) foi adicionada para descrever o processo da oxidação da fuligem devido ao oxigênio molecular.

### 3.2.4 Modelo de Radiação

Durante os processos de transferência de calor que ocorrem em fornos e caldeiras, parte da energia liberada na chama, resultado das reações químicas exotérmicas entre combustível e oxidante, é transferida para suas imediações através de mecanismos de condução e convecção. Outra parte desta energia é transportada mediante o fenômeno de radiação térmica. Enquanto a condução e a convecção, nesses equipamentos, são importantes a baixas temperaturas do escoamento (i.e. 400 - 600 K), a transferência de energia por radiação torna-se dominante a temperaturas do escoamento superiores a 700 K. Neste trabalho,

entende-se como radiação térmica à transferência de energia térmica de um corpo para suas imediações, através de pacotes discretos de energia (i.e., de fótons) no espectro infravermelho (0,1 - 100  $\mu\text{m}$ ) de comprimento de onda.

Uma vez que produtos da combustão tais como monóxido de carbono, dióxido de carbono, vapor de água, etc., e fuligem, emitem, absorvem, e espalham energia radiante, é imprescindível que a transferência de energia por radiação seja levada em consideração na análise e no projeto de equipamentos de combustão. Cabe lembrar que as temperaturas de combustão são extremamente elevadas, fazendo com que a radiação térmica desempenhe um papel importante em relação aos demais mecanismos de transferência de energia (condução e advecção). Desta forma, a consideração da radiação nas simulações de equipamentos de combustão conduz a uma melhor caracterização de chamas e, portanto, a uma melhor previsão da transferência global de energia térmica do escoamento para as paredes (Bidi *et al.*, 2008).

A seguir, são descritos a equação de transferência de energia radiante [*Radiative Transfer Equation, (RTE)*] nas suas formas cinza e espectral, assim como a sua solução discretizada mediante a aplicação do modelo de ordenadas discretas [*Discrete Ordinate Model, (DOM)*]. Cabe ressaltar que a solução da RTE requer o conhecimento de propriedades radiantes dos gases produtos de combustão e fuligem, cuja teoria e modelagem serão abordadas, de maneira independente, nas duas seções subseqüentes.

### Formulação Matemática da Equação de Transferência Radiante – RTE

A variação da intensidade da radiação em estado quase-permanente que atravessa um meio participante que absorve, emite e espalha energia radiante, é descrita pela Equação de Transferência Radiante que, sob a forma espectral (*Spectral Radiative Transfer Equation, s-RTE*), é dada por,

$$\frac{dI_{\lambda}(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = - (a_{\lambda} + \sigma_{s,\lambda}) I_{\lambda}(\vec{r}, \vec{s}) + a_{\lambda} n^2 I_{b,\lambda}(\vec{r}) + \frac{\sigma_{s,\lambda}}{4\pi} \int_0^{4\pi} I_{\lambda}(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega'. \quad (3-59)$$

onde  $I_{\lambda}(\vec{r}, \vec{s})$  é a intensidade de energia radiante espectral a uma localização dada que é indicada pelo vetor posição  $\vec{r}$  na direção  $\vec{s}$  dentro um pequeno feixe de raios que viajam através de um meio participante (Modest, 2003).  $I_{\lambda,b}(\vec{r})$  é a intensidade de radiação espectral emitida por um corpo negro na posição  $\vec{r}$ , cuja expressão é dada pela função de Planck,  $a_{\lambda}$  e  $\sigma_{s,\lambda}$  são, respectivamente, os coeficientes de absorção e de espalhamento espectrais do meio participante,  $n$  é o índice de refração,  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzman, igual a  $5,670 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{-K}^4$ ,  $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$  é a função fase de espalhamento e  $\Omega'$  é o ângulo sólido.

Na Equação (3-59), o primeiro termo do lado direito descreve a diminuição do número de fótons por comprimento de onda ao longo de uma direção prescrita devido à absorção pelo meio participante ou devido ao espalhamento em outras direções. O segundo termo do lado direito corresponde ao incremento do número de fótons por comprimento de onda devido à emissão térmica de fótons pelo meio participante, e o último termo é relevante somente se o meio participante espalha radiação. Note-se, neste último termo, a função fase,  $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$ , que descreve a probabilidade de um raio que provém de uma direção  $\vec{s}'$  se espalhar sobre uma outra direção  $\vec{s}$ , pode ser aproximada através da seguinte formulação linear (Modest, 2003),

$$\Phi(\vec{s}, \vec{s}') \equiv 1 + C\vec{s}\cdot\vec{s}', \quad (3-60)$$

onde  $\vec{s}$  é o vetor unitário na direção do espalhamento e  $\vec{s}'$  é o vetor unitário na direção da radiação incidente,  $C$  é o coeficiente da função fase. Assim, esta função fase,  $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$ , descreve a anisotropia do espalhamento linear. A faixa de valores permissível para este coeficiente vai de  $-1$  a  $1$ . Um valor positivo de  $C$  representa um espalhamento de energia radiante de montante para jusante do feixe de fótons, sendo que um valor negativo  $C$  conduz um espalhamento da energia radiante do meio participante na direção oposta, isto é, de jusante para montante. Um valor nulo de  $C$  [ $\Phi(\vec{s}, \vec{s}') = 1$ ] define o espalhamento isotrópico da energia radiante, isto é, iguais quantidades de energia são dispersadas em todas as direções. Cabe ressaltar que a integração da função fase,  $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$ , sobre uma esfera unitária (i.e. um ângulo sólido de  $4\pi$  sr) conduz à seguinte identidade,

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \equiv 1. \quad (3-61)$$

Para o caso da combustão de hidrocarbonetos leves que levam a chamas pouco fuliginosas (ou seja, o meio participante é composto de gases produtos de combustão e de baixas concentrações de fuligem), o efeito do espalhamento pode ser negligenciado sem que isto incorra em perda de exatidão no cálculo da radiação térmica, resultando na simplificação da Equação (3-59) para,

$$\frac{dI_\lambda(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -a_\lambda I_\lambda(\vec{r}, \vec{s}) + a_\lambda n^2 I_{\lambda,b}(\vec{r}), \quad (3-62)$$

que integrada sobre o espectro do comprimento de onda, leva a Equação de Transporte Radiante Semi-Cinza (Viskanta, 1964),

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -a_I I(\vec{r}, \vec{s}) + a_P n^2 I_b(\vec{r}), \quad (3-63)$$

onde,  $I(\vec{r}, \vec{s})$  e  $I_b(\vec{r})$  são, respectivamente, a intensidade total e a do corpo negro, esta igual a  $\sigma T^4/\pi$  (sendo  $T$  a temperatura do meio participante).  $a_I$  é o coeficiente de absorção média incidente, também chamado de coeficiente de Chandrasekhar (Lallemant *et al.*, 1996), e  $a_P$  é o coeficiente de emissão média de Planck. Estes coeficientes são definidos como

$$a_I = \frac{\int_0^\infty a_\lambda G_\lambda(\vec{r}, \vec{s}) d\lambda}{G(\vec{r}, \vec{s})}, \quad (3-64)$$

$$a_P = \frac{\int_0^\infty a_\lambda I_{b,\lambda}(\vec{r}) d\lambda}{\sigma T^4/\pi}, \quad (3-65)$$

onde,  $G_\lambda(\vec{r}, \vec{s})$  e  $G(\vec{r}, \vec{s})$  são a radiação incidente espectral e total, definidos como (Siegel e Howel, 1992),

$$G_\lambda(\vec{r}, \vec{s}) = \int_0^{4\pi} I_\lambda(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega', \quad (3-66)$$

$$G(\vec{r}, \vec{s}) = \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') d\Omega'. \quad (3-67)$$

Embora a determinação da intensidade de radiação total através da Equação (3-63) seja possível, é necessário a priori, determinar  $a_I$  [ver Equação (3-64)] que depende da radiação incidente espectral,  $G_\lambda(\vec{r}, \vec{s})$ . Este por sua vez, depende não só das características espectrais do meio participante mas também, das condições de contorno ( $T_p$  e  $L_m$ ) que são, respectivamente, a temperatura de parede e o comprimento médio do feixe. Esta é a principal razão pela qual a Equação (3-63) é utilizada apenas quando o meio participante pode ser considerado como “cinza”, isto é,  $a_I(p, T, [X_i], \lambda, T_p, L_m) \rightarrow a(p, T, [X_i])$ , o que tem como consequência  $a \equiv a_I \equiv a_P$ . Com a hipótese de meio cinza, a Equação (3-63) pode ser simplificada para,

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} \equiv -a [I(\vec{r}, \vec{s}) - n^2 I_b(\vec{r})] = -aI(\vec{r}, \vec{s}) + an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi}. \quad (3-68)$$

Esta é a equação de transporte radiante em ausência do espalhamento que a maioria dos códigos comerciais (por exemplo, o Fluent<sup>TM</sup> e o CFX<sup>TM</sup>) resolve. Esta equação é chamada como Equação de Transferência Radiante Cinza (*Gray Radiative Transfer Equation, g-RTE*). Em presença de espalhamento, esta é reescrita como,

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -(a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) + an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega'. \quad (3-69)$$

onde,  $I(\vec{r}, \vec{s})$  é a intensidade da radiação total,  $a$  e  $\sigma_s$  são, respectivamente, os coeficientes globais de absorção e de espalhamento do meio participante. A Equação (3-69) é válida para um meio cinza e cuja condição de contorno respeita,

$$I(\vec{r}_P, \vec{s}) = \epsilon_P n^2 \frac{\sigma T_P^4}{\pi} + \frac{\rho_P}{\pi} \int_{\vec{n} \cdot \vec{s}' < 0} I(\vec{r}_P, \vec{s}') |\vec{n} \cdot \vec{s}'| d\Omega', \quad (3-70)$$

onde  $I(\vec{r}_P, \vec{s})$  é a intensidade de radiação na parede,  $\epsilon_P$  é a emissividade cinza da parede e  $\rho_P$  é refletividade cinza da parede que, no caso de superfície com transmissividade nula, é igual a  $(1 - \epsilon_P)$ . A Equação (3-70) só é válida para paredes opacas que emitem e refletem radiação de forma difusa.

Ao se resolver a Equação (3-69), é possível obter o fluxo de calor por radiação normal a uma superfície,  $q_r$ , pois este se relaciona com a intensidade de radiação total mediante  $dq_r = d(\vec{q}_r \cdot \vec{n}) = I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s} \cdot \vec{n} d\Omega' = I(\vec{r}, \vec{s}) \cos\theta d\Omega'$  (onde  $\theta$  é o ângulo polar do hemisfério). A integração, sobre a esfera unitária, fornece o fluxo total de calor por radiação (Siegel e Howel, 1992) normal a uma superfície de vetor unitário  $\vec{n}$ ,

$$q_r = \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s} \cdot \vec{n} d\Omega', \quad (3-71)$$

o termo fonte por radiação,  $\vec{S}_r$ , presente na Equação (3-7) é expresso como função da radiação incidente total,  $G$ , através da seguinte expressão,

$$\vec{S}_r = -\nabla \cdot \vec{q}_r \equiv \bar{a} \bar{G} - 4 \bar{a} \bar{n}^2 \sigma \bar{T}^4. \quad (3-72)$$

Esta relação é válida somente nas situações em que podem ser negligenciadas as correlações entre flutuações de temperatura, índice de refração, coeficiente de absorção e entre a intensidade de radiação e o coeficiente de absorção. Uma vez que o coeficiente de absorção é função da composição e da temperatura da mistura, os quais estão associados aos processos químicos, é de se esperar que as dependências não lineares nesta equação coloquem em cheque a validade da hipótese  $\overline{aG} = \bar{a} \bar{G}$  e  $\overline{an^2T^4} = \bar{a} \bar{n}^2 \bar{T}^4$  aqui empregada. Análises críticas destas hipóteses são raras (Coelho, 2007; Modest, 2003), e o problema de fechamento associado a estas correlações ainda é um problema aberto.

