

4

Descrição do Radcal e Estudo dos Modelos de Propriedades Radiantes de Gases Produtos da Combustão e da Fuligem

Para calcular os processos de transferência de energia por radiação em sistemas de combustão é necessário a resolução da equação de transferência radiante (RTE). No contexto da dinâmica dos fluidos computacional, isto é feito mediante aproximações analíticas e/ou discretizações numéricas, também chamados de modelos de radiação. Tal como foi discutido brevemente no capítulo anterior, existem modelos de radiação para a resolução da equação de transferência de energia radiante na sua forma global (g-RTE) ou espectral (s-RTE), que, segundo o nível de simplificação e o custo computacional, apresentam vantagens e dificuldades.

Neste capítulo, optou-se por determinar as propriedades radiantes dos gases de combustão e/ou da fuligem, meio participante, usando o modelo de ordenadas discretas (DOM), pois este apresenta os melhores resultados de transferência de energia radiante, em termos de acurácia e abrangência. O objetivo principal deste capítulo é estudar os modelos que determinam as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem.

Este estudo passa pela solução de um problema simples de transferência de energia por radiação, cujo comportamento das propriedades termoquímicas e as condições de contorno sejam bem identificadas. Assim, é utilizada a configuração de radiação unidimensional que consiste em duas placas planas paralelas e infinitas as quais confinam o meio participante. A escolha deste problema é devido a (i) representa um caso simples de transferência de energia por radiação térmica desacoplado do transporte de quantidade de movimento e de energia por difusão e advecção e (ii) existência de resultados exatos do divergente do fluxo de calor radiante, obtidos por Mossi (2011) empregando o modelo linha por linha (LBL).

Dentre dos modelos de propriedades radiantes existentes na atualidade, consideraram-se neste estudo,

- O modelo de soma ponderada de gases cinzas (WSGGM).- que calcula as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão. Para isto

foram empregados os dados dos coeficientes polinomiais de Smith *et al.* (1982) e de Mossi (2011).

- A formulação de Sazhin (1994).- que determina o coeficiente de absorção global da fuligem através de uma correlação semi-empírica.
- A teoria de absorção/espalhamento Rayleigh.- utilizado para calcular os coeficientes espectrais de absorção e espalhamento.
- O Radcal.- software que calcula, através da abordagem de Modelo de Banda Estreita (NBM), as propriedades radiantes espectrais dos gases produtos da combustão e da fuligem.

Para este estudo do cálculo das propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem na configuração de placas planas paralelas, empregou-se o software comercial FluentTM. Este dispõe, apenas, da implementação (i) do modelo de soma ponderados dos gases cinzas (WSGGM) com dados de Smith *et al.* (1982) e, (ii) da formulação de Sazhin (1994). Assim, foi necessária a implementação do modelo WSGGM utilizando os dados de Mossi (2011) [ver Anexo C] e a implementação das formulações que empregam a teoria de absorção/espalhamento de Rayleigh [ver Anexo D]. No que tange ao software Radcal, este foi acoplado ao FluentTM mediante a criação de uma interface [ver Anexo B]. Esta interfase permite calcular as propriedades radiantes (espectrais e globais) dos gases produtos da combustão e/ou da fuligem, para cada volume de controle, a partir das propriedades termoquímicas do escoamento fornecidos pelo FluentTM em cada iteração.

O acoplamento do Radcal com o FluentTM envolve uma série de dificuldades devido à incapacidade deste último em resolver a equação de transporte radiante espectral (s-RTE) [Equação (3-59)].

Este capítulo é iniciado com a descrição das formulações que o Radcal emprega para o cálculo das propriedades de radiação espectrais e globais e da metodologia empregada para o acoplamento deste software com o FluentTM. Em seguida, é abordado o estudo dos modelos de propriedades radiantes usando o problema unidimensional de placas planas paralelas.

4.1

O Radcal como Ferramenta Complementar na Determinação da Propriedades Radiantes

O Radcal é um programa que emprega a abordagem de banda-estreita [*Narrow Band Model, NBM*] para solução numérica da equação de transferência radiante espectral (s-RTE) [Equação (3-59)], para calcular a intensidade de radiação espectral, I_λ , de gases reagentes e produtos de combustão,

meio participante, em condições isotérmica e homogênea, e sob uma ampla faixa de temperatura e pressão. Este programa, que foi inicialmente desenvolvido em Fortran 77 por Grosshandler (1993), também é capaz de determinar a transmissividade espectral, τ_λ , ao longo de um caminho óptico que atravessa um meio participante não isotérmico e não homogêneo.

O cálculo do coeficiente de absorção espectral, a_λ , da mistura dos principais elementos gasosos que participam em uma combustão, tais como dióxido de carbono, vapor de água, monóxido de carbono e metano, é realizado pelo Radcal através de uma combinação de dados de propriedades espectrais tabeladas, e por meio de aproximações teóricas relacionadas a bandas moleculares vibro-rotacionais. A fuligem também é considerada neste programa como um elemento constitutivo dos produtos da combustão. Entretanto, esta é assumida, no limite de Rayleigh, como um elemento puramente absorvedor de energia térmica, negligenciando, desta forma, o efeito do espalhamento Rayleigh.

A primeira versão do Radcal foi desenvolvida por Grosshandler (1976) para prever os efeitos da radiação térmica causada pela adição de carvão pulverizado em um forno industrial e que operava com etanol. Uma combinação de tabelas e modelos permitiram determinar as propriedades espectrais do dióxido de carbono, vapor de água, monóxido de carbono e a contribuição da fuligem para a intensidade de energia radiante.

Posteriormente, o metano foi adicionado à base de dados do Radcal (Grosshandler e Nguyen, 1985) e a região espectral considerada foi estendida até 200 μm . Atualmente, a transcrição do Radcal em Fortran 90, se encontra acoplada ao *Fire Dynamics Simulator* (FDS) software *Large Eddy Simulation* (LES) desenvolvido pela *National Institute of Standards and Technology* (NIST), cuja função é a simulação de escoamentos reativos de baixa velocidade, enfatizando o transporte de energia e concentrações de fumaça de chamas luminosas quando confinadas em domínios de geometrias simples.

Na atualidade, o Radcal permite determinar as propriedades radiantes de gases reagentes (metano) e produtos da combustão (dióxido de carbono, vapor de água e monóxido de carbono) assim como da fuligem, para temperaturas do meio participante situadas entre 295 e 2.500 K, e para pressões e caminho ópticos inferiores a 10 atm e 50 m, respectivamente. A Tabela 4.1 resume as espécies químicas cujas propriedades radiantes podem ser calculadas pelo Radcal, seja esta mediante modelo de banda molecular, ou através de dados espectrais tabelados.

Tabela 4.1: Bandas Moleculares Incluídas no Radcal (Grosshandler, 1993).

ESPÉCIES	FAIXA	MÉTODO
CO_2	2,0 μm	Modelado
CO_2	2,7 μm	Modelado
CO_2	4,3 μm	Modelado
CO_2	10 μm	Modelado
CO_2	15 μm	Tabelado
H_2O	1,38 μm	Tabelado
H_2O	1,88 μm	Tabelado
H_2O	2,7 μm	Tabelado
H_2O	6,3 μm	Tabelado
H_2O	20 – 200 μm	Tabelado
CO	4,36 μm	Modelado
CH_4	2,4 μm	Modelado
CH_4	3,3 μm	Tabelado
CH_4	7,7 μm	Tabelado
Fuligem	0,4 – 2000 μm	Modelado

4.1.1

Modelagem da Radiação Existente no Radcal

De forma geral, o Radcal resolve, para uma mistura não isotérmica e não homogênea, a equação de transferência radiante espectral (s-RTE) [Equação (3-59)] para um meio participante absorvedor e emissor de fótons (sem espalhamento) através da quebra do caminho óptico, s , em um número finito de elementos homogêneos e isotérmicos (volumes finitos). Mediante o emprego de modelos moleculares e de dados tabelados, estima-se a intensidade de energia radiante espectral e a transmissividade espectral do meio confinado em cada elemento discretizado.

A Figura 4.1 mostra um diagrama da estrutura do programa Radcal. Este código inicia-se com a subrotina MAIN, onde a temperatura e as concentrações ao longo de um domínio espacial unidimensional discretizado em NPT elementos, são lidos do arquivo de dados RC.dat, fornecido pelo usuário.