A equação de transporte radiante, seja na sua forma espectral [Equação (3-59)], ou cinza [Equação (3-69)], é uma equação integro-diferencial cuja solução analítica para geometrias multidimensionais é impossível. Mesmo na sua forma simplificada (i.e., quando o espalhamento é negligenciado) a solução da equação de transporte radiante [Equações (3-62), (3-63) e (3-68)] em

problemas complexos, tal como é o caso da combustão em equipamentos de porte laboratorial ou industrial, requer a integração longo dos caminhos do feixe, que em muitas ocasiões apresentam uma configuração Assim, o cálculo da radiação é um desafio numérico computacionalmente caro. De fato, para calcular a radiação térmica, são necessários de algoritmos que resolvam a equação de transferência radiante como função das coordenadas cartesianas e angulares. Também deve ser levada em conta a complexidade das propriedades radiantes do meio participante, que são funções do comprimento de onda (Yeoh e Yuen, 2009). Em outras palavras, a modelagem da radiação envolve (i) a disponibilidade de métodos analíticos/numéricos para resolver a equação de transferência radiante e, (ii) a determinação das propriedades radiantes do meio participante.

A discussão e formulação das propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem serão realizadas, respectivamente, nas seções 3.3.5 e 3.3.6, pois estes representam o principal foco de interesse do presente estudo. Abaixo, são brevemente descritas as principais características de quatro abordagens analíticas/numéricas que resolvem a equação de transferência radiante e também o modelo mais sofisticado, que será empregado nas simulações, isto é, o modelo de ordenadas discretas (*Discrete Ordinates Model, DOM*).

### **Breve Descrição de Modelos de Radiação na Resolução da Equação de Transporte Radiante**

Ao longo do tempo, diversos métodos foram desenvolvidos para resolver a Equação de Transporte Radiante. Estes incluem diversas aproximações analíticas, assim como métodos numéricos. A seguir, são descritos de maneira sucinta quatro modelos de radiação que são usualmente empregados na simulação da combustão em fornos e caldeiras.

O modelo  $P-N$  é uma aproximação analítica baseada no método de esféricos harmônicos que permite determinar uma solução aproximada de alta ordem de precisão. Para isto, transforma a equação de transporte da intensidade da radiação em um conjunto de equações diferenciais parciais acopladas. Este modelo foi inicialmente proposto por Jeans (1917) em seu trabalho de transferência radiante em estrelas e constelações. Atualmente, este modelo de radiação é frequentemente aplicado para descrever a radiação térmica em equipamentos de combustão de porte industrial, pois o meio participante (gases produtos da combustão e fuligem) usualmente apresenta grandes espessuras óptica, isto é,  $(a + \sigma_s)L_m \gg 1$ .

O modelo de radiação  $P-1$  é o mais simples da família  $P-N$ , sua solução é baseada na expansão da intensidade da radiação,  $I(\vec{r}, \vec{s})$ , sobre os quatro

primeiros termos da série ortogonal de esféricos harmônicos. Isto resulta em uma equação na qual o fluxo de calor radiante é proporcional ao gradiente da radiação incidente,  $\vec{q}_r = -\Gamma \nabla G$ . Neste caso,  $\Gamma$  depende das propriedades radiantes do meio, isto é, do coeficientes de absorção e de espalhamento e da constante de anisotropia linear. O modelo P-1 tem baixa exatidão, em particular, quando a espessura óptica é pequena. Além disso, este modelo prescreve uma reflexão difusa nas superfícies, isto é, a reflexão da radiação incidente acontece em todas as direções do ângulo sólido. Não obstante, é capaz de levar em conta a radiação espectral assim como o espalhamento global anisotrópico.

O modelo de Rosseland é, também, uma aproximação analítica que assume que a radiação incidente é equivalente à intensidade do corpo negro à temperatura do meio participante, ou seja,  $G \equiv 4\sigma n^2 T^4$ . Isto, leva a uma solução trivial para o fluxo de calor radiante  $\vec{q}_r = \Gamma \nabla G \equiv -16\sigma \Gamma n^2 T^3 \nabla T$ . Analogamente ao modelo P-1, o modelo de Rosseland assume que o meio participante é opticamente espesso, o que implica que a energia radiante emitida à partir das fronteiras para o domínio é totalmente absorvida pelo meio participante. Assim, o emprego deste modelo nas vizinhanças das paredes conduzirá a resultados poucos precisos. Uma vantagem do modelo Rosseland sobre o modelo P-1 é ser menos custoso, por não resolver a equação de transporte da radiação incidente. Não obstante, este modelo só é válido para meios opticamente espessos, ou seja,  $(a + \sigma_s)L_m > 3$ . De maneira similar ao modelo P-1, o modelo de Rosseland é capaz de descrever o espalhamento anisotrópico mediante o emprego da Equação (3-60).

O modelo de transferência discreta (*Discrete Transfer Radiation Model, DTRM*) foi desenvolvido por Lockwood e Shah (1981) supondo que a radiação que deixa um elemento de superfície em uma faixa de ângulos sólidos é aproximada por um feixe simples. Os caminhos que o feixe percorre são calculados e armazenados a priori. Assim, para cada face radiante, feixes são lançados para diversos ângulos polares e azimutais, e seu traçado determina os volumes de controle que os feixes interceptam e a distância percorrida em cada volume de controle. Assim, desprezando os efeitos de espalhamento, a solução da equação de transporte para o feixe que atravessa um volume de controle, conduz a  $I^{(n+1)} = I^{(n)}e^{-a\delta s} + \frac{\sigma T^4}{\pi} (1 - e^{-a\delta s})$ , onde  $I^{(n+1)}$  e  $I^{(n)}$  são as intensidade da radiação que sai e ingressa do volume de controle, e  $\delta s$  é a distância que percorre o feixe dentro do volume de controle. Assim, transferência de energia no escoamento devido à radiação é calculada levando-se em conta as mudanças da intensidade ao longo do caminho para cada feixe traçado através do volume de controle. Cabe enfatizar que o modelo

de transferência discreta assume uma radiação cinza e uma reflexão difusa nas superfícies. Porém, à diferença dos modelos  $P-1$  e Rosseland, este modelo permite descrever meios com uma ampla faixa de espessuras ópticas. A ausência dos efeitos de espalhamento do meio participante e o elevado custo computacional associado à integração ao longo dos feixes discretos são os principais inconvenientes do modelo de transferência discreta sobre os modelos  $P-1$  e Rosseland.

O modelo de ordenadas discretas (*Discrete Ordinates Model, DOM*) discretiza a equação de transporte da intensidade radiante em um número finito de ângulos sólidos, cada um deles associados a um vetor direção  $\vec{s}$  e a seu correspondente fator peso. Este modelo foi originalmente proposto por Chandrasekhar (1960) para problemas atmosféricos e da astrofísica, tem sido muito utilizado no cálculo da radiação térmica em equipamentos de combustão industrial pois cobre toda a faixa de espessuras ópticas e permite incluir os efeitos de espalhamento, anisotropia, radiação espectral e refração. Seu custo computacional é moderadamente mais alto do que os três modelos de radiação acima descritos, mesmo para um pequeno número de discretizações angulares. Portanto, requer computadores com excelentes capacidades de processamento e armazenamento. A seguir, serão detalhadas e discutidas as formulações que descrevem o modelo de ordenadas discretas.

### Modelo de Ordenadas Discretas (DOM)

No modelo de ordenadas discretas, a equação de transporte radiante, seja na sua forma espectral [equação (3-59)] ou cinza [equação (3-69)], é resolvida para um número finito de  $n$  direções  $\vec{s}_i$ , cujo termo da integral sobre todas as direções do ângulo é substituído por quadraturas numéricas. De forma geral, a aproximação por quadraturas da integral de uma função qualquer,  $f(\vec{s})$ , sobre a esfera unitária resulta em (Modest, 2003)

$$\int_0^{4\pi} f(\vec{s}) d\Omega' \approx \sum_{i=1}^n f(\vec{s}_i) w_i, \quad (3-73)$$

onde  $w_i$  são os pesos de quadratura associados às direções  $\vec{s}_i$ . Assim, a equação de transferência radiante que no caso cinza [Equação (3-69)] é aproximada no modelo DOM por um conjunto de  $n$  equações do tipo,

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s}_i)}{ds} = -(a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}_i) + an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \sum_{j=1}^n I(\vec{r}, \vec{s}_j) \Phi(\vec{s}_i, \vec{s}_j) w_j, \quad (3-74)$$

com condições de contorno,

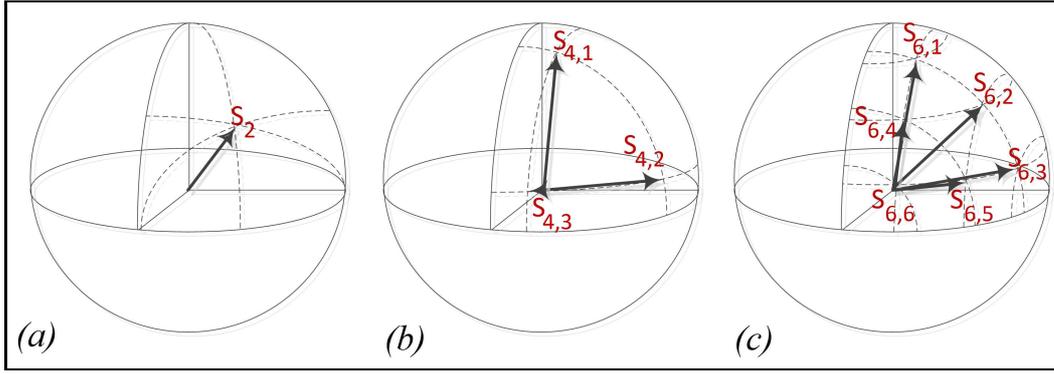


Figura 3.3: Método de ordenadas discretas em um octante de uma esfera unitária (a)  $S_2$ , (b)  $S_4$  e (c)  $S_6$ .

$$I(\vec{r}_P, \vec{s}_i) = \epsilon_P n^2 \frac{\sigma T_P^4}{\pi} + \frac{\rho_P}{\pi} \sum_{\vec{n} \cdot \vec{s}_j < 0} I(\vec{r}_P, \vec{s}_j) |\vec{n} \cdot \vec{s}_j| w_j, \vec{n} \cdot \vec{s}_i > 0. \quad (3-75)$$

A escolha do tipo de quadraturas é arbitrária, porém, é necessário que algumas condições sobre a direção,  $\vec{s}_i = \xi_i \vec{i} + \eta_i \vec{j} + \mu_i \vec{k}$ , e pesos angulares,  $w_i$ , sejam verificadas de forma a preservar a simetria e a satisfazer algumas restrições (Modest, 2003). Assim, é usual a escolha de um conjunto de pesos e direções que são completamente simétricos e que satisfaçam os momentos de ordem zero, um e dois,

$$\int_0^{4\pi} \Omega' = 4\pi \approx \sum_{i=1}^n w_i, \quad (3-76)$$

$$\int_0^{4\pi} \vec{s} d\Omega' = 0 \approx \sum_{i=1}^n \vec{s}_i w_i, \quad (3-77)$$

$$\int_0^{4\pi} \vec{s} \vec{s} d\Omega' = \frac{4\pi}{3} \delta \approx \sum_{i=1}^n \vec{s}_i \vec{s}_i w_i, \quad (3-78)$$

sendo  $\delta$  o tensor unitário. Diferentes conjuntos de direções e pesos satisfazem estes critérios. Por exemplo, a Tabela 3.1 e Figura 3.3 mostram como exemplo da aproximação de ordenadas discretas, as quadraturas calculadas por Jamaluddin e Smith (1988) sobre um octante, o qual relacionam o conjunto de cosenos diretores,  $\xi_i, \eta_i, \mu_i$ , ao seus respectivos pesos,  $w_j$ . Cabe ressaltar, que na Tabela 3.1, as diferentes  $S_N$  aproximações são associadas ao número de direções utilizadas sobre o domínio completo,  $4\pi$ , através de  $n = N(N + 2)$ .

A Equação (3-74) para o cálculo de  $I_i(\vec{r}) = I(\vec{r}, \vec{s}_i)$  e sua condição de contorno [Equação (3-75)] constituem um conjunto de  $n$  equações diferenciais parciais de primeira ordem. A sua solução pode ser obtida utilizando técnicas

Tabela 3.1: Quadraturas  $S_N$  sobre um octante (Jamaluddin e Smith, 1988).

Aproximação $S_N$		Ordenadas			Peso
		$\xi_i$	$\eta_i$	$\mu_i$	$w_i$
$S_2$		0,57735	0,57735	0,57735	1,57080
$S_4$	$S_{4,1}$	0,29588	0,29588	0,90825	0,52360
	$S_{4,2}$	0,90825	0,29588	0,29588	0,52360
	$S_{4,3}$	0,29588	0,90825	0,29588	0,52360
$S_6$	$S_{6,1}$	0,18387	0,18387	0,96560	0,16095
	$S_{6,2}$	0,69505	0,18387	0,69505	0,36265
	$S_{6,3}$	0,96560	0,18387	0,18387	0,16095
	$S_{6,4}$	0,18387	0,69505	0,69505	0,36265
	$S_{6,5}$	0,69505	0,69505	0,18387	0,36265
	$S_{6,6}$	0,96560	0,96560	0,18387	0,16095

analíticas ou de discretização (i.e., método de volumes finitos). Entretanto, isto requer o conhecimento da temperatura do meio participante a qual, em presença de combustão, é obtida através da solução da equação de transporte da energia. Assim, a Equação (3-74) pode ser discretizada em coordenadas cartesianas como

$$\xi_i \frac{\partial I_i}{\partial x} + \eta_i \frac{\partial I_i}{\partial y} + \mu_i \frac{\partial I_i}{\partial z} + \beta I_i = \beta S_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3-79)$$

onde  $\xi_i$ ,  $\eta_i$  e  $\mu_i$  são os cossenos diretores do vetor direção  $\vec{s}_i$  e,

$$\beta S_i = (1 - \omega) I_b + \frac{\omega}{4\pi} \sum_{j=1}^n I_j \Phi_{i,j} w_j, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3-80)$$

onde,  $\beta = a + \sigma_s$  é o coeficiente de extinção global e  $\omega = \sigma_s / (a + \sigma_s)$  é o espalhamento albedo. As Equações (3-79) e (3-80) constituem um conjunto de equações diferenciais acopladas. A forma discretizada destas equações pode ser obtida através da integração sobre o volume de controle elementar da Figura 3.4,

$$\int_V \xi_i \frac{\partial I_i}{\partial x} dV + \int_V \eta_i \frac{\partial I_i}{\partial y} dV + \int_V \mu_i \frac{\partial I_i}{\partial z} dV + \int_V \beta I_i dV = \int_V \beta S_i dV, \quad (3-81)$$

resultando, para uma malha cartesiana, em,

$$\xi_i (A_E I_{Ei} - A_W I_{Wi}) + \eta_i (A_N I_{Ni} - A_S I_{Si}) + \mu_i (A_T I_{Ti} - A_B I_{Bi}) = -\beta \Delta V I_{Pi} + \beta \Delta V S_{Pi}. \quad (3-82)$$

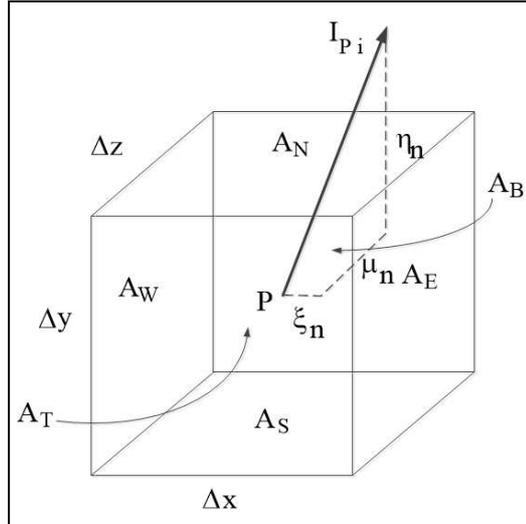


Figura 3.4: Volume de controle usado na representação tridimensional do modelo de ordenadas discretas.

O volume de controle elementar,  $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ , possui seis faces elementares: leste e oeste,  $A_E = A_W = \Delta y \Delta z$ , norte e sul  $A_N = A_S = \Delta x \Delta z$  e, acima e embaixo,  $A_T = A_B = \Delta x \Delta y$ . Na Equação (3-82),  $I_{Ei}$ ,  $I_{Wi}$ ,  $I_{Ni}$ ,  $I_{Si}$ ,  $I_{Ti}$  e  $I_{Bi}$  são as intensidades nas seis faces do volume elementar, enquanto que  $I_{Pi}$  e  $S_{Pi}$  são, respectivamente, a intensidade média e a função fonte média no centro do volume de controle elementar. A intensidades nas faces podem ser relacionadas à intensidade média no centro através da seguinte ponderação espacial,

$$I_{Pi} = \gamma_x I_{Ei} + (1 - \gamma_x) I_{Wi} = \gamma_y I_{Ni} + (1 - \gamma_y) I_{Si} = \gamma_z I_{Ti} + (1 - \gamma_z) I_{Bi}, \quad (3-83)$$

onde  $\gamma_x$ ,  $\gamma_y$  e  $\gamma_z$  são constantes chamadas de fatores peso, cujos valores situam-se entre 0 e 1. A adoção, arbitrária, de  $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 0,5$ , conhecida como esquema de diferença diamante, pode levar a intensidades de radiação com valores negativos. Isto ocorre devido à possível resolução espacial inadequada e/ou ao alto valor do coeficiente de absorção global do meio participante. Por outro lado, a escolha de  $\gamma_x = \gamma_y = \gamma_z = 1$ , que leva ao esquema “Upwind”, garante que as intensidades de radiação sejam sempre positivas. Porém, isto leva a uma menor ordem de precisão. Finalmente, o valor de  $I_{Pi}$  é obtido mediante a substituição da Equação (3-83) na Equação (3-82),

$$I_{Pi} = \frac{\frac{\xi_i}{\gamma_x} A_{WE} I_{Wi} + \frac{\eta_i}{\gamma_y} A_{SN} I_{Si} + \frac{\mu_i}{\gamma_z} A_{BT} I_{Bi} + \beta \Delta V S_{Pi}}{\frac{\xi_i}{\gamma_x} A_{WE} + \frac{\eta_i}{\gamma_y} A_{SN} + \frac{\mu_i}{\gamma_z} A_{BT} + \beta \Delta V}, \quad (3-84)$$

onde,  $A_{WE} = \gamma_x A_W + (1 - \gamma_x) A_E$ ,  $A_{SN} = \gamma_y A_S + (1 - \gamma_y) A_N$  e  $A_{BT} = \gamma_z A_B + (1 - \gamma_z) A_T$ . Uma vez que intensidade de radiação é calculada,  $I(\vec{r}, \vec{s}_i) = I_i(\vec{r}) = I_{Pi}$ , é possível obter o fluxo de calor radiante normal à superfície de vetor unitário  $\vec{n}$  como

$$q_r = \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s} \cdot \vec{n} d\Omega' \approx \sum_{i=1}^n I_i(\vec{r}) \vec{s}_i w_i, \quad (3-85)$$

e a radiação incidente é dada por

$$G = \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) d\Omega' \approx \sum_{i=1}^n I_i(\vec{r}) w_i. \quad (3-86)$$

Finalmente, o termo fonte de radiação,  $\vec{S}_r$ , da equação de conservação da energia [Equação (3-7)] é dado por

$$\vec{S}_r = -\nabla \cdot \vec{q}_r \approx a \sum_{i=1}^n I_i(\vec{r}) w_i - 4an^2 \sigma T^4. \quad (3-87)$$

Cabe ressaltar que estas três equações [Equações (3-84), (3-85) e (3-86)] são calculados para cada volume de controle do domínio em análise.

### 3.2.5

#### Modelo de Propriedades Radiantes dos Gases Produtos da Combustão

Segundo Bidi *et al.* (2008), a precisão na modelagem e simulação dos processos de transferência de energia por radiação em sistemas de combustão depende de duas características principais: (i) da ordem de precisão do método de solução da equação de transferência de calor por radiação, e (ii) da exatidão das propriedades radiantes do meio participante, i.e., dos gases produtos de combustão e da fuligem.

Tal como foi discutido na seção anterior, o modelo de ordenadas discretas (DOM) é a melhor escolha, em termos de ordem de precisão e abrangência para resolução da equação de transporte radiante (RTE). Nesta seção são abordados apenas os modelos que estimam as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão. A análise e formulação das propriedades radiantes da fuligem serão considerados na seção seguinte.

#### Breve Descrição das Abordagens de Solução no Cálculo das Propriedades Radiantes dos Gases Produtos da Combustão

Em qualquer processo de combustão de hidrocarbonetos com o ar, gases produtos de combustão, tais como dióxido de carbono,  $CO_2$ , e vapor de água,  $H_2O$ , são formados como resultado das reações químicas exotérmicas. Estes gases não espalham radiação de maneira significativa, porém, são fortemente

emissores e absorvedores de energia radiante. Esta absorção varia de maneira significativa com o comprimento de onda. Em particular, a hipótese de uniformidade espectral das propriedades radiantes destes gases, isto é, de gás cinza, pode levar a erros consideráveis no cálculo da radiação térmica, sobretudo, nas situações onde a espessura óptica é fina (Liu *et al.*, 1998). Esta é a principal razão pela qual a inclusão da dependência espectral das propriedades radiantes na equação de transporte da intensidade de radiação é indispensável para a correta predição dos processos de troca de energia térmica por radiação.

Assim, diversas abordagens foram desenvolvidas de maneira contabilizar a variação espectral das propriedades radiantes dos gases produtos de combustão e o emprego destes modelos depende da aplicação e do grau de exatidão requerida. Em muitas situações, a escolha apropriada é resultante do balanço entre acurácia e custo computacional. Estas abordagens podem ser agrupadas em três categorias, (i) Modelos de tipo linha-por-linha [do inglês *line-by-line*, *LBL*], (ii) Modelos de Banda [do inglês *Band Models*, *BM*] e (iii) Modelos globais que são baseados, principalmente, no conceito da Soma Ponderada dos Gases Cinzas [do inglês *Weighted Sum of Gray Gases*, *WSGGM*].

O modelo linha-por-linha [do inglês *Line by Line*, *LBL*] é aquele que apresenta os resultados mais exatos no cálculo de transferência de energia por radiação. Neste modelo, a equação de transporte radiante espectral (s-RTE) [Equação (3-59)] é integrada sobre o espectro molecular dos gases (Ozisick, 1973). Porém, uma vez que as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão variam fortemente através do espectro de comprimento de onda, precisa-se de milhares de linhas e/ou bandas, de maneira a descrever com exatidão a transferência de energia radiante. Assim, esta forte variação espectral conduz a uma grande dificuldade do modelo LBL, tanto em termos de processamento, quanto da implementação.

Os modelos de banda [do inglês *Band Models*, *BM*] são alternativas que aproximam as propriedades radiantes nas situações em que os modelos linha-por-linha (LBL) são inviáveis do ponto de vista do custo computacional (Boutoub *et al.*, 2006). Segundo o nível de informação, sofisticação e dificuldade de simulação numérica, esta abordagem pode ser classificada em três tipos, (i) modelos de banda-estreita [do inglês *Narrow-Band Model*, *NBM*] e, (ii) modelos de banda-larga [do inglês *Wide-Band Model*, *WBM*] também chamados de modelos de banda-larga-cinza [do inglês *Gray-Wide Band Model*, *GWB*].

Os modelos de banda-estreita (NBM) foram desenvolvidos para aproximar o comportamento médio do coeficiente de absorção espectral sobre um pequeno intervalo de comprimento de onda. Geralmente conduzem a expressões

analíticas para a transmissividade espectral,  $\tau_\lambda$ , que é ponderada sobre uma banda de comprimento de onda,  $\Delta\lambda$ , suficientemente pequena para que a intensidade radiante espectral do corpo negro,  $I_{b,\lambda}$ , possa ser suposta constante em seu interior. Uma vez que centenas de linhas de absorção podem estar contidas em banda de comprimento de onda, diversas hipóteses analíticas e estatísticas são feitas de maneira a calcular o valor equivalente da transmissividade espectral em cada intervalo. O domínio espectral típico dos modelos NBM, para o caso da determinação das propriedades radiantes espectrais de misturas  $CO_2-H_2O$ , frequentemente se encontra entre 1,43 e 67  $\mu m$ . Neste caso, necessita-se da distribuição de pelo menos 300 regiões de bandas estreitas. Portanto, a complexidade e o grande esforço computacional associado a este modelo não o torna suficientemente atraente para propósitos de aplicação na engenharia. Ainda assim, são comumente empregados para propósitos de validação (Yeoh e Yuen, 2009). Na atualidade diversos códigos computacionais tais como Radcal (Grosshandler, 1993) e EM2C (Soufiani e Taine, 1997) calculam as propriedades radiantes de gases produtos de combustão através do emprego de modelo de banda estreita. Neste estudo, o Radcal será empregado para o cálculo da radiação de gases produtos de combustão e da fuligem. Seu estudo, assim como a validação de seu acoplamento com software comercial da dinâmica dos fluidos computacional (Fluent<sup>TM</sup>) serão detalhados no capítulo seguinte.