A sub-rotina MAIN chama a subrotina RADCAL, onde se executa a maioria dos cálculos que envolvem a abordagem de banda-estreita (NBM). Trata-se de prever, em um ponto no espaço representativo de um elemento (volume) de controle, a transmissividade espectral, $\tau_\lambda(s)$ e a intensidade de radiação espectral, $I_\lambda(s)$,

$$\tau_\lambda(s) = e^{-W_\lambda(s)}, \quad (4-1)$$

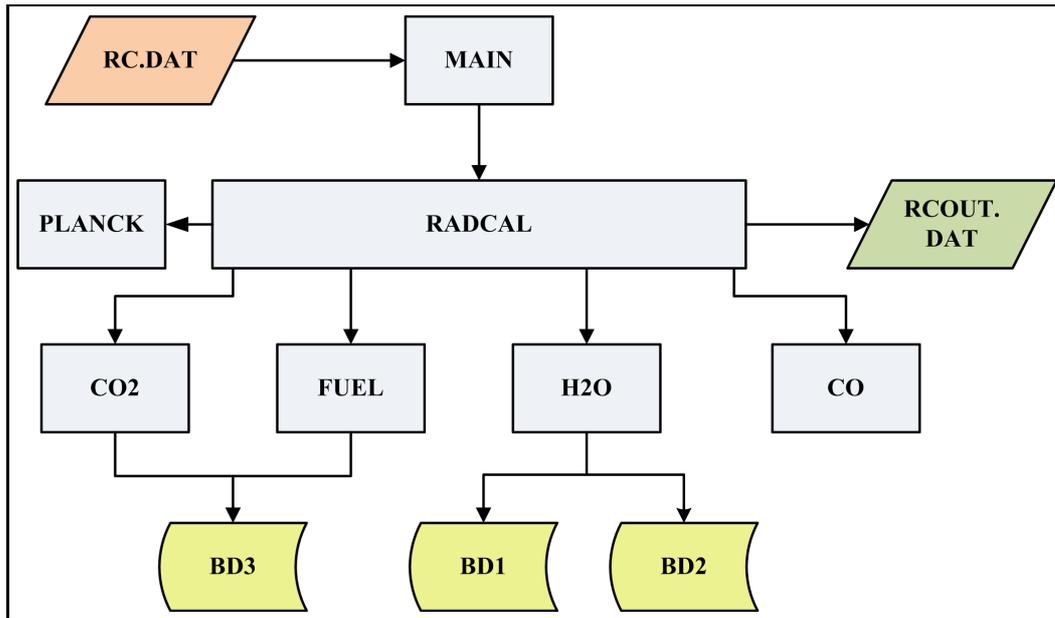


Figura 4.1: Estrutura do Programa Radcal (Grosshandler, 1993).

$$I_{\lambda}(s) = I_{\lambda,P} e^{-\mathcal{W}_{\lambda}(s)} + \int_0^{\mathcal{W}_{\lambda}(s)} I_{b,\lambda}(s') e^{[-\mathcal{W}_{\lambda}(s) + \mathcal{W}_{\lambda}(s')]} d\mathcal{W}_{\lambda}(s'). \quad (4-2)$$

Note-se que a Equação (4-2) é a solução da equação de transferência radiante espectral (s-RTE) em ausência de espalhamento [Equação (3-62)], onde, s' é a variável do caminho óptico, $I_{\lambda,P}$ é a intensidade de radiação espectral da parede isotérmica localizada em $s = 0$, $I_{b,\lambda}$ é a intensidade de radiação espectral do corpo negro. Nas Equações (4-1) e (4-2), $\mathcal{W}_{\lambda}(s)$ é a espessura óptica espectral, definida como,

$$\mathcal{W}_{\lambda}(s) = \int_0^s a_{\lambda}(s') ds', \quad (4-3)$$

onde,

$$a_{\lambda}(s) = a_{\lambda,g}(s) + a_{\lambda,soot}(s). \quad (4-4)$$

Para o cálculo da espessura óptica espectral, a subrotina RADCAL chama a subrotina POD que utiliza:

1. Quatro subrotinas que calculam os parâmetros de banda estreita para o dióxido de carbono (subrotina CO2), vapor de água (subrotina H2O), monóxido de carbono (subrotina CO) e metano (subrotina FUEL)

2. Dois arquivos de dados em bloco, BD1 e DB2, que contém apenas os coeficientes de absorção espectral do vapor de água como sendo função da temperatura, T , e do número de onda, $\nu = \lambda^{-1}$.
3. Um arquivo de dados em bloco DB3, que permite a obter os coeficientes de absorção espectral para (i) dióxido de carbono, na banda de comprimento de onda próximo a $15 \mu\text{m}$, e (ii) metano, em bandas de comprimento próximos a $3,3$ e $7,4 \mu\text{m}$.

A intensidade de radiação do corpo negro, $I_{b,\lambda}$, dada uma temperatura, T , e um comprimento de onda, λ , necessária para a solução da Equação (4-1), é calculada pelo Radcal mediante o uso da função PLANCK. Além disso, o cálculo da espessura óptica da fuligem para regiões espectrais que compreendem comprimentos de ondas entre 1 e $200 \mu\text{m}$ é feito através das subrotinas RADCAL e POD. Desta forma, a subrotina RADCAL emprega a espessura óptica calculada pela subrotina POD para determinar, no ponto de análise, s , a intensidade de radiação espectral, $I_\lambda(s)$, e a transmitância espectral, $\tau_\lambda(s)$. Uma vez conhecido o valor de $I_\lambda(s)$, é possível obter as demais propriedades radiantes do meio participante, inclusive o coeficiente de radiação espectral, a_λ . Assim, a intensidade de radiação incidente espectral média para um volume diferencial, $\hat{I}_\lambda(s)$, integrado em todas as direções, é encontrada mediante a integração da Equação (4-2) sobre o ângulo sólido,

$$\hat{I}_\lambda(s) = \frac{G_\lambda(s)}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} I_\lambda(s) d\Omega', \quad (4-5)$$

onde $G_\lambda(s)$ é a radiação incidente espectral, obtida da Equação (3-66). A intensidade de radiação incidente total, $I_{Radcal}(s)$, é calculada (pelo Radcal) mediante a integração da Equação (4-5) sobre o comprimento de onda,

$$I_{Radcal}(s) = \int_0^\infty \hat{I}_\lambda(s) d\lambda. \quad (4-6)$$

No caso de um meio participante isotérmico e homogêneo, o Radcal determina o coeficiente médio de absorção incidente, $a_I(L_m)$, como

$$a_I(L_m) = \frac{\int_0^\infty a_\lambda(L_m) \hat{I}_\lambda(L_m) d\lambda}{I_{radcal}(L_m)}, \quad (4-7)$$

que é equivalente à Equação (3-64). Note-se que, para o cálculo das propriedades radiantes de um meio participante homogêneo e isotérmico, o caminho óptico, s , foi substituído pelo comprimento médio do feixe, L_m .

Da mesma forma, o coeficiente médio de emissão de Planck determinado pelo Radcal para um meio isotérmico e homogêneo, $a_P(L_m)$, é dado por

$$a_P(L_m) = \frac{\int_0^\infty a_\lambda(L_m) I_{b,\lambda} d\lambda}{I_b}, \quad (4-8)$$

onde $I_{b,\lambda}$ é a intensidade de radiação espectral do corpo negro, cujo valor é dado pela função de Planck e $I_b = \sigma T^4 / \pi$ é a intensidade total de radiação do corpo negro. Cabe ressaltar que o valor de $I_{b,\lambda}$ calculado pela função PLANCK não depende do caminho óptico (ou de comprimento médio do feixe), mas do comprimento de onda, λ , e da temperatura, T . Note-se, também, que as Equações (4-8) e (3-65) são equivalentes.

Das Equações (4-7) e (4-8), é possível notar a dependência com o comprimento médio do feixe, L_m , dos coeficientes absorção média incidente, $a_I(L_m)$, e de emissão média de Planck, $a_P(L_m)$. Esta dependência é herdada daquela de absorção espectral, $a_\lambda(L_m)$, cujo valor depende do comprimento médio do feixe.

A divergência do fluxo de calor radiante para um meio participante homogêneo e isotérmico, que o termo fonte, \bar{S}_r , na equação de conservação da energia [Equação (3-7)], é calculada pelo Radcal mediante a seguinte relação,

$$\bar{S}_r = -\nabla \cdot \vec{q}_r(L_m) = 4\pi [a_I(L_m) I_{Radcal}(L_m) - a_P(L_m) I_b]. \quad (4-9)$$

O Radcal também determina, para um meio isotérmico e homogêneo, um coeficiente chamado de “absorção/emissão médio efetivo”, $a_E(L_m)$, resultado da solução da equação,

$$I_{Radcal}(L_m) = \frac{\sigma}{\pi} [(1 - e^{-a_e(L_m)L_m}) T^4 + e^{-a_e(L_m)L_m} T_P^4]. \quad (4-10)$$

onde T_P é a temperatura da parede. Este coeficiente é frequentemente utilizado para a resolução da equação de transporte radiante cinza [Equações (3-68) e (3-69)] presente na maioria dos softwares de dinâmica dos fluidos computacional (i.e., FluentTM, CFXTM).