Os modelos de banda larga-cinza (GWB) correspondem a uma simplificação significativa dos modelos de banda estreita, reduzindo os cálculos espectrais de 300 bandas para menos de 30. Esta redução é acompanhada de uma redução drástica do custo computacional. Porém, a simplificação associada leva a uma perda da exatidão nos cálculos da radiação.

Cabe ressaltar que, ambos os modelos de banda estreita (NBM) e de banda larga-cinza (GWB) são baseados na média espectral da emissividade, absorvidade e transmissividade. Esta média espectral introduz a necessidade de especificar, a priori, um caminho óptico (Yeoh e Yuen, 2009). Assim, no caso da simulação da radiação térmica na combustão em fornos e caldeiras, cujos domínios de análise apresentam geometrias complexas e tridimensionais, a escolha de um caminho óptico pode não ser óbvia.

Os modelos globais baseado no conceito da Soma Ponderada dos Gases Cinzas, [*Weighted Sum of Gray Gases Model, WSGGM*] (Hottel e Sarofim, 1967), são os mais frequentemente empregados para a determinação das propriedades radiantes dos gases produtos da combustão. Este modelo substitui o comportamento de um gás real (não-cinza) por um número finito de gases cinzas. Nestes gases cinzas a emissividade total,  $\varepsilon_T$ , do meio participante gasoso

é representado pela emissividade de gases cinzas (fictícios), as quais são ponderadas por um fator dependente da temperatura. A seguir é detalhada a formulação do modelo WSGGM.

### Modelos de Soma Ponderada dos Gases Cinzas, WSGGM

O modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) postula que a emissividade total,  $\epsilon_T$ , ao longo do caminho óptico do feixe é dada por,

$$\epsilon_T = \sum_{i=0}^I a_{\epsilon,i}(T) [1 - e^{-\kappa_i p L_m}], \quad (3-88)$$

onde  $a_{\epsilon,i}(T)$  é o fator peso da emissividade do  $i$ -ésimo gás cinza (fictício),  $\kappa_i$  é o coeficiente de absorção correspondente,  $p$  é a pressão parcial de todos os gases participantes e  $L_m$  é a extensão da trajetória também chamado de comprimento médio do feixe.

No modelo de soma ponderada de gases cinzas,  $\kappa_i$  depende da composição do gás enquanto que  $a_{\epsilon,i}(T)$  depende da composição e da temperatura do gás. Os fatores peso podem ser interpretados como frações de energia de corpo negro na região espectral na qual um gás cinza possui um coeficiente de absorção,  $\kappa_i$ , (em  $\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1}$ ). Desta forma, a somatória dos fatores peso deve respeitar a restrição

$$\sum_{i=0}^{N_g} a_{\epsilon,i}(T) = 1, \quad (3-89)$$

onde o coeficiente de absorção para  $i = 0$ ,  $\kappa_0$ , é assumido nulo. Isto, para levar em conta as janelas de espectro que existem entre as regiões de comprimento de onda de elevada absorção ( $\sum_{i=1}^{N_g} a_{\epsilon,i}(T) < 1$ ). Assim, o fator peso para  $i = 0$  é

$$a_{\epsilon,0}(T) = 1 - \sum_{i=1}^{N_g} a_{\epsilon,i}(T). \quad (3-90)$$

A dependência do fator peso para o  $i$ -ésimo gás cinza,  $a_{\epsilon,i}(T)$ , com a temperatura é representada por uma função polinomial,

$$a_{\epsilon,i}(T) = \sum_{j=0}^I b_{\epsilon,ij} T^{j-1}, \quad (3-91)$$

onde  $b_{\epsilon,ij}$  corresponde aos  $j$ -ésimo coeficiente polinomial do  $i$ -ésimo gás cinza. Tanto  $b_{\epsilon,ij}$  como  $\kappa_i$  são estimados a partir de dados experimentais.

Uma vez que a dependência de  $\kappa_i$  e  $a_{\epsilon,i}(T)$  com a composição é fraca, seus valores podem ser assumidas como sendo constantes. Smith *et al.* (1982)

empregaram funções polinomiais de terceira ordem da temperatura, para calcular os fatores peso,  $a_{\epsilon,i}(T)$ . A Tabela 3.2 apresenta os valores propostos por Smith *et al.* (1982) dos coeficientes  $b_{\epsilon,ij}$  e  $\kappa_i$ . Estes valores foram previamente validados para  $0,01 < pL_m < 10$  atm.m e  $600 < T < 2400$  K.

Tabela 3.2: Coeficientes polinomiais de Smith *et al.* (1982) utilizados no modelo WSGGM.

$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$					
i	$\kappa_i$ [m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup> ]	$b_{\epsilon,i,1} \times 10^1$	$b_{\epsilon,i,2} \times 10^4$	$b_{\epsilon,i,3} \times 10^7$	$b_{\epsilon,i,4} \times 10^{11}$
1	0,4201	6,508	-5,551	3,029	-5,353
2	6,516	-0,2504	6,112	-3,882	6,528
3	131,9	2,718	-3,118	1,221	-1,612

$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$					
i	$\kappa_i$ [m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup> ]	$b_{\epsilon,i,1} \times 10^1$	$b_{\epsilon,i,2} \times 10^4$	$b_{\epsilon,i,3} \times 10^7$	$b_{\epsilon,i,4} \times 10^{11}$
1	0,4303	5,150	-2,303	0,9779	-1,494
2	7,055	0,7749	3,399	-2,297	3,730
3	178,1	1,907	-1,824	0,5608	-0,5122

Mossi (2011) atualizou os dados de  $a_{\epsilon,i}(T)$  e de  $\kappa_i$  propostos por Smith *et al.* (1982) utilizando, para isto, o modelo LBL com dados atualizados de base de dados de HITEMP. Os valores destes coeficientes são transcritos na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Coeficientes polinomiais de Mossi (2011) utilizados no modelo WSGGM.

$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2,0$					
i	$\kappa_i$ [m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup> ]	$b_{\epsilon,i,1} \times 10^1$	$b_{\epsilon,i,2} \times 10^4$	$b_{\epsilon,i,3} \times 10^7$	$b_{\epsilon,i,4} \times 10^{11}$
1	0,5240	3,6586	1,2215	0,3844	-3,3917
2	9,0553	2,5820	-0,3474	-0,3223	0,6287
3	141,99	1,2252	-0,5629	-0,1780	0,9547

$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1,0$					
i	$\kappa_i$ [m <sup>-1</sup> atm <sup>-1</sup> ]	$b_{\epsilon,i,1} \times 10^1$	$b_{\epsilon,i,2} \times 10^4$	$b_{\epsilon,i,3} \times 10^7$	$b_{\epsilon,i,4} \times 10^{11}$
1	0,5023	4,0831	1,1982	-7,3069x10 <sup>-3</sup>	-2,2417
2	9,3261	2,7241	-1,4359	6,4469x10 <sup>-1</sup>	-1,5907
3	181,09	0,8683	7,4289x10 <sup>-2</sup>	-5,3027x10 <sup>-1</sup>	1,5944

Uma vez que a emissividade total é determinada pela Equação (3-88), o coeficiente de absorção global,  $a_g$ , da mistura  $CO_2-H_2O$ , gases produtos da combustão é

$$a_g = -\frac{1}{L_m} \ln(1 - \epsilon_T), \quad (3-92)$$

cujo valor,  $a = a_g$  (para  $a_{soot} = 0$ ) é usado na equação de transporte radiante cinza [Equação (3-68) ou Equação (3-69)] para determinar a intensidade de radiação cinza do escoamento em presença apenas da mistura  $CO_2-H_2O$ , como meio participante.

### 3.2.6

#### Modelo de Propriedades Radiantes da Fuligem

A preocupação em descrever a transferência de energia por radiação da combustão em fornos e caldeiras industriais iniciou-se nos anos 20. O dióxido de carbono e o vapor de água formados durante combustão foram identificados como responsáveis pela absorção e emissão de energia radiante. As partículas de fuligem, formadas pela combustão incompleta de hidrocarbonetos com o ar, também participam ativamente no processo de transferência de energia por radiação.

Tal como foi detalhado na seção 3.2.3, o “ciclo de vida” da fuligem em um processo de combustão inicia-se com a formação de precursores, hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, a qual acontece nas regiões de chamas ricas em combustível. Esta é seguida pela nucleação das partículas incipientes da fuligem que atingem, tipicamente, até 1 nm de diâmetro. O crescimento da superfície das partículas da fuligem, que envolve reações com acetileno e/ou outras partículas de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, ocorre simultaneamente com a coagulação e a aglomeração das partículas de fuligem em pacotes e/ou filamentos. Estes filamentos podem atingir tamanhos de até dezenas de nanômetros. O último processo elementar é a oxidação, que acontece nas regiões do escoamento ricas em oxigênio e/ou radicais hidroxila.

Para prever as propriedades radiantes da fuligem é necessário determinar, a priori, as propriedades extensivas que caracterizam a sua produção (quantidade, forma, distribuição de tamanho das partículas, etc.) assim como suas propriedades ópticas (índice complexo de refração). Estudos recentes foram realizados para determinar as propriedades radiantes da fuligem quando dispersa em um meio contínuo, o que é uma tarefa complicada devido, principalmente, à complexidade da estrutura da fuligem.

Assim, determinação dos processos físico-químicos e radiantes associados à fuligem ainda está em desenvolvimento. A caracterização da formação/consumo da fuligem em processos de combustão turbulenta é, na atualidade, um dos principais desafios a superar. Por outro lado, é necessário que modelos de propriedades radiantes da fuligem sejam suficientemente abrangentes, e levem em conta as suas propriedades extensivas e ópticas, de forma a se obter a melhor aproximação possível dos processos de transferência

de energia por radiação.

Assim, um modelo capaz de relacionar a radiação com a fuligem é aquele que determina as propriedades radiantes da fuligem (i.e. coeficientes de absorção e de espalhamento), como função de sua concentração e de outras propriedades (i.e., peso molecular, forma, tamanho, etc.). Nas seções seguintes, é considerada a formulação semi-emprírica de Sazhin (1994) para o cálculo do coeficiente de absorção global da fuligem. Em seguida, a teoria de absorção/espalhamento Mie no limite Rayleigh será abordada brevemente. Isto visa obter formulações que descrevam o comportamento espectral das propriedades radiantes e ópticas da fuligem. Esta última abordagem descreve a atenuação de um feixe de luz que incide sobre conjunto de partículas esféricas homogêneas (monodispersas) e não homogêneas (polidispersas).

### Formulação Semi-emprírica de Sazhin (1994)

O modelo semi-emprírico de Sazhin (1994) estabelece uma correlação direta entre o coeficiente de absorção global da fuligem,  $a_{soot}$ , e a concentração mássica média da fuligem,  $\overline{M}_{soot} = [X_{soot}]$ , através da seguinte equação

$$a_{soot} = b_1[X_{soot}] (1 + b_T(T - 2000)), \quad (3-93)$$

onde  $T$  é a temperatura dos gases produtos da combustão e  $\overline{M}_{soot} = [X_{soot}] = \tilde{Y}_{soot}\bar{\rho} = f_V\rho_{soot}$  é a concentração mássica da fuligem em  $\text{kg}/\text{m}^3$  ( $f_V$  é a fração volumétrica da fuligem). As constantes  $b_1$  e  $b_T$  são ajustadas a partir de dados experimentais. Sazhin (1994) calculou os dados experimentais de Smith *et al.* (1981) e obteve os valores de  $b_1$  e  $b_T$  como sendo iguais a  $1.232,3 \text{ m}^2/\text{kg}$  e  $4,8 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ , respectivamente.

Assim, o coeficiente de absorção global,  $a$ , é calculado a soma dos coeficientes de absorção global dos gases produtos da combustão,  $a_g$ , e da fuligem,  $a_{soot}$ ,

$$a = a_g + a_{soot}, \quad (3-94)$$

cujo valor é usado na equação de transporte radiante cinza (g-RTE) [Equações (3-68) e 3-69)] para o cálculo da radiação térmica.

### Abordagem Geral da Teoria de Espalhamento Radiante de Partículas Dispersas – Teoria de Mie no Limite de Rayleigh

As leis que governam a interação entre um meio contínuo e um meio disperso são mais complexas do que aqueles que governam interações entre meios contínuos. Para prever a transferência de calor radiante em um meio

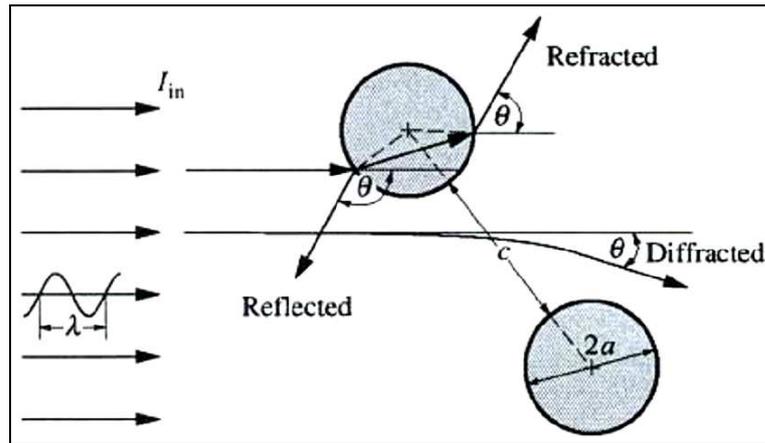


Figura 3.5: Interação entre ondas electromagnéticas e partículas esféricas (Modest, 2003).

particulado, tal como a fuligem, é necessário conhecer, a priori, a interação entre as partículas e a radiação incidente. Em condições usuais de combustão, o meio particulado é composto de partículas de diversas formas e tamanhos. A fim de descrever as propriedades radiantes deste meio, algumas hipóteses simplificadoras são utilizadas.

Quando um fóton interage com um meio que contém pequenas partículas, a sua intensidade de radiação pode ser modificada devido aos efeitos de absorção e espalhamento. O espalhamento é o resultado do encontro entre um fóton e uma ou várias partículas, durante o qual o fóton não perde a totalidade de sua energia. Porém, sua direção de propagação muda e ocorre ganho ou perda parcial de energia.

O espalhamento de ondas (fótons) que atravessam uma nuvem de partículas esféricas é a consequência de três fenômenos,

1. **Reflexão.**- quando as ondas electromagnéticas são refletidos pelas partículas.
2. **Refração.**- quando as ondas electromagnéticas que penetram nas partículas são parcialmente absorvidos antes de partirem em uma direção diferente da incidente.
3. **Difração.**- quando a direção das ondas electromagnéticas que passam nas imediações das partículas são alteradas pela sua presença.

A Figura 3.5 apresenta de maneira esquemática os três fenômenos correspondentes ao espalhamento. Assim, as propriedades radiantes de uma nuvem de partículas esféricas de raio  $a = d_p/2$ , interage com uma onda electro-magnética, cujo comprimento de onda é  $\lambda$ , depende (Siegel 2002),

1. da forma da partícula, que pode ser esférica, cilíndrica, etc.
2. do material da partícula, caracterizado pelo seu índice complexo de refração,  $m = n - iq$ .
3. do tamanho relativo entre a partícula e a onda que a atravessa, caracterizado pelo parâmetro de tamanho,  $\alpha = 2\pi a/\lambda = \pi d_p/\lambda$ .
4. do espaçamento existente entre partículas, dado pela razão da distância entre partículas e o comprimento de onda,  $c/\lambda$ .

A maioria de fótons são espalhados de forma elástica, isto é, a energia (frequência e comprimento de onda) é invariante. Uma pequena fração de fótons é espalhada de maneira inelástica (Espalhamento Raman) e reaparecem com um comprimento de onda diferente. Para casos de transferência de calor por radiação, o espalhamento Raman é pouco importante diante do espalhamento elástico.

A interação da radiação com uma partícula de tamanho e forma definida pode ser descrita considerando-se uma onda monocromática incidente, mediante aplicação das equações de Maxwell. Assim, serão apresentados as formulações que descrevem as propriedades radiantes de uma nuvem de partículas esféricas.

A quantidade de absorção e espalhamento de uma partícula é usualmente expressa em termos da seção transversal de absorção,  $C_{abs}$  e do espalhamento,  $C_{sca}$ . A quantidade total de absorção e espalhamento é definida como sendo a seção transversal de extinção,  $C_{ext}$ ,

$$C_{ext} = C_{abs} + C_{sca}. \quad (3-95)$$

A seção transversal do espalhamento,  $C_{sca}$ , é a área necessária a um objeto para desviar a radiação do feixe incidente. Este parâmetro, além de depender do tamanho do objeto, também depende de sua forma, de seu material, do comprimento de onda e da polarização. Definições análogas são aplicáveis para  $C_{abs}$  e  $C_{ext}$ .

O espalhamento é frequentemente associado ao fator de eficiência,  $Q$ , que é definido como a razão entre a seção transversal do espalhamento e a seção transversal da área projetada da partícula esférica,

$$Q_{abs} = 4C_{abs}/\pi d_p^2, \quad (3-96)$$

de forma análoga para a absorção e extinção, obtém-se,

$$Q_{sca} = 4C_{sca}/\pi d_p^2, \quad (3-97)$$

$$Q_{ext} = 4C_{ext}/\pi d_p^2. \quad (3-98)$$

Da substituição das Equações (3-96)–(3-98) na Equação (3-95) pode ser verificado que,

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{sca}. \quad (3-99)$$

Devido à simetria esférica da partícula considerada, a radiação é defletida apenas no ângulo polar  $\theta$  (ver Figura 3.5). A intensidade de onda espalhada com ângulo  $\theta$  é proporcional a duas funções de amplitude complexas,  $S_1(\theta)$  e  $S_2(\theta)$ , determinadas pela teoria de Mie como (van de Hulst, 1981),

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \cdot \pi_n(\cos \theta) + b_n \cdot \tau_n(\cos \theta)], \quad (3-100)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [b_n \cdot \pi_n(\cos \theta) + a_n \cdot \tau_n(\cos \theta)]. \quad (3-101)$$

Nas Equações (3-100) e (3-101), os índices denotam as duas polarizações complexas,  $\pi_n(\cos \theta)$  e  $\tau_n(\cos \theta)$  são funções da direção  $\theta$ , e os valores de  $a_n$  e  $b_n$  são os coeficientes de espalhamento Mie, determinados mediante o emprego de funções complexas, tais como as de Ricatti-Bessel (Modest, 2003). De posse destas polarizações, a intensidade de radiação espalhada pela partícula,  $I_{sca}$ , com um ângulo  $\theta$  a partir de um feixe não polarizado incidente,  $I_{in}$ , é calculado, por,

$$\frac{I_{sca}(\theta)}{I_{in}} = \frac{i_1 + i_2}{2\alpha^2}, \quad (3-102)$$

onde  $\alpha = \pi d_p/\lambda$  é o parâmetro de tamanho, e  $i_1$  e  $i_2$  são as intensidades polarizadas, calculadas a partir de

$$i_1(\alpha, m, \theta) = |S_1|^2 \quad i_2(\alpha, m, \theta) = |S_2|^2. \quad (3-103)$$

Da Eq. (3-103) é possível determinar a quantidade total de energia espalhada por uma partícula esférica em todas as direções,

$$Q_{sca} = \frac{4C_{sca}}{\pi d_p^2} = \frac{4 \int_0^{4\pi} \frac{d_p^2}{4} \left( \frac{I_{sca}(\theta)}{I_{in}} \right) d\Omega}{\pi d_p^2} = \frac{1}{\alpha^2} \int_0^\pi (i_1 + i_2) \sin \theta d\theta. \quad (3-104)$$

O espalhamento Rayleigh é um caso particular da Teoria de espalhamento Mie, para o qual o diâmetro das partículas suspensas é pequeno diante do comprimento de onda electromagnética que incide sobre a nuvem de partículas,

isto é,  $\alpha = \pi d_p / \lambda \ll 1$ . Isto é verificado em moléculas de gases e para algumas partículas sólidas multimoleculares, tais como a fuligem, que podem ser consideradas como espalhando no limite de Rayleigh.

O limite aproximado de diâmetro para o qual as partículas das nuvens verificam a teoria de espalhamento Rayleigh é  $\alpha < 0,3$ . No caso particular da fuligem gerada em chamas não fuliginosas, cujos diâmetros são inferiores a 10 nm e quando estas são irradiadas com luz com comprimento de onda maior que  $3 \mu\text{m}$ , obtém-se,  $\alpha < 0,01$ . De forma geral, no limite no qual  $\alpha \rightarrow 0$ , os valores de  $S_1(\theta)$  e  $S_2(\theta)$  obtidos pela teoria de Mie [Equações (3-100) e (3-101)] são simplificados para,

$$S_2(\theta) = S_1(\theta) \cos \theta = i \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \alpha^3 \cos \theta, \quad (3-105)$$

onde  $S_1(\theta)$  e  $S_2(\theta)$  são as funções de amplitude complexas. Uma vez conhecidas as expressões para  $S_1(\theta)$  e  $S_2(\theta)$  é possível determinar, segundo a Equação (3-103), as intensidades polarizadas  $i_1(\alpha, m, \theta)$  e  $i_2(\alpha, m, \theta)$ . Estas podem ser substituídas na Equação (3-104) para obter os fatores de eficiência de espalhamento e de extinção no regime Rayleigh,

$$Q_{sca} = \frac{1}{\alpha^2} \int_0^\pi (i_1 + i_2) \sin \theta d\theta = \frac{8}{3} \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 \alpha^4, \quad (3-106)$$

$$Q_{ext} = \frac{4}{\alpha^2} \Re \{S_1(0)\} = -4\Im \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right\} \alpha \approx Q_{abs}, \quad (3-107)$$

onde a aproximação, na Equação (3-107), é devido a  $\alpha^4 \ll \alpha$  quando  $\alpha < 1$ . Neste caso, o espalhamento pode ser considerado como desprezível diante da absorção. Nota-se, da Equação (3-106), a seguinte dependência

$$Q_{sca} \propto \alpha^4 \propto \frac{1}{\lambda^4}. \quad (3-108)$$

Ou seja, para o caso geral do espalhamento Rayleigh, a energia espalhada pela partícula esférica da fuligem em qualquer direção é proporcional ao inverso da quarta potência do comprimento de onda de radiação. Esta dependência indica que quando menor o comprimento de onda de radiação maior o espalhamento. A função fase (ver Figura 3.6), segundo o espalhamento Rayleigh, é igual a,

$$\Phi(\theta) = \frac{3}{4}(1 + \cos^2 \theta), \quad (3-109)$$

Por outro lado, a Equação (3-106) mostra que a absorção de uma partícula esférica de fuligem obedece,

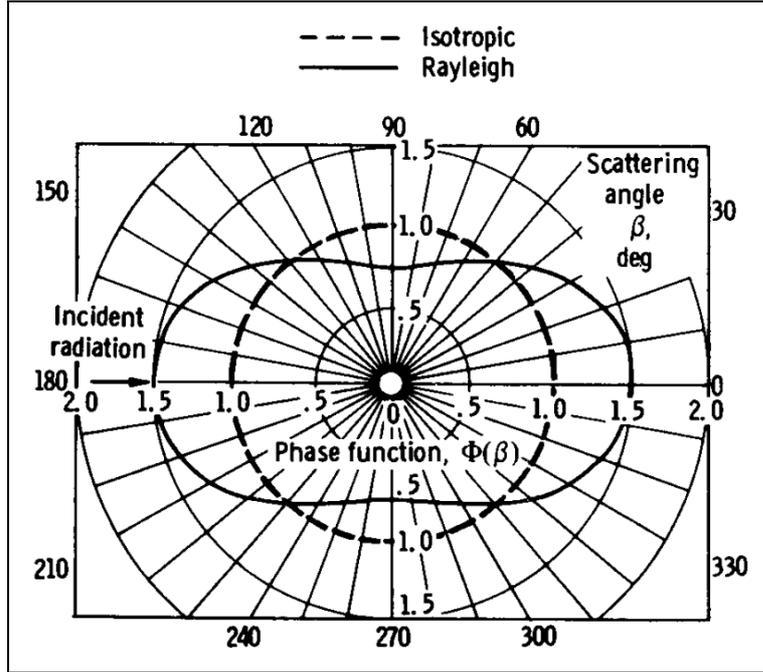


Figura 3.6: Função Fase para os espalhamentos Rayleigh e isotrópico (Siegel, 2002). Neste gráfico  $\beta$  corresponde ao ângulo polar  $\theta$ .

$$Q_{abs} \propto \alpha \propto \frac{1}{\lambda}, \quad (3-110)$$

ou seja, é inversamente proporcional ao comprimento de onda.