Por outro lado, Patch (1967) demonstrou que a solução de uma equação de transporte radiante semi-cinza [Equação (3-63)], que utiliza os coeficientes a_I e a_P , pode ser substituída pela solução de uma equação de transporte radiante cinza [Equações (3-68) e (3-69)], ao negligenciar a influência das paredes e ao utilizar o “coeficiente médio de Patch”, definido como,

$$a_{Patch}(L_m) = \frac{\int_0^\infty a_\lambda(L_m) e^{-a_\lambda(L_m)L_m} I_{b,\lambda}(T) d\lambda}{\int_0^\infty e^{-a_\lambda(L_m)L_m} I_{b,\lambda}(T) d\lambda}. \quad (4-11)$$

Cabe ressaltar que o coeficiente médio de Patch, $a_{Patch}(L_m)$ e o coeficiente de absorção/emissão médio efetivo, $a_E(L_m)$, tendem para o coeficiente de emissão média de Planck, $a_P(L_m)$, a medida que a caminho óptico avaliado sobre o comprimento médio do feixe, $s = L_m$, torna-se pequeno,

$$\lim_{L_m \rightarrow 0} a_{Patch}(L_m) = a_E(L_m) = a_P(L_m) = \frac{\int_0^\infty a_\lambda(L_m) I_{b,\lambda}(T) d\lambda}{\sigma T^4 / \pi}. \quad (4-12)$$

Lallemant *et al.* (1996) demonstraram que a medida que L_m cresce, $a_E(L_m)$ e $\tau = e^{-a_E(L_m)L_m}$ diminuem, o que leva $a_{Patch}(L_m) \leq a_E(L_m)$. Assim, a igualdade prevista pela Equação (4-12) só é verificada para espessura ópticas muito finas.

Para atenuar as discrepâncias dos valores calculados de $a_P(L_m)$, $a_E(L_m)$ e $a_{Patch}(L_m)$ em casos de radiação térmica de um meio participante com espessuras ópticas médias ou grandes, empregou-se, neste trabalho, como substituição a $a_I(L_m)$ e $a_P(L_m)$, um único coeficiente médio geométrico, $a_{Geom}(L_m)$, dado por,

$$a_{Geom}(L_m) = \sqrt{a_P(L_m) \cdot a_{Patch}(L_m)}. \quad (4-13)$$

Esta técnica, que é uma proposta original deste trabalho, inspira-se no que é feito para o cálculo do coeficiente global de absorção da fuligem, que é obtido a partir da integração de Planck e de Rosseland (Modest, 2003).

Note-se que o coeficiente médio geométrico, $a_{Geom}(L_m)$, é o resultado da ponderação geométrica dos coeficientes de emissão média de Planck, $a_P(L_m)$, e média de Patch, $a_{Patch}(L_m)$, pois o emprego destes coeficiente em problemas de radiação com espessuras ópticas médias e grossas levam, respectivamente, a uma superestimação e subestimação do divergente do fluxo de calor radiante, tal como será confirmado mais adiante. O cálculo de ambos os coeficientes, a_{Patch} e a_{Geom} , foi implementado no Radcal a partir de resultados de radiação incidente espectral, $I_\lambda(s)$, e de coeficiente de absorção espectral, $a_\lambda(s)$.

4.1.2

Acoplamento entre o FluentTM e o Radcal

Uma vez que os valores da intensidade de radiação espectral, I_λ , e do coeficiente de absorção espectral, a_λ , ao longo do comprimento de onda, λ , são calculados pelo Radcal, é possível obter os valores do coeficiente médio

de absorção incidente, $a_I(L_m)$, e do coeficiente médio de emissão de Planck, $a_P(L_m)$. Infelizmente estes coeficientes não podem ser inseridos na equação de transporte radiante cinza que o FluentTM resolve [Equações (3-68) e (3-69)], pois, estes coeficientes exibem valores diferentes. Estes coeficientes são iguais apenas quando o meio participante é um gás cinza, assim $a \equiv a_I(L_m) \equiv a_P(L_m) \equiv a_E(L_m)$. Esta é a principal razão pela qual o coeficiente médio efetivo de absorção/emissão, $a_E(L_m)$, é comumente empregado na resolução da equação de transporte radiante cinza (g-RTE) [Equações (3-68) e (3-69)], pois este único coeficiente é que descreve uma condição cinza do meio participante.

Para resolver a equação de transferência radiante (RTE), o FluentTM permite o uso das propriedades radiantes do meio participante através de duas abordagens, (i) o modelo de gás cinza (GGM) e (ii) o modelo de banda larga cinza (GWB), que serão descritas abaixo.

Abordagem de Modelo de Gás Cinza, GGM

A abordagem de Modelo de Gás Cinza (*Gray Gas Model, GGM*) determina um único coeficiente de absorção global dos gases produtos da combustão e da fuligem, $a = a_g + a_{soot}$. Este é utilizado pelo FluentTM para resolver uma única equação de transporte radiante cinza (g-RTE) [Equações (3-68) e (3-69)]. Para isto, é comumente utilizado, como coeficiente de absorção global, a , o coeficiente médio de absorção/emissão efetivo, $a_E(L_m)$, cujo valor é obtido mediante da solução da Equação (4-10).

Note-se, da Equação (4-10), que $I_{Radcal}(L_m)$ é obtido da solução da Equação (4-6) para $s = L_m$, e que o valor de $\hat{I}_\lambda(L_m)$ é previamente calculado pelo Radcal usando, como dados de entrada, os parâmetros termoquímicos do meio participante ($p, T, [X_i], f_V$) obtidos pelo FluentTM para cada volume de controle, e as condições de contorno (T_P, L_m).

Tal como foi indicado nas seções precedentes, o Radcal também é capaz de calcular, para uma espessura óptica igual ao comprimento médio do feixe ($s = L_m$), os coeficientes médios de absorção incidente, $a_I(L_m)$, [Equação (4-7)] e de emissão de Planck, $a_P(L_m)$, [Equação (4-8)]. Porém não é possível usar simultaneamente estes coeficientes na equação de transporte radiante cinza que o FluentTM resolve [Equações (3-68) e (3-69)]. Assim, a escolha de um destes coeficientes como representativo do coeficiente de absorção global, a pode levar a erros no cálculo da radiação. Para o caso particular em que $a \equiv a_P(L_m)$, a solução da Equação (3-68) forneceria resultados de radiação satisfatórios apenas para espessuras ópticas muito finas. Isto ocorre pois o coeficiente médio de emissão de Planck, $a_P(L_m)$, leva em conta apenas a emissão radiante do meio participante, negligenciando a auto-absorção da energia radiante pelo gás

e a absorção da radiação que provém de volumes remotos (Lallemant *et al.*, 1996).

Esta é a principal razão pela qual o coeficiente médio de emissão de Planck, $a_P(L_m)$, não é usualmente empregado na solução da equação de transporte radiante cinza que o FluentTM utiliza [Equações (3-68) e (3-69)]. Para este fim, é frequentemente utilizado o coeficiente médio de absorção/emissão efetivo, $a_E(L_m)$. Contudo, cabe ressaltar que a validade deste parâmetro é restrita apenas ao transporte de radiação em meios “cinzas” e homogêneos, onde a intensidade de radiação espectral média, $\widehat{I}_\lambda(L_m)$, é integrada sobre o espectro de comprimento de onda [Equação (3-63)].

Abordagem de Modelo de Banda Larga Cinza, GWB

Para o caso que é empregado o Modelo de Banda Larga (*Wide Band Model, WBM*) [também chamado Modelo de Banda Cinza (*Gray Band Model, GBM*) ou Modelo de Banda Larga-Cinza (*Gray Wide Model, GWB*)], o FluentTM resolve N_b equações de transporte radiante (RTE), cada uma associada à j -ésima faixa de comprimento de onda, $[\lambda_a^{(j)}, \lambda_b^{(j)}]$,

$$\frac{dI^{(j)}(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -\bar{a}^{(j)} I^{(j)}(\vec{r}, \vec{s}) + \bar{a}^{(j)} n^2 I_b^{(j)}, \quad j = 1, \dots, N_b, \quad (4-14)$$

onde $\bar{a}^{(j)}$ é o coeficiente de absorção da j -ésima faixa de comprimento de onda, $[\lambda_a^{(j)}, \lambda_b^{(j)}]$, e, $I^{(j)}(\vec{r}, \vec{s})$ e $I_b^{(j)}$ são as intensidades de radiação incidente e do corpo negro desta j -ésima faixa. Para a solução da Equação (4-14), o valor de $I_b^{(j)}$ é calculado pelo FluentTM mediante a integração da função de Planck sobre a faixa de comprimento de onda, $[\lambda_a^{(j)}, \lambda_b^{(j)}]$,

$$I_b^{(j)} = \int_{\lambda_a^{(j)}}^{\lambda_b^{(j)}} I_{\lambda,b} d\lambda, \quad j = 1, \dots, N_b. \quad (4-15)$$

Para resolver a Equação (4-14) é necessário dispor do coeficiente de absorção, $\bar{a}^{(j)}$. A integração, sobre uma faixa de comprimento de onda, da equação de transferência radiante espectral (s-RTE) [Equação (3-59)], em ausência de espalhamento, leva a,

$$\frac{dI^{(j)}(\vec{r}, \vec{s})}{ds} = -\bar{a}_I^{(j)} I^{(j)}(\vec{r}, \vec{s}) + \bar{a}_P^{(j)} n^2 I_b^{(j)}, \quad j = 1, \dots, N_b, \quad (4-16)$$

que, em realidade, é uma equação de transferência radiante semi-cinza aplicada à uma j -ésima faixa de comprimento de onda. Os valores dos coeficientes de

absorção incidente, $\bar{a}_I^{(j)}$, e de emissão de Planck, $\bar{a}_P^{(j)}$, para cada j -ésima faixa de comprimento de onda, $[\lambda_a^{(j)}, \lambda_b^{(j)}]$, podem ser calculados pelo Radcal como,

$$\bar{a}_I^{(j)}(L_m) = \frac{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} a_\lambda(L_m) I_\lambda(L_m) d\lambda}{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} I_\lambda(L_m) d\lambda}, \quad (4-17)$$

$$\bar{a}_P^{(j)}(L_m) = \frac{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} a_\lambda(L_m) I_{b,\lambda} d\lambda}{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} I_{b,\lambda} d\lambda}. \quad (4-18)$$

Não obstante, devido à limitação do FluentTM em admitir, na aplicação do Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) o emprego simultâneo dos coeficientes $\bar{a}_I^{(j)}$ e $\bar{a}_P^{(j)}$, [ver Equação (4-16)], necessita-se, para a resolução da Equação (4-14), determinar o coeficiente de absorção, $\bar{a}^{(j)}$, que melhor representa o processo de transferência de calor por radiação entre o meio participante e sua fronteira.

De forma análoga ao caso do modelo de gás cinza (GGM), o valor de $\bar{a}^{(j)}$ da Equação (4-14) também pode ser substituído pelos coeficientes de Patch, $\bar{a}_{Patch}^{(j)}(L_m)$, ou geométrico, $\bar{a}_{Geom}^{(j)}(L_m)$, definidos como,

$$\bar{a}_{Patch}^{(j)}(L_m) = \frac{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} a_\lambda(L_m) e^{-a_\lambda(L_m)L_m} I_{b,\lambda}(T) d\lambda}{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} e^{-a_\lambda(L_m)L_m} I_{b,\lambda}(T) d\lambda}, \quad (4-19)$$

$$\bar{a}_{Geom}^{(j)}(L_m) = \sqrt{\bar{a}_P^{(j)}(L_m) \cdot \bar{a}_{Patch}^{(j)}(L_m)}. \quad (4-20)$$

Cabe ressaltar que, de modo análogo ao caso do Modelo de Gás Cinza, os coeficientes de Patch, $\bar{a}_{Patch}^{(j)}$, ou Geométrico, $\bar{a}_{Geom}^{(j)}$, foram implementados no Radcal a partir dos resultados de $a_\lambda(s)$ e $I_\lambda(s)$ que são obtidos pelo Radcal.

Interação entre o Radcal e o Fluent

O acoplamento do Radcal com o FluentTM permite resolver o transporte de energia radiante no meio participante através de duas abordagens,

- Modelo de Gás Cinza [Radcal – 1 Faixa]- onde um dos coeficientes médios (a_E , a_P , a_I , a_{Patch} e a_{Geom}) calculados pelo Radcal é utilizado no FluentTM como substituto do coeficiente de absorção global, a , para resolver a equação de transporte radiante cinza (g-RTE) [Equações (3-68) e (3-69)].
- Modelo de Banda Larga-Cinza [Radcal – N_b Faixas], onde um conjunto de N_b coeficientes cinzas $\bar{a}_E^{(j)}$, $\bar{a}_P^{(j)}$, $\bar{a}_I^{(j)}$, $\bar{a}_{Patch}^{(j)}$, e $\bar{a}_{Geom}^{(j)}$, calculados pelo Radcal, são substituídos em cada um dos N_b coeficientes $\bar{a}^{(j)}$. No FluentTM,

N_b equações de transporte radiante [Equação (4-14)] são resolvidas. Cabe ressaltar que o espectro de comprimento de onda existente no Radcal para o cálculo das propriedades espectrais da radiação térmica é de [1, 200] μm .

Na abordagem de Modelo de Gás Cinza (GGM), que é desenvolvida neste trabalho, o Radcal determina os coeficientes de absorção global a_I , a_P e a_E , a_{Patch} e a_{Geom} . Entretanto, um único valor do coeficiente de absorção/emissão médio efetivo dos gases produtos da combustão e/ou da fuligem, $a = a_E = \bar{a}_{1-200}$, é utilizado no FluentTM para resolver a equação de transferência radiante cinza (g-RTE) [Equações (3-68) e (3-69)] discretizada mediante o emprego do modelo de Ordenadas Discretas (DOM). Desta maneira, o FluentTM calcula, em todo o domínio computacional, a intensidade de radiação total, I_{Fluent} , e, conseqüentemente, as demais propriedades radiantes necessárias.

No caso em que o coeficiente de absorção espectral dos gases e/ou da fuligem, \bar{a}_λ , é representado pelo abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB), o espectro de comprimento de onda $[\lambda_o, \lambda_f]$ é dividido em N_b faixas, cada uma delas, $[\lambda_a^{(j)}, \lambda_b^{(j)}]$, $j = 1, 2, \dots, N_b$. Um único coeficiente de absorção, $\bar{a}^{(j)}$, constante, é obtido a partir daqueles determinados sobre os do Radcal, $\bar{a}_I^{(j)}$, $\bar{a}_P^{(j)}$ e $\bar{a}_E^{(j)}$, $\bar{a}_{Patch}^{(j)}$ e $\bar{a}_{Geom}^{(j)}$. Cada um dos N_b coeficientes de absorção, $\bar{a}^{(j)}$, é empregado na j -ésima Equação de Transporte Radiante para obter a j -ésima intensidade de radiação equivalente, $I_{Fluent}^{(j)}$. Em seguida, somam-se todas a intensidades de radiação equivalentes para determinar a intensidade de radiação total que atravessa o meio participante, I_{Fluent} ,

$$I_{Fluent} = \sum_{j=1}^{N_b} I_{Fluent}^{(j)}. \quad (4-21)$$

Com o valor de I_{Fluent} , as demais propriedades radiantes são determinadas, em particular o coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$. Cabe ressaltar que, no Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB), os diversos coeficientes de absorção, i.e., $\bar{a}_I^{(j)}$, $\bar{a}_P^{(j)}$, $\bar{a}_E^{(j)}$, $\bar{a}_{Patch}^{(j)}$ e $\bar{a}_{Geom}^{(j)}$, podem levar a diferentes resultados de I_{Fluent} , pois a determinação destes coeficientes envolvem erros de natureza diversa, cuja interação com L_m , T_P , T , $[X_i]$, f_V , é complexa. Assim, o resultado obtido através da abordagem do modelo GWB dependerá tanto da escolha de $\bar{a}^{(j)}$ quanto do problema específico sendo resolvido.