Assim, para o caso de uma nuvem de pequenas partículas de fuligem não uniformes, o coeficiente de absorção espectral,  $a_\lambda$ , é calculado por,

$$a_\lambda = \frac{\pi}{4} \int_0^\infty Q_{abs} d_p^2 dN(d_p) = -\pi \Im \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right\} \int_0^\infty \left( \frac{\pi d_p}{\lambda} \right) d_p^2 dN(d_p). \quad (3-111)$$

onde  $N(d_p)$  é uma distribuição de diâmetros de partículas de fuligem. Uma vez que a fração volumétrica,  $f_V = Y_{soot} \rho_g / \rho_{soot}$ , de uma nuvem de partículas de fuligem não homogêneas pode ser expressa por,

$$f_V = \int_0^\infty \left( \frac{\pi d_p^3}{6} \right) dN(d_p), \quad (3-112)$$

o coeficiente de absorção espectral da fuligem pode ser escrito como função da fração volumétrica da fuligem mediante a substituição da Equação (3-112) na Equação (3-111),

$$a_\lambda = \Im \left\{ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right\} \frac{6\pi f_V}{\lambda}. \quad (3-113)$$

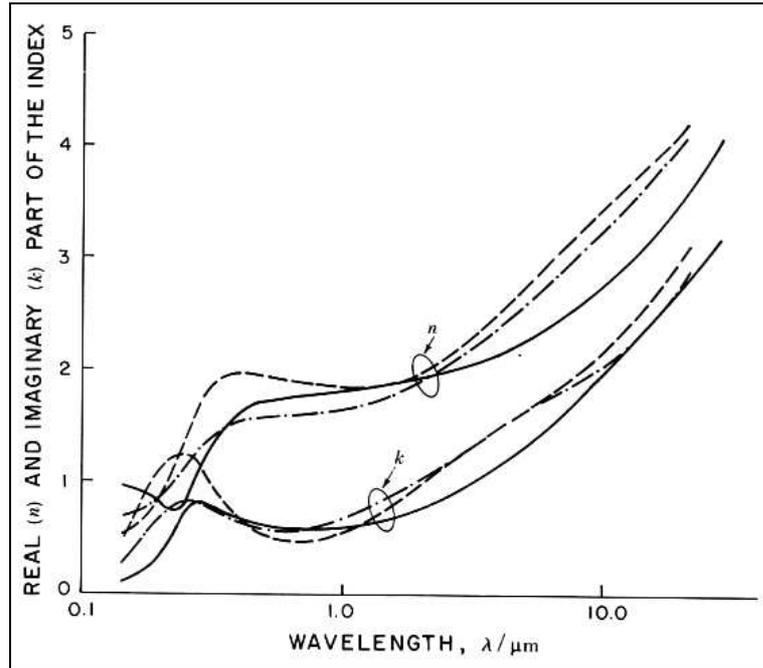


Figura 3.7: Comparação do índice de refração determinado por (a) — Chang e Charalampopoulos (1990) (b) - - - Lee e Tien (1980), e, (c) -.- Dalzell and Sarofim (1969). [Extraído de Chang e Charalampopoulos (1990)].

A substituição do índice de refração,  $m = n - iq$ , na Equação (3-113), fornece,

$$a_\lambda = \frac{36\pi nq}{(n^2 - q^2 + 2)^2 + 4n^2q^2} \frac{f_V}{\lambda} = C_\lambda \frac{f_V}{\lambda}, \quad (3-114)$$

sendo que  $C_\lambda$  é um parâmetro que depende do índice de refração. Desta forma, para partículas suficientemente pequenas, o coeficiente de absorção espectral da fuligem obtido da teoria de Rayleigh [Equação (3-114)] não depende da distribuição de tamanho de partículas, mas somente da fração de volume ocupado pelas partículas de fuligem,  $f_V$ .

No que diz respeito às propriedades ópticas da fuligem, o índice complexo de refração,  $m = n - iq$ , tem sido objeto de estudos. Durante os últimos trinta anos esta propriedade foi caracterizada através de experimentos que admitem que a fuligem é composta de partículas de carbono sólido, de diversos tamanhos e formas de aglomerados. Modest (2003) realizou uma revisão bibliográfica da caracterização do índice de refração da fuligem. A Figura 3.7 mostra a dependência do índice de refração da fuligem com o comprimento de onda, obtida experimentalmente por Dalzell and Sarofim (1969) mediante a medição do coeficiente de reflexão de superfícies aglomeradas de fuligem.

Chang e Charalampopoulos (1990) determinaram uma correlação semi-empírica para as partes real e imaginária do índice de refração, funções do

comprimento de onda,

$$n = 1,811 + 0,1263 \ln \lambda + 0,270 \ln^2 \lambda + 0,0417 \ln^3 \lambda, \quad (3-115)$$

$$q = 0,5821 + 0,1213 \ln \lambda + 0,2309 \ln^2 \lambda - 0,0100 \ln^3 \lambda, \quad (3-116)$$

cuja aplicação é garantida na faixa  $0,4 \leq \mu \leq 30 \mu\text{m}$ .

De maneira análoga ao cálculo do coeficiente de absorção espectral da fuligem segundo a teoria de Rayleigh, o coeficiente de espalhamento espectral pode ser calculado mediante a substituição de  $Q_{sca}$  da Equação (3-106)

$$\sigma_{s,\lambda} = \frac{\pi}{4} \int_0^\infty Q_{sca} d_p^2 dN(d_p) = \frac{2\pi}{3} \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2 \int_0^\infty \left( \frac{\pi d_p}{\lambda} \right)^4 d_p^2 dN(d_p), \quad (3-117)$$

e mediante o emprego da Equação (3-112), a Equação (3-117) é simplificada para,

$$\sigma_{s,\lambda} = \frac{4\alpha^4 f_V}{d_p} \cdot \frac{[(n^2 - q^2 - 1)(n^2 - q^2 + 2) + 4n^2 q^2]^2 + 36n^2 q^2}{(n^2 - q^2 + 2)^2 + 4n^2 q^2}. \quad (3-118)$$

Tal como foi discutido anteriormente, o valor do coeficiente de espalhamento espectral da fuligem,  $\sigma_{s,\lambda}$ , da teoria de Rayleigh é muito pequeno diante o coeficiente de absorção espectral da fuligem,  $a_\lambda$ .

### 3.3

#### Formulação Matemática do Transporte e Evaporação de Gotículas (Droplets) Segundo a Abordagem Euleriana-Lagrangiana

Atualmente, existem duas abordagens clássicas para a modelagem de “sprays”: (i) a abordagem Euleriana-Lagrangiana, e, (ii) a abordagem Euleriana-Euleriana.

No que diz respeito à abordagem Euleriana-Euleriana, ambas as fases contínua (gases reagentes e produtos de combustão) e discreta (partículas de combustível líquido ou gotículas) são descritas como meios contínuos que se interpenetram. Uma vez que o volume de uma fase não pode ser ocupado pela outra fase, o conceito de volume fásico é introduzido. Estas frações de volume são assumidas como sendo funções contínuas do espaço e do tempo, cuja soma é sempre igual à unidade. As equações de conservação para cada fase são derivadas de maneira a obter um conjunto de equações que possuem a

mesma estrutura para ambas as fases. Estas equações são fechadas através de relações constitutivas, as quais são obtidas através de informações empíricas e/ou da aplicação da teoria cinemática da matéria.

No que diz respeito à abordagem Euleriana-Lagrangiana, os gases reagentes e produtos da combustão, fase contínua, são descritos mediante a formulação que resolve as equações de transporte no referencial Euleriano. O combustível líquido, fase dispersa, é tratado no referencial Lagrangeano. Isto envolve rastrear um grande número de gotículas (*droplets*), transportadas pelo escoamento da fase contínua. Esta abordagem é utilizada para a modelagem da combustão turbulenta em “sprays”.

A abordagem Euleriana-Lagrangeana é válida sob a hipótese de que a fase dispersa ocupa uma pequena fração de volume em relação à fase contínua. Assim, as trajetórias das partículas que representam a fase discreta são determinadas individualmente como função do tempo. A seguir é utilizada a abordagem Euleriana-Lagrangeana para descrever o transporte e vaporização das partículas de combustível líquido transportadas em um meio contínuo. Esta abordagem é também conhecida como Modelo de Fase Discreta [*Discrete Phase Model, DPM*].

### 3.3.1 Dinâmica das Partículas

O balanço de quantidade de movimento, no referencial Lagrangeano, de uma partícula líquida (ou gotícula) que interage com a fase gasosa (contínua), é dada por,

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_D (\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}}{\rho_p} (\rho_p - \rho) + \vec{F}, \quad (3-119)$$

onde  $\vec{u}_p$  e  $\rho_p$  correspondem à componente instantânea de velocidade e à densidade da partícula considerada,  $\vec{u}$  e  $\rho$  são a velocidade e densidade do fluido (meio contínuo),  $\vec{g}$  e  $\vec{F}$  correspondem, respectivamente, à aceleração da gravidade e a uma aceleração adicional (força por unidade de massa da partícula). O termo  $F_D (\vec{u} - \vec{u}_p)$  está relacionado a força de arrasto por unidade de massa da partícula, cujo coeficiente  $F_D$ , definido como “frequência de arrasto”, é dado por,

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re_d}{24}, \quad (3-120)$$

onde,  $d_p$  é o diâmetro da partícula,  $C_D$  seu coeficiente de arrasto,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido e,  $Re_d$  é o número de Reynolds baseado no diâmetro e velocidade relativa da gotícula, e é definido como,

$$Re_d = \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu}. \quad (3-121)$$

A incorporação das forças adicionais,  $\vec{F}$ , no balanço de forças que atuam sobre a partícula [Equação (3-119)] pode ser necessária dependendo dos efeitos que agem sobre a partícula. Assim forças, tais como as relacionadas à massa virtual, à termoforese, ao movimento Browniano, ao empuxo de Staffman, etc., podem ser levadas em conta na análise da dinâmica da partícula através deste termo.

Dentre estas forças, a de termoforese é a única ocasionalmente levada em conta no tratamentos de fenômenos relacionados à combustão turbulenta. Esta força é o resultado da suspensão, em um gás, de pequenas partículas que se encontram submetidas a um gradiente de temperatura. Como consequência, estas experimentam uma força na direção oposta ao gradiente de temperatura. Assim, a força adicional que atua sobre a partícula como consequência da termoforese é,

$$\vec{F}_{tf} = -D_{T,p} \frac{1}{m_p T_p} \nabla T, \quad (3-122)$$

onde,  $T_p$ , é a temperatura da partícula e  $D_{T,p}$  é o coeficiente de termoforese, que pode ser descrito, por exemplo, pela formulação sugerida por Talbot *et al.* (1980),

$$D_{T,p} = \frac{6\pi d_p \mu^2 C_s (k/k_p - C_t K_n)}{\rho (1 + 3C_m K_n) (1 + 2k/k_p + 2C_t K_n)}. \quad (3-123)$$

Nesta equação,  $k$  e  $k_p$  representam a condutividade térmica do fluido e da partícula,  $K_n = 2\eta/d_p$  o número de Knudsen (razão entre o o caminho médio molecular e o diâmetro da partícula), e  $T$  a temperatura do fluido. As constantes  $C_s$ ,  $C_t$  e  $C_m$  foram definidas por Talbot *et al.* (1980) como sendo iguais a 1, 17, 2, 18 e 1, 14, respectivamente. Cabe ressaltar que esta equação é válida no caso em que a partícula possui forma esférica e quando o fluido é um gás perfeito.