4.2

Estudo das Propriedades Radiantes dos Produtos da Combustão e da Fuligem

Esta seção apresenta o estudo do cálculo das propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem. Dentre os modelos considerados nesta análise, encontram-se aqueles existentes no FluentTM isto é: (i) O modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas com dados de Smith *et al.*, (1982) [WSGGM(Smith)] para o cálculo do coeficiente de absorção global de mistura de gases produtos da combustão (CO_2 e H_2O), a_g , e, (ii) A formulação de Sazhin (1994) [Sazhin] que determina o coeficiente de absorção global da fuligem, a_{soot} . Além disso, foram implementados através da UDF (*User Defined Function*) do FluentTM (i) O modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas com dados de Mossi (2011) [WSGGM(Mossi)] (Ver Anexo C), que calcula o coeficiente de absorção global da mistura de gases produtos da combustão, a_g , (ii) as formulações derivadas da teoria de absorção/espalhamento Rayleigh [modelo Rayleigh] (ver Anexo D) para calcular as propriedades radiantes espectrais da fuligem, $a_{\lambda,soot}$, e, (iii) o acoplamento entre o software Radcal (Grosshandler, 1993) e o FluentTM (Ver Anexo B), destinado a calcular as propriedades radiantes espectrais dos gases produtos da combustão e da fuligem, $a_{\lambda} = a_{\lambda,g} + a_{\lambda,soot}$, em escoamentos não homogêneos e multidimensionais.

O Radcal calcula as propriedades espectrais de radiação (intensidade de radiação espectral, I_{λ} , transmitividade espectral, τ_{λ} , e coeficiente de absorção espectral, a_{λ}) de mistura (homogênea ou não homogênea) de gases produtos da combustão (CO_2 , H_2O e CO) e da fuligem, quando estes se encontram confinados em um sistema unidimensional cuja fronteira (ou parede) possui temperatura constante. A validade do Radcal foi verificada por Grosshandler (1993) em um amplo espectro de parâmetros (295–2500 K, 0,1–1 MPa, 1–200 μm). Não obstante, uma verificação é necessária de forma a garantir o bom funcionamento da interface escrita em UDF (ver Anexo B), de acoplamento entre o Radcal e o FluentTM.

Finalmente, é considerada a influência do espalhamento global da fuligem, σ_s , sobre as propriedades de radiação. Neste trabalho, o valor de σ_s depende apenas da fração volumétrica da fuligem e de um parâmetro associada ao coeficiente de espalhamento, \mathcal{R}_o , que será calculada utilizando a teoria de Rayleigh. Isto é necessário devido à ausência de ferramentas no FluentTM para a implementação, via UDF, do coeficiente de espalhamento espectral da fuligem, $\sigma_{s,\lambda}$.

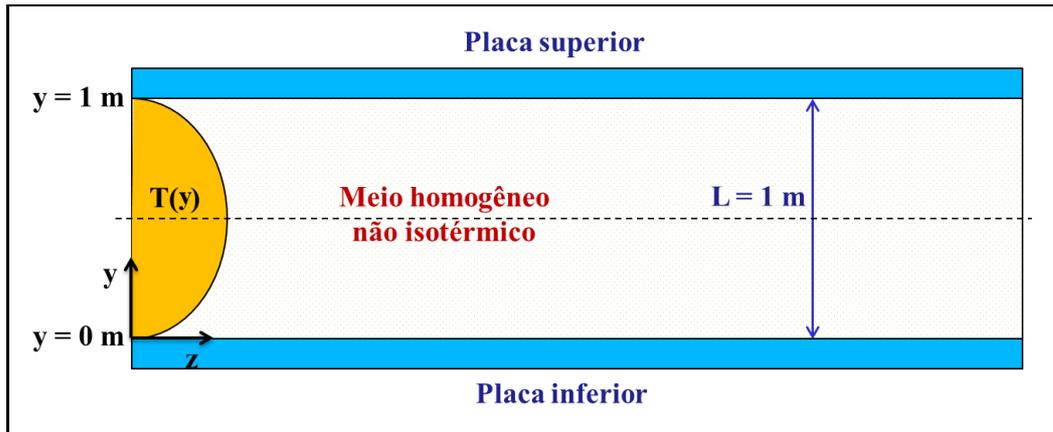


Figura 4.2: Diagrama esquemático do problema unidimensional de placa plana.

4.2.1 Descrição do Problema

A Figura 4.2 mostra o esquema do problema considerado para a verificação dos modelos existentes no FluentTM e daqueles implementados e/ou acoplados através da UDF. Nesta figura, um meio participante homogêneo gasoso e não isotérmico encontra-se confinado por duas placas planas paralelas e infinitas distantes 1 m, cuja temperatura é mantida constante igual a 500 K.

A mistura dos gases que se encontram no interstício das placas é composta de 10% (em massa) de CO_2 , 10% de H_2O e 80% de N_2 , e a temperatura da mistura varia de acordo com,

$$T(y) = 2.000 - 1.500 \left(\frac{2y}{L} - 1 \right)^2, \quad (4-22)$$

ou seja $T = 500$ K para $y = 0$ e $y = 1$ m, e $T = 2.000$ K para $y = 0,5$ m. Para o caso da verificação do acoplamento Radcal/FluentTM do cálculo das propriedades radiantes da fuligem, foi colocada, também, uma porcentagem de partículas de fuligem uniformemente distribuídas nos gases produtos da combustão.

A solução exata da RTE considerando-se o espectro completo das espécies participantes não é conhecida. Assim, para fins de comparação entre os modelos estudados, admite-se que a solução numérica obtida empregando-se o método LBL (Mossi, 2011) aproxima com exatidão suficiente o processo de transporte de energia radiante. Como se dispõe de apenas uma situação física para fins de comparação, não é possível realizar um estudo paramétrico dos modelos como função da pressão ou da temperatura do meio, por exemplo.

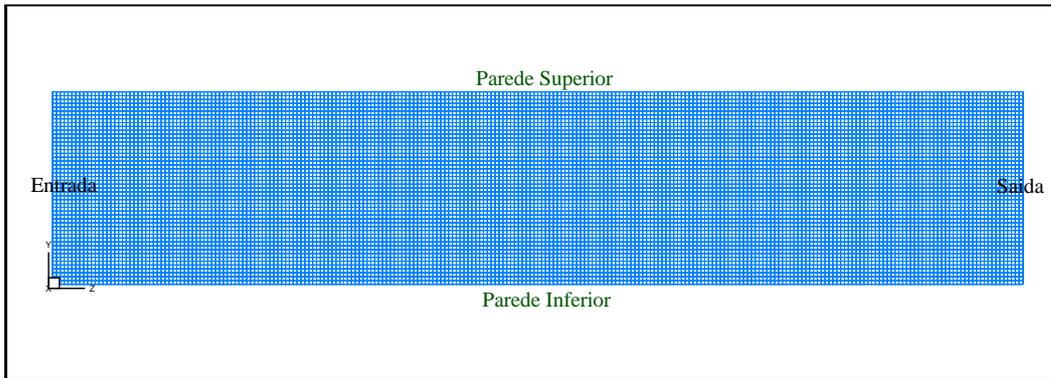


Figura 4.3: Malha e condições de contorno empregados na simulação.

4.2.2

Descrição da Geometria, Malha e Condições de Contorno

Considera-se como domínio um paralelepípedo, delimitado por duas placas planas, com dimensões de 5 m \times 1 m \times 0,02 m de comprimento, largura e espessura, respectivamente. Este domínio foi dividido em 12.500 volumes de controle de forma cúbica, com arestas de 20 mm. A Figura 4.3 mostra a distribuição espacial dos volumes de controle no domínio computacional.

Também é indicada nesta figura a localização das condições de contorno. Na entrada, ingressa no domínio, com uma velocidade uniforme de $U_z = 100$ m/s, uma mistura de gases compostas por 10% (em massa) de dióxido de carbono, 10% de vapor de água e 80% de nitrogênio, a uma temperatura variável segundo a Equação (4-22). Nota-se que esta velocidade elevada dos gases na entrada ao domínio computacional visa assegurar a preponderância dos processos convectivos sobre os processos difusivos, fixando assim a temperatura do fluido. Além disso, as propriedades de transporte das espécies químicas envolvidas na simulação foram modificadas, de maneira que os efeitos de difusão de energia sejam insignificantes diante dos efeitos convectivos e radiativos. Assim para $k \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow 0$ e $c_p \rightarrow \infty$, o número de Nusselt é muito pequeno ($Nu = \alpha/\nu \rightarrow 0$) e a equação de transporte da entalpia tende para uma forma assintótica onde a difusão de energia é negligenciável.

Nas partes superior e inferior do domínio foi adotada a condição de parede, com velocidade de deslizamento $U_{z,p} = 100$ m/s, temperatura de $T_P = 500$ K, e emissividade da parede unitária, $\epsilon_P = 1$. Esta condição de deslizamento visa garantir a ausência de camada limite hidrodinâmica e térmica. Finalmente, a velocidade e emissividade na saída do domínio foram prescritas para $U_{z,s} = 100$ m/s e $\epsilon_s = 0$, respectivamente.

A Figura 4.4 mostra um resultado típico de cálculo. Como se pode perceber na Figura 4.4a o campo de temperatura reduz-se a $T(x, y, z) = T(y)$,

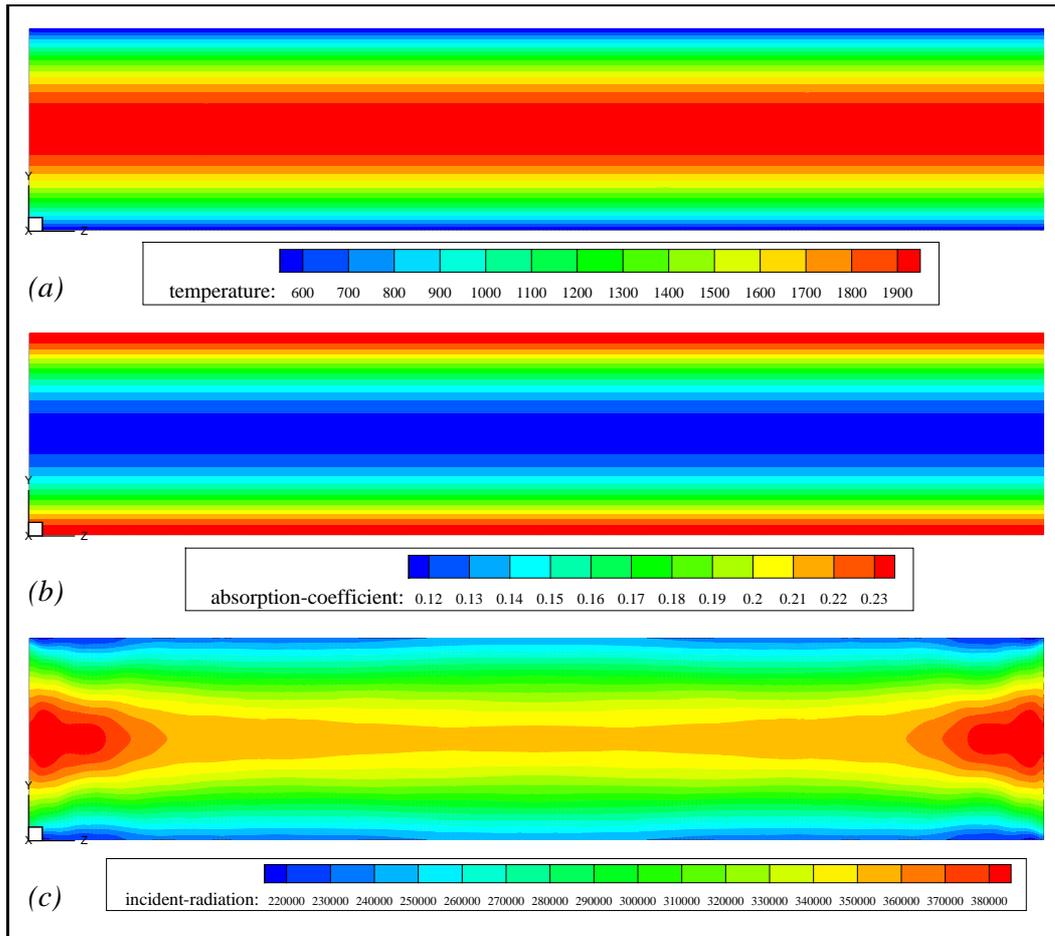


Figura 4.4: Resultado típico de cálculo em CFD da radiação de gases confinados entre placas paralelas e infinitas (a) temperatura do meio, T , (b) coeficiente de absorção global, a , e (c) radiação incidente total, G .

mantido uniforme ao longo do escoamento, tal como desejado, o que indica a ausência de camada limite térmica. Como consequência, o coeficiente de absorção global, $a(x, y, z) = a(y)$ é uniforme ao longo do escoamento, como pode ser visto na Figura 4.4b. Assim, o problema resolvido em 3D é, de fato, unidimensional. Porém, a Figura 4.4c mostra que o campo de radiação incidente, G , não é uniforme na direção do escoamento. Este comportamento é o resultado da diferença dos valores das emissividades adotados na entrada e na saída ($\epsilon_e = \epsilon_s = 0$) e aqueles prescritos nas placas superior e inferior ($\epsilon_P = 1$).

4.2.3 Método Numérico

Utilizou-se para a simulação do escoamento confinado entre as placas, o software FluentTM, onde, as equações de conservação de quantidade de movimento, entalpia e espécies químicas, foram discretizadas espacialmente

utilizando-se o esquema up-wind de segunda ordem, e onde o acoplamento entre a pressão e velocidade foi realizado através do algoritmo SIMPLE. Além disso, foram empregadas o esquema Up-Wind de segunda ordem para discretização espacial da equação de transferência radiante por meio do modelo de ordenadas discretas e das equações de transporte da fração mássica e o número de densidade da fuligem.

Empregou-se como critério de convergência um resíduo menor do que 1×10^{-9} para todas as equações de transporte. Cabe ressaltar que todas as equações discretizadas são resolvidas a cada iteração, inclusive o modelo de ordenadas discretas. Finalmente, todas as simulações foram feitas em paralelo utilizando-se 4 processos em um nó composto de um processador Quad-Core AMD OpteronTM 2350 de 8 núcleos, 2 Ghz de frequência e 32 Gb de memória RAM. Este processador forma parte do servidor “Sunny” instalado no Laboratório de Fenômenos de Transporte do Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio.

4.2.4

Resultados e Discussões

A seguir, apresentam-se os resultados obtidos para seis casos, os quais avaliam o comportamento dos modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem. Estes modelos são verificados na configuração de placas planas paralelas, calculando-se, (i) a radiação incidente, G , (ii) o coeficiente de absorção global, a , e, (iii) o divergente do fluxo de calor radiante $-dq_r/dy$.

Caso I - Influência do Número de Discretizações nos Ângulos Sólidos

A influência que o número de discretizações do ângulo sólido (ou ordenadas discretas) do modelo de ordenadas discretas (DOM) exerce sobre o divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$ é avaliada para o problema de placas planas paralelas e infinitas. Isto visa estimar o menor número de discretizações necessário sobre um octante para a solução do transporte da energia radiante. O modelo de Soma Ponderadas de Gases Cinzas (WSGMM) com dados de Smith *et al.* (1982) foi usado para cálculo do coeficiente de absorção global do meio participante, e utiliza um comprimento médio do feixe, L_m , igual a $1,8L$, o mesmo que é usualmente empregado nas configurações de placas planas paralelas e infinitas.

Assim, três diferentes discretizações do ângulo sólido, $NAS = N_\phi \times N_\theta$, foram feitas sobre um octante, (a) 4×4 , (b) 6×6 e, (c) 8×8 , de forma a escolher aquela que melhor representa o compromisso em termos de acurácia e de custo

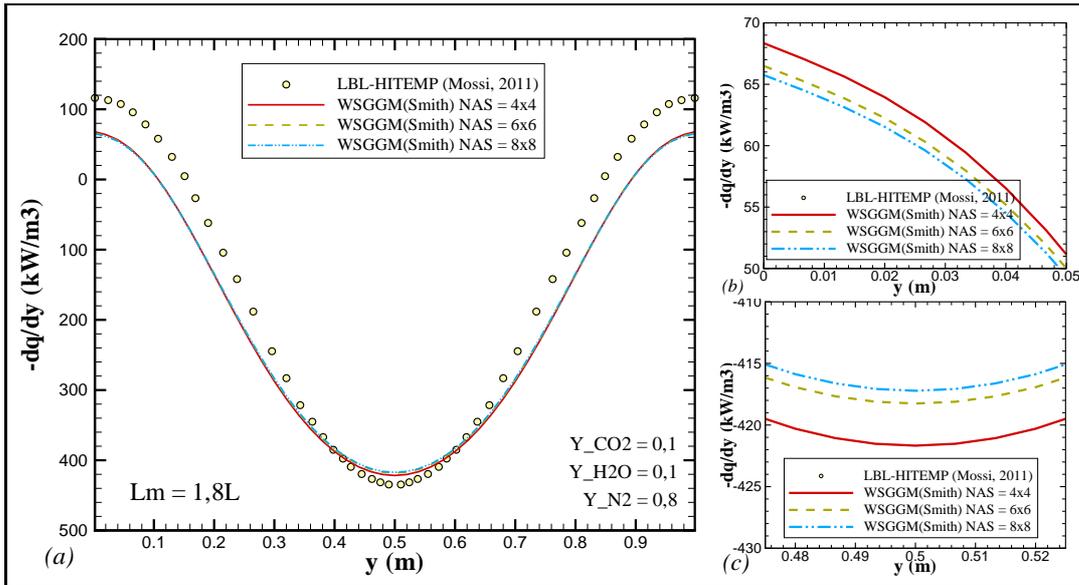


Figura 4.5: Influência do número de discretização de ângulos sólidos, $NAS = N_\phi \times N_\theta$, no divergente do fluxo de calor radiante em placas planas paralelas, dq_r/dy .