A determinação do coeficiente de arrasto de gotículas (droplets) é crucial para a predição de seu transporte em modelos de “sprays”. Assim, são necessários modelos que determinem de maneira dinâmica o coeficiente de arrasto destas gotículas, ou seja, que sejam capazes de levar em conta a variação da forma da gotícula ao longo de sua trajetória.

Embora a forma de uma gotícula transportada em um meio gasoso seja muitas vezes considerada esférica, esta pode ser significativamente distorcida quando o número de Weber (razão entre a inércia e a tensão superficial na gota) é grande. Em casos extremos, a forma da gotícula pode se assemelhar

a um disco, cujo coeficiente de arrasto é significativamente maior do que o da esfera.

Diversas formulações empíricas foram desenvolvidas para o cálculo do coeficiente de arrasto,  $C_D$ , cujo emprego depende das considerações geométricas e dinâmicas das partículas. A maioria dos modelos de arrasto supõe que as gotículas sempre apresentam uma forma esférica. Sob esta hipótese, o coeficiente de arrasto de uma gotícula esférica é determinada pela seguinte equação (Nooren *et al.*, 1997),

$$C_{D,esf} = \begin{cases} 0,424 & \text{se } Re_d > 1.000 \\ \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{2/3}\right) & \text{se } Re_d \leq 1.000 \end{cases} \quad (3-124)$$

onde  $C_{D,esf}$ , corresponde ao coeficiente de arrasto das partículas de forma esférica.

A trajetória da gotícula pode ser descrita por meio da integração do balanço das forças que atuam sobre ela, e é descrita por

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{u}_p, \quad (3-125)$$

onde a velocidade da partícula dada na Equação (3-119) pode ser escrita, na sua forma geral, como

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{1}{\tau_p} (\vec{u} - \vec{u}_p) + \vec{a}_p. \quad (3-126)$$

Nota-se que as Equações (3-125) e (3-126) correspondem a um conjunto de equações diferenciais ordinárias acopladas onde,

$$\tau_p = \frac{1}{F_D}, \quad (3-127)$$

$$\vec{a}_p = \frac{\vec{g}}{\rho_p} (\rho_p - \rho) + \vec{F}. \quad (3-128)$$

Nas Equações (3-126) e (3-127),  $\tau_p$  é o tempo característico do arrasto, enquanto que o termo  $\vec{a}_p$  é a aceleração da gotícula devido às forças que atuam sobre a ela, com exceção da força de arrasto.

### 3.3.2 Dispersão Turbulenta das Partículas

A dispersão das gotículas devido ao efeito da turbulência da fase contínua pode ser descrita usando duas abordagens,

1. **A abordagem de rastreo estocástico.**- inclui os efeitos das flutuações instantâneas de velocidade do fluido em fase contínua,  $u'$ , sobre a trajetória das partículas da fase discreta. Este acoplamento é realizado através do emprego de métodos estocásticos, sendo que é necessário que os modelos levem em conta a geração e a dissipação da turbulência na fase contínua.
2. **A abordagem de nuvem de partículas.**- rastreia a evolução estatística da posição de uma nuvem de partículas sobre uma trajetória média, isto é, a concentração de gotículas dentro da nuvem é representada por uma Função Densidade de Probabilidade Gaussiana sobre a trajetória média.

Neste trabalho, a abordagem de rastreo estocástico é considerada para o cálculo da dispersão de partículas de combustível líquido submetidas a um campo contínuo em regime turbulento.

A dispersão turbulenta das gotículas de combustível é calculada através da integração da equação da trajetória de cada um delas utilizando o campo de velocidade instantânea do fluido,

$$\vec{u} = \bar{\vec{u}} + \vec{u}', \quad (3-129)$$

ao longo de seu caminho. Desta forma, são incluídos os efeitos aleatórios da turbulência sobre a dispersão da gotícula. A escala de tempo integral da gotícula,  $\mathcal{T}_{\vec{u}_p}$ , definida como,

$$\mathcal{T}_{\vec{u}_p} = \int_0^\infty \frac{\vec{u}'_p(t) \cdot \vec{u}'_p(t+s)}{\bar{u}'_p{}^2} ds, \quad (3-130)$$

é uma medida da auto-correlação da velocidade da gotícula. A escala do tempo integral é proporcional à taxa de dispersão da gotícula, assim, valores elevados de  $\mathcal{T}_{\vec{u}_p}$  correspondem a um movimento turbulento intenso.

Para gotículas pequenas (traçadores) que se movimentam com o fluido, a escala de tempo integral é idêntica à escala de tempo integral lagrangeana do fluido,  $\mathcal{T}_L$ , a qual pode ser aproximada por,

$$\mathcal{T}_L = C_L \frac{\tilde{k}}{\varepsilon}, \quad (3-131)$$

onde  $C_L$  é uma constante do modelo,  $\tilde{k}$  e  $\tilde{\varepsilon}$  são respectivamente, a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. O valor de  $C_L$  não é universal, não obstante, igualando a difusividade das pequenas gotículas (traçadores), com o coeficiente de difusão turbulenta do escalar,  $\nu_t/Sc$ , determinado pelo modelo de turbulência, obtém-se valores para  $C_L$ . Assim, valores de  $C_L$  entre 0,15 e 0,30 foram encontrados para os casos nos quais foram empregados, respectivamente, os modelos  $k - \varepsilon$  e de tensor de Reynolds. Os turbilhões do meio contínuo podem ser caracterizadas por,

- Flutuações de velocidade,  $\vec{u}' = u' \vec{i} + v' \vec{j} + w' \vec{k}$ , aleatoriamente distribuídas em uma PDF gaussiana que, para a componente  $x$ , esta é dada por,

$$u' = \xi \sqrt{\overline{u'^2}}, \quad (3-132)$$

- Uma escala de tempo,  $\tau$ .

onde  $\xi$  é a distribuição de probabilidade normal e  $\sqrt{\overline{u'^2}}$  é o desvio padrão da flutuação da componente  $x$  da velocidade.

Nos casos em que a energia cinética turbulenta é conhecida, as relações,

$$\sqrt{\overline{u'^2}} = \sqrt{\overline{v'^2}} = \sqrt{\overline{w'^2}} = \sqrt{2\tilde{k}/3}, \quad (3-133)$$

são empregadas, o que é o caso dos usados nos modelos  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$  e de seus variantes. Cabe ressaltar que a Equação (3-133) requer a hipótese de turbulência isotrópica.

O tempo de vida característico de um turbilhão,  $\tau_e$ , pode ser definido como,

$$\tau_e = 2\mathcal{T}_L, \quad (3-134)$$

onde  $\mathcal{T}_L$  é dado pela Equação (3-131) para o caso em que  $\mathcal{T}_L$  é calculado mediante o emprego das formulações  $k - \varepsilon$ .

Por outro lado, define-se o tempo de travessia da gotícula como,

$$\tau_{cross} = -\tau_p \ln \left[ 1 - \left( \frac{\mathcal{L}_e}{\tau |u - u_p|} \right) \right], \quad (3-135)$$

onde  $\tau_p = 1/F_D$  é o tempo de arrasto da gotícula,  $\mathcal{L}_e$  é a escala de comprimento integral do turbilhão,

$$\mathcal{L}_e = C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{\tilde{\varepsilon}}, \quad (3-136)$$

Tabela 3.4: Formulações aplicadas segundo o tipo de partícula e processo de transferência de massa e calor.

PARTÍCULA	DESCRIÇÃO	FORMULAÇÕES
Inerte	inerte/aquecimento e resfriamento	1, 6
Gotícula	aquecimento/evaporação/ebulição	1, 2, 3, 6
Combustão	aquec./evol. de voláteis/reações.	1, 4, 5, 6
Multicomponente	gotículas multicomponentes	7

Assume-se que a gotícula interage com o turbilhão do fluido durante o menor dos seguintes tempos, (i) o tempo de vida do turbilhão,  $\tau_e$ , e (ii) o tempo de travessia da gotícula-turbilhonar,  $\tau_{cros}$ .

Quando este período mínimo de tempo é atingido, um novo valor da velocidade instantânea do fluido,  $u$ , é obtido mediante a aplicação da Equação (3-132).

### 3.3.3

#### Relações de Transferência de Calor e Massa

A modelagem dos fenômenos relacionados a escoamentos multifásicos considera que a evolução das partículas influencia aquela da fase contínua. Esta influência é exercida segundo formulações empíricas de transferência de massa e calor. A formulação que será empregada é função do tipo da partícula e, assim, do tipo de processo físico através do qual estas partículas interagem com o meio contínuo.

Assim as formulações existentes que permitem descrever a transferência de massa e de calor são listadas na Tabela 3.4. Apenas as formulações relacionadas ao transporte, evaporação e ebulição de gotículas, isto é, as formulações 1, 2, 4 e 6, serão descritas no decorrer desta seção.

#### Aquecimento e Resfriamento (“Formulações” 1 e 6)

As formulações 1 e 6 que descrevem os processos de transferência de massa e de calor envolvidos no aquecimento e resfriamento da partícula, são aplicadas quando, (i) a temperatura da partícula,  $T_p$ , é menor do que a temperatura de evaporação do líquido,  $T_{vap}$ , e (ii) depois que a fração de voláteis da partícula,  $f_{v,0}$  foi completamente consumida. Estas condições podem ser escritas como,

Formulação 1:

$$T_p < T_{vap}, \quad (3-137)$$

Formulação 6:

$$m_p \leq (1 - f_{v,0}) m_{p,0}, \quad (3-138)$$

onde,  $m_{p,0}$  é a massa inicial da partícula e,  $m_p$  é a massa atual da partícula.

Assim, a formulação 1 é aplicada até que a temperatura da partícula ou gotícula atinja a temperatura de vaporização. Neste ponto, a partícula (ou gotícula) obedece as formulações de transferência de massa e calor (1, 2, 3, 4 e/ou 5), retornando à formulação 6, quando a porção de voláteis da partícula (gotícula) tiver sido completamente consumida.

Nas formulações 1 e 6, a evolução com o tempo da temperatura da partícula pode ser calculada através do balanço térmico, o qual inclui os efeitos de transferência de calor por convecção e a absorção/emissão de radiação na superfície cinza da partícula,

$$m_p c_{p,p} \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4), \quad (3-139)$$

onde  $c_{p,p}$ ,  $A_p$ ,  $\epsilon_p$  correspondem, respectivamente, ao calor específico, área e emissividade da gotícula,  $T_\infty$  é a temperatura local da fase contínua,  $h$ , é o coeficiente convectivo de transferência de calor,  $\sigma$ , a constante de Stefan-Boltzman, e  $\theta_R$  é a temperatura de radiação, definida como  $\theta_R = (G/4\sigma)^{1/4}$ , sendo que  $G$  é a radiação incidente.

Nota-se que, na formulação da Equação (3-139) a resistência interna à transferência de calor foi negligenciada. Consequentemente, a temperatura da gotícula é uniforme.

O coeficiente convectivo de transferência de calor,  $h$ , é avaliado mediante o emprego da correlação de Ranz e Marshal (1984a, 1984b),

$$Nu = \frac{h d_p}{k_\infty} = 2,0 + 0,6 Re_d^{1/2} Pr^{1/3}, \quad (3-140)$$

onde,  $k_\infty$  é a condutividade térmica da fase contínua,  $Re_d$ , é o número de Reynolds baseado no diâmetro da gotícula e na velocidade relativa, e  $Pr$  é o número de Prandtl da fase contínua, definido como  $c_p \mu / k_\infty$ .

Assim, a perda de calor pela gotícula que atravessa cada malha computacional aparece como uma fonte de calor na equação de conservação da energia da fase contínua,  $\overline{S_h}$ , [Equação (3-4)]. Cabe ressaltar que, durante o tempo na qual as formulações 1 e 6 são usadas, as partículas (gotículas) não trocam massa com a fase contínua nem participam em reação química.