Tabela 4.2: Tempo de processamento como função do número ordenadas discretas $NAS = N_\phi \times N_\theta$.

$NAS = N_\phi \times N_\theta$	4×4	6×6	8×8
δt_{iter} (s)	1,3 s	3,7 s	9,1 s
$\delta t_{iter} / \delta t_{iter,min}$	1	2,8	7

computacional. A Tabela 4.2 e a Figura 4.5 detalham, respectivamente, o tempo de processamento por iteração, δt_{iter} , associado às três discretizações e o resultado do divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, correspondente. Note-se que estes resultados são comparados com os de Mossi (2011), que emprega o modelo linha por linha (LBL) utilizando a base de dados do HITEMP.

Pode-se perceber da Figura 4.5a, que as três discretizações do ângulo sólido, $NAS = 4 \times 4$, 6×6 e 8×8 , produzem praticamente o mesmo resultado do divergente do fluxo de calor radiante $-dq_r/dy$. Discrepâncias inferiores a 4% na regiões da parede das placas (ver Figura 4.5b) e de 2% na região central do escoamento (ver Figura 4.5c) são observadas. Além disso, note-se, da Tabela 4.2, que o valor $NAS = 4 \times 4$ é aquele que demanda o menor custo computacional, pois, este é 7 vezes menor daquele associado a $NAS = 8 \times 8$. Desta forma, o aumento progressivo do número de discretizações do ângulo sólido conduz a um incremento considerável de tempo de processamento.

Desta forma, a pequena influência que o aumento do número de discretizações do ângulo sólido exerce sobre os resultado de $-dq_r/dy$, aliado ao incremento considerável do custo computacional com o número de ordenadas discretas, justificam o emprego de $NAS = 4 \times 4$ no modelo de ordenadas discretas (DOM) para a solução numérica da radiação térmica. Esta escolha será mantida em todas as simulações subseqüentes.

Caso II - Cálculo das Propriedades Radiantes dos Gases Produtos da Combustão. Verificação do Acoplamento Fluent-Radcal e Validação dos Modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Mossi)

Para calcular as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão em placas planas, é necessário especificar o comprimento médio do feixe, L_m , conceito originalmente formulado por Hottel e Sarofim (1967) para levar em conta os efeitos de geometria na transferência de energia radiante entre um volume de gás isotérmico, meio participante, e suas vizinhanças. Seu valor depende da pressão, temperatura, e do tipo de configuração geométrica na qual o meio participante se encontra confinado.

Estudos de Olfe (1961) conduziram à expressão $L_m = 8L/9 \equiv 1,778L$, para placa plana quando a emissividade dos gases é calculada somente através da espectrometria de faixas de comprimento de onda compostas de linhas de colisão-ampliado não superpostas. Tien e Wang (1964) e Baclic (1987) estimaram o valor de L_m como sendo igual a $1,784L$ e $1,54L$, respectivamente.

No presente caso de placas planas, onde é considerada uma mistura homogênea de gases, emprega-se $L_m = 1,8L = 1,8$ m, (uma vez que $L = 1$ m), ou seja, um valor levemente superior aos preconizados na literatura. Cabe ressaltar que um estudo preliminar (não apresentado aqui), indica que o valor do comprimento médio do feixe que é considerado pelo FluentTM no modelo WSGGM(Smith) em configurações hexaédricas é $L_m = 1,5L$.

Os resultados de Mossi (2011) do divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, obtidos com o modelo Linha por Linha com dados do HITEMP (LBL-HITEMP), são empregados para fins de comparação com aos resultantes das rotinas na UDF do modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas de Mossi (2011), [WSGGM(Mossi)], e do acoplamento entre o FluentTM e o Radcal. Além disso, utilizou-se como referência o modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas do FluentTM, que utiliza os coeficientes polinomiais de Smith *et al.* (1982) [WSGGM(Smith)]. Tanto o acoplamento Radcal/FluentTM, que será chamado de “modelo Radcal”, quanto os modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Mossi), foram empregados para calcular as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão usando o comprimento

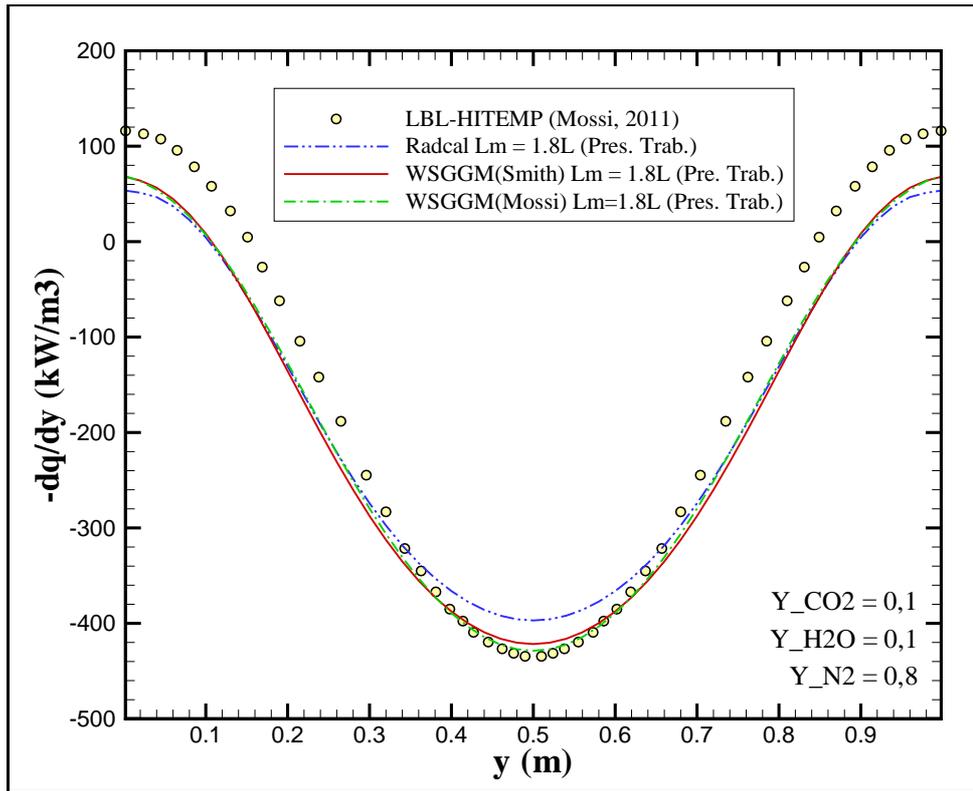


Figura 4.6: Divergente do fluxo de calor radiante em placas plana paralelas. Resultados da simulação de radiação de gases produtos da combustão empregando-se os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi), Radcal e Linha por Linha de Mossi (2011).

médio do feixe de $1,8L$.

A Figura 4.6 apresenta o divergente do fluxo de calor radiante entre placas planas paralelas, $-dq_r/dy$, obtidos usando os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal, para $L_m = 1,8L$, e o modelo Linha por Linha, LBL-HITEMP (Mossi 2011). Esta figura permite verificar que os modelos WSGGM e Radcal apresentam resultados muito semelhantes, a maior discrepância observada em $y = 0,5$ m é de 38 kW/m^3 . Porém, nenhum dos modelos empregados na simulação reproduz corretamente os resultados do modelo LBL-HITEMP. Analisando a região central do escoamento, isto é, $0,25 < y < 0,75$ m, os resultados de $-dq_r/dy$ obtidos pelos modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Mossi) são aqueles que melhor se assemelham aqueles previstos pelo modelo LBL-HITEMP, diferindo de apenas 13 e 6 kW/m^3 , respectivamente.