### Evaporação de Gotícula (Formulação 2)

A formulação 2 é utilizada para descrever a evaporação de uma gotícula componente da fase discreta. Esta formulação é aplicada quando a temperatura da gotícula,  $T_p$ , situa-se entre a temperatura de vaporização,  $T_{vap}$  e a de ebulição,  $T_{bp}$ , ou até que a fração de voláteis da gotícula seja completamente consumida, isto é,

$$T_{vap} < T_p < T_{bp}, \quad (3-141)$$

$$m_p > (1 - f_{v,0}) m_{p,0}. \quad (3-142)$$

Uma vez que o modelo do fenômeno da evaporação é aplicado, isto é, quando a temperatura da gotícula atinge a valor crítico de vaporização do material que a constitui,  $T_{vap}$ , que deve ser especificado, o processo de evaporação continua mesmo que a temperatura da gotícula retorne para um valor menor que o crítico ( $T_{vap} < T_p$ ). O fenômeno de vaporização é interrompido apenas se a temperatura da gotícula tornar-se menor do que a temperatura de condensação. Neste caso, a gotícula permanece descrita pela formulação 2, porém, nenhuma vaporização ocorre.

Quando a gotícula atinge o ponto de ebulição, a vaporização desta é modelada através da taxa de ebulição, cujo tratamento matemático é descrito na formulação 3.

Durante a aplicação da formulação 2, a taxa de vaporização é governada pelo gradiente de concentração, expresso como a diferença de concentração entre a superfície da gotícula e o meio contínuo,

$$\dot{N}_i = k_c (C_{i,s} - C_{i,\infty}), \quad (3-143)$$

onde  $\dot{N}_i$  é o fluxo molar de vapor expresso em  $\text{kmol/m}^2\text{-s}$ ,  $k_c$  é o coeficiente de transferência de massa expresso em  $\text{m/s}$ , e,  $C_{i,s}$  e  $C_{i,\infty}$  correspondem respectivamente, à concentração de vapor na superfície da gotícula e no meio contínuo, em  $\text{kmol/m}^3$ .

Nota-se, da Equação (3-143), que a vaporização acontece quando  $\dot{N}_i$  é positivo. O caso em que  $\dot{N}_i$  é negativo, isto é, quando a temperatura da gotícula cai abaixo do ponto de orvalho e existem as condições para condensação, as gotículas são consideradas como inertes ( $\dot{N}_i = 0$ ) inibindo desta forma o processo de vaporização/ebulição.

A concentração de vapor na superfície da gotícula é calculada mediante a hipótese de que a pressão parcial de vapor na interface é igual à pressão de vapor saturado da gotícula,  $p_{sat}$ , função da temperatura,  $T_p$ ,

$$C_{i,s} = \frac{p_{sat}(T_p)}{RT_p}, \quad (3-144)$$

onde  $R$  é a constante universal do gases perfeitos. A concentração de vapor no meio contínuo é conhecida por meio da solução das equações de transporte para as  $i$  espécies voláteis,

$$C_{i,\infty} = X_i \frac{p}{RT_\infty}, \quad (3-145)$$

onde  $X_i$  é fração molar de todas as  $i$  espécies químicas voláteis,  $p$  e  $T_\infty$  são, respectivamente, a pressão local absoluta e a temperatura local do fluido contínuo.

O coeficiente de transferência de massa na Equação (3-143),  $k_c$ , é calculado a partir da formulação da correlação do número de Sherwood,  $S_h$ , e de uma analogia entra a transferência de massa e de calor,

$$S_h = \frac{k_c d_p}{D_{i,m}} = 2,0 + 0,6 Re_d^{1/2} Sc^{1/3}, \quad (3-146)$$

onde  $D_{i,m}$  é o coeficiente de difusão do vapor no volume [bulk],  $Sc$  é o número de Schmidt, definido como,  $Sc = \mu/\rho D_{i,m}$ . Cabe ressaltar que, o fluxo de vapor dada pela Equação (3-143),  $\dot{N}_i$ , aparece como termo fonte na equação de transporte das  $i$  espécies químicas voláteis,  $\bar{S}_{Y_i}$ , [Equação (3-6)]. Assim, a massa da gotícula é reduzida como consequência da evaporação das gotículas, o qual é representado pela seguinte relação,

$$m_p(t + \Delta t_p) = m_p(t) - \dot{N}_i A_p \bar{M} \bar{W}_p \Delta t_p, \quad (3-147)$$

onde  $\Delta t_p$  é o passo de tempo de integração do meio disperso e  $\bar{M} \bar{W}_p$  é o peso molecular das gotículas. A temperatura da gotícula é calculada de acordo com o balanço de energia,

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) + \frac{dm_p}{dt} h_{fg,p}. \quad (3-148)$$

que relaciona a troca de calor sensível na gotícula devido a convecção, a transferência de calor latente entre a gotícula e a fase contínua, e devida à absorção/emissão de radiação na superfície da gotícula,

Como se pode perceber, a Equação (3-148) possui termos similares à Equação (3-139), com a inclusão do termo que descreve a transferência de calor latente entre a gotícula e a fase contínua,  $(dm_p/dt)h_{fg,p}$ , onde,  $(dm_p/dt)$  representa a taxa de vaporização da gotícula e  $h_{fg,p}$  é a entalpia (ou calor latente) de vaporização da gotícula. Assim, o calor transferido pela gotícula

para fase gasosa, é uma fonte na equação de transporte da energia da fase contínua [Equação (3-6)].

### Ebulição de Gotícula (Formulação 3)

A formulação 3 é aplicada para descrever ebulição de uma gotícula, fase discreta, quando a temperatura da gotícula,  $T_p$ , ultrapassa a temperatura de ebulição,  $T_{bp}$ , e enquanto a massa da gotícula excede a massa de substâncias não voláteis,  $(1 - f_{v,0})m_{p,0}$ ,

$$T_p \geq T_{bp}, \quad (3-149)$$

$$m_p > (1 - f_{v,0})m_{p,0}. \quad (3-150)$$

Durante a ebulição da gotícula, a temperatura desta gotícula é assumida constante.

Quando a temperatura da gotícula alcança o ponto de ebulição, o seu diâmetro começa a se reduzir por efeito da transferência de massa da gotícula para o meio contínuo, Assim, em ausência de transferência de calor por radiação, a taxa de redução do diâmetro é dada por (Kuo, 1986),

$$\frac{d(d_p)}{dt} = \left[ \frac{4k_\infty}{\rho_p c_{p,\infty} d_p} \right] \left( 1 + 0,23\sqrt{Re_d} \right) \log \left[ 1 + \frac{c_{p,\infty}(T_\infty - T_p)}{h_{fg,p}} \right], \quad (3-151)$$

onde,  $c_{p,\infty}$  é o calor específico a pressão constante da fase contínua,  $\rho_p$  é a densidade da gotícula, e,  $k_\infty$  é a condutividade térmica do gás. Cabe ressaltar que a Equação (3-151) foi derivada assumindo um escoamento permanente a pressão constante. Nota-se, também, que o modelo requer que a temperatura da fase contínua seja maior da temperatura do ponto de ebulição ( $T_\infty > T_{bp}$ ). Isto assegura uma ebulição contínua, onde a temperatura da gotícula permanece igual à temperatura de ebulição ( $T_p = T_{bp}$ ).

Quando o fenômeno de transferência de calor por radiação é considerado, uma pequena modificação da Equação (3-151) é realizada. Partindo da Equação (3-148) e assumindo que a temperatura de gotícula é constante, a taxa de ebulição é igual a,

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{hA_p(T_\infty - T_p) + A_p\epsilon_p\sigma(\theta_R^4 - T_p^4)}{h_{fg,p}}, \quad (3-152)$$

ou,

$$-\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{2}{\rho_p h_{fg,p}} \left[ \frac{k_\infty Nu}{d_p} (T_\infty - T_p) + \epsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \right]. \quad (3-153)$$

Utilizando-se a Equação (3-140) para descrever o número de Nusselt,  $Nu$ , e substituindo o número de Prandtl por uma constante empírica igual a 0,45, tem-se,

$$-\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{2}{\rho_p h_{fg,p}} \left[ \frac{k_\infty (2 + 0,46\sqrt{Re_d})}{d_p} (T_\infty - T_p) + \epsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \right]. \quad (3-154)$$

Na ausência de transferência de calor por radiação, a Equação (3-151) é empregada. A Equação (3-154) é considerada quando a absorção/emissão de radiação na superfície da gotícula é levada em conta.

### 3.3.4 Acoplamento das Gotículas com a Fase Contínua

A influência que exercem as gotículas de combustível sobre a fase contínua é o resultado do somatório das taxas de transferência das propriedades das gotículas (i.e., massa, quantidade de movimento, energia, etc.) que se encontram dentro de um volume de controle elementar. Estas taxas aparecem nas equações de transporte como termos fontes. Para o caso do transporte da massa, o termo fonte da Equação (3-4) é dado por,

$$\bar{S}_1 = \frac{1}{\Delta V} \sum_{k=1}^{N_p} \left( \frac{\Delta m_p}{\Delta t_p} \right)_k, \quad (3-155)$$

onde  $\Delta V$  é volume de controle,  $N_p$  é o número de gotículas que se encontram dentro do volume de controle,  $\Delta m_p = m_{p,0} - m_p$  corresponde à perda de massa da  $k$ -ésima gotícula devido à vaporização/ebulição e  $\Delta t_p$  é o passo de tempo de integração do meio disperso. O termo fonte da equação de conservação de quantidade de movimento, [Equação (3-5)] é,

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ui} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{k=1}^{N_p} \left\{ \left[ \frac{1}{\tau_p} (u_{pi} - u_i) + \frac{g_i}{\rho_p} (\rho_p - \rho) + F_i \right] m_p \right\}_k \\ + \frac{1}{\Delta V} \sum_{k=1}^{N_p} \left( \frac{\Delta m_p}{\Delta t} u_{pi} \right)_k, \quad i = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (3-156)$$

onde  $m_p$  e  $u_{pi}$ ,  $\rho_p$ , são, respectivamente, a massa, a componente  $i$  da velocidade e a densidade da  $k$ -ésima gotícula. Na Equação (3-156), o primeiro somatório corresponde às forças por unidade de massa das gotículas interagem com o meio contínuo devido ao arrasto, gravidade e forças adicionais (movimento browniano, termoforese, etc.), e o segundo somatório corresponde ao fornecimento de

quantidade de movimento causado pela massa de combustível que é evaporada da fase líquida. O termo fonte da equação de conservação da entalpia [Equação (3-7)] é obtido da seguinte equação,

$$\bar{S}_h = \frac{\sum_{k=1}^{N_p} \left[ \frac{\Delta m_p h_{fg,p} + \frac{m_{p,0}}{\overline{MW}_p} \int_{T_{ref}}^{T_{pe}} c_{p,p} dT - \frac{m_p}{\overline{MW}_p} \int_{T_{ref}}^{T_{ps}} c_{p,p} dT - \frac{\Delta m_p}{\overline{MW}_p} \int_{T_{pe}}^T c_p dT \right]}{\Delta V} \Bigg|_k \quad (3-157)$$

onde  $T_{pe}$  e  $T_{ps}$  são as temperaturas das gotículas no instante anterior e posterior ao cálculo da transferência de calor,  $c_{p,p}$  e  $c_p$  são os calores específicos a pressão constante da gotícula e do meio contínuo,  $\overline{MW}_p$  é o peso molecular da gotícula, e,  $h_{fg,p}$  é o calor latente de vaporização da gotícula. Na Equação (3-157) o primeiro termo do somatório corresponde o fornecimento de energia das gotículas para o meio contínuo devido à vaporização, o segundo e terceiro termo correspondem à energia sensível líquida transferida das gotículas para o meio contínuo e o quarto termo à energia sensível do meio contínuo que é cedida para as gotículas. Os termos fontes da fração de mistura e de sua variância são dados pelas seguintes formulações (Sacomano, 2011),

$$\bar{S}_Z = \frac{s}{s + Y_{O_2,2}} \bar{S}_1, \quad (3-158)$$

$$\bar{S}_{Z'^2} = \frac{\widetilde{Z}'^2 (1 - 2\widetilde{Z})}{\widetilde{Z}} \bar{S}_Z, \quad (3-159)$$

onde  $s = (Y_{O_x}/Y_F)_{st}$  é a razão das frações mássicas de oxidante/combustível na estequiometria e  $Y_{O_2,2}$  é a fração mássica de oxigênio no lado de fornecimento do oxidante.