Nas regiões próximas às paredes, isto é, $y < 0,25$ m e $y > 0,75$ m, nenhum dos três modelos consegue reproduzir com exatidão o divergente do fluxo de calor radiante $-dq_r/dy$. As discrepâncias obtidas são da ordem de 60 kW/m^3 . Presume-se que esta forte discrepância deve-se, principalmente, à incongruência entre o valor de L_m no modelo LBL-HITEMP e aquele

Tabela 4.3: Tempo de processamento obtido com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal.

Modelo	WSGGM(Smith)	WSGGM(Mossi)	Radcal
δt_{iter} (s)	1,30 s	1,30 s	44,25 s
$\delta t_{iter} / \delta t_{iter,min}$	1	1	34

empregado nesta seção.

Cabe ressaltar que, discrepâncias similares às apresentadas na Figura 4.6, também foram reportadas no trabalho de Mossi (2011), quando o modelo WSGMM (usando coeficientes polinomiais de Smith *et al.*, 1982) é comparado com o modelo Linha por Linha, LBL.

A Tabela 4.3 mostra os tempos de processamento por iteração que leva o emprego dos modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal. Observa-se que os primeiros dois modelos demandam um mesmo tempo computacional. Entretanto, o tempo de processamento por iteração do modelo Radcal é 34 vezes maior do que aqueles obtidos para os modelos de Soma Ponderada de Gases Cinzas.

Caso III - Influência na escolha do Comprimento Médio do Feixe, L_m , nas Propriedades Radiantes dos Gases Produtos da Combustão usando os modelos WSGGM e Radcal

Nesta seção, é discutida a influência das propriedades de radiação incidente G , sobre o divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, e sobre o coeficiente de absorção global dos gases produtos da combustão, $a = a_g$, que exercem os modelos WSGGM(Smith) e Radcal, e a escolha do comprimento médio do feixe, L_m , na mesma configuração da seção precedente. Cabe ressaltar que o modelo WSGGM(Mossi) com $L_m = 1,8L$ foi também considerado nesta seção, apenas para fins de comparação com os modelos WSGGM(Smith) e Radcal.

A Figura 4.7 mostra o divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, obtido com os modelos WSGGM(Smith) e Radcal para diferentes comprimentos médios do feixe, L_m . No caso em que o modelo Radcal é levado em conta, percebe-se da Figura 4.7a, que o comprimento médio do feixe de $1,5L$ leva a um melhor acordo com os resultados obtidos com o modelo LBL-HITEMP (Mossi, 2011), do que quando L_m é igual a $1,8L$.

Um comportamento contrário é evidenciado na Figura 4.7b no caso em que o modelo WSGGM(Smith) é empregado. Assim, o valor do comprimento médio do feixe de $1,8L$ fornece resultados de $-dq_r/dy$ que mais se aproximam

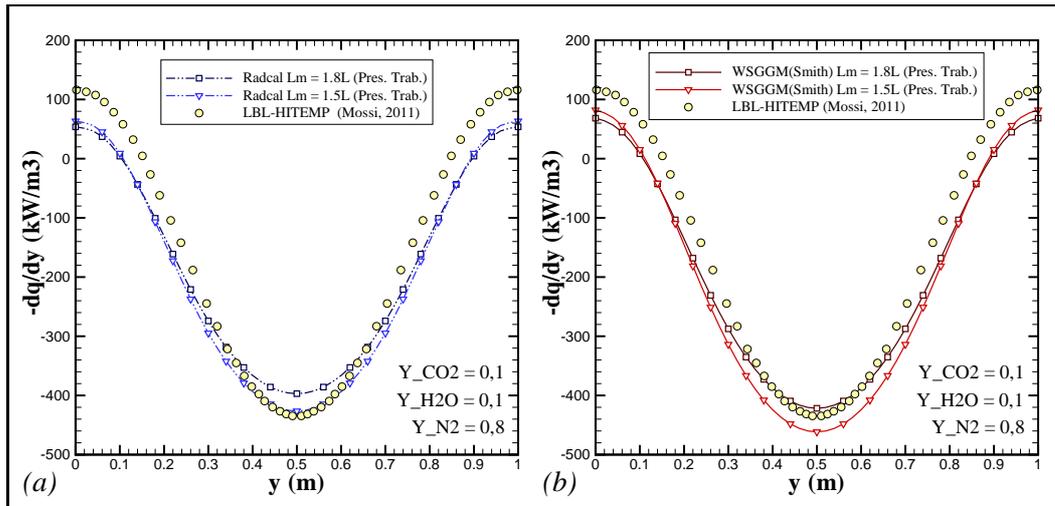


Figura 4.7: Divergente do fluxo de calor radiante obtidos com os modelos (a) Radcal e (b) WSGGM(Smith), para comprimentos médio do feixe de $1,5L$ e $1,8L$. O modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$ é também apresentado para fins de referência.

àqueles do modelo LBL-HITEMP (Mossi, 2011), do que quando o comprimento médio do feixe de $1,5L$ é prescrito.

Apresenta-se na Figura 4.8 a radiação incidente, G , obtida com os modelos Radcal e WSGGM(Smith) para L_m igual a $1,0L$, $1,5L$ e $1,8L$, como função da posição vertical. Observa-se que, para ambos modelos, a radiação incidente é maior nas regiões da mistura com temperaturas elevadas e é menor nas zonas contíguas às placas. Esta figura também mostra que, para ambos modelos, a radiação incidente aumenta à medida que o comprimento médio do feixe é reduzido. Para o caso particular do modelo Radcal (ver Figura 4.8a), note-se um incremento de G entre 7 e 22% quando o comprimento médio do feixe é diminuído de $1,8L$ para $1,5L$ e $1,0L$, respectivamente. Para o modelo WSGGM(Smith), um comportamento similar é obtido (ver Figura 4.8b), isto é, um aumento médio de G de aproximadamente 8 e 25% quando L_m é reduzida de $1,8L$ para $1,5L$ e $1,0L$.

Cabe ressaltar que o modelo Radcal para $L_m = 1,5L$, reproduz valores de radiação incidente que são similares àqueles obtidos pelo modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$. Por outra parte, os modelos WSGGM(Mossi) e WSGGM(Smith), para $L_m = 1,8L$, são praticamente equivalentes.

O perfis de coeficiente de absorção global dos gases, $a \equiv a_g$, ($a_{soot} = 0$), obtidos pelos modelos WSGGM(Smith) e Radcal para $L_m = 1,0L$, $1,5L$ e $1,8L$ são mostrados nos gráficos da Figura 4.9. Da mesma forma que para o caso da radiação incidente, foi obtido um aumento do coeficiente de absorção

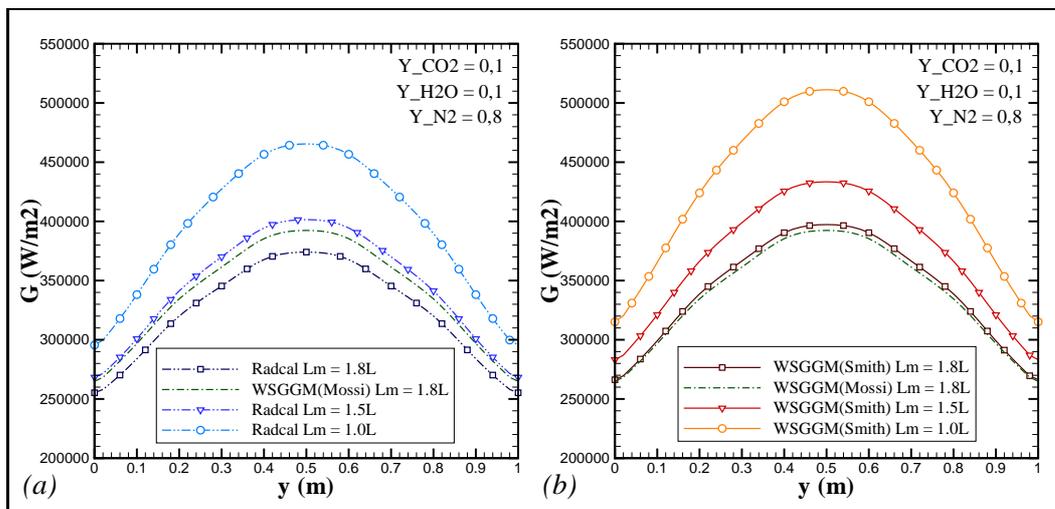


Figura 4.8: Radiação incidente obtidos com os modelos (a) Radcal e (b) WSGGM(Smith), para comprimentos médio do feixe iguais a $1,0L$, $1,5L$ e $1,8L$. O modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$ é também apresentado para fins de referência.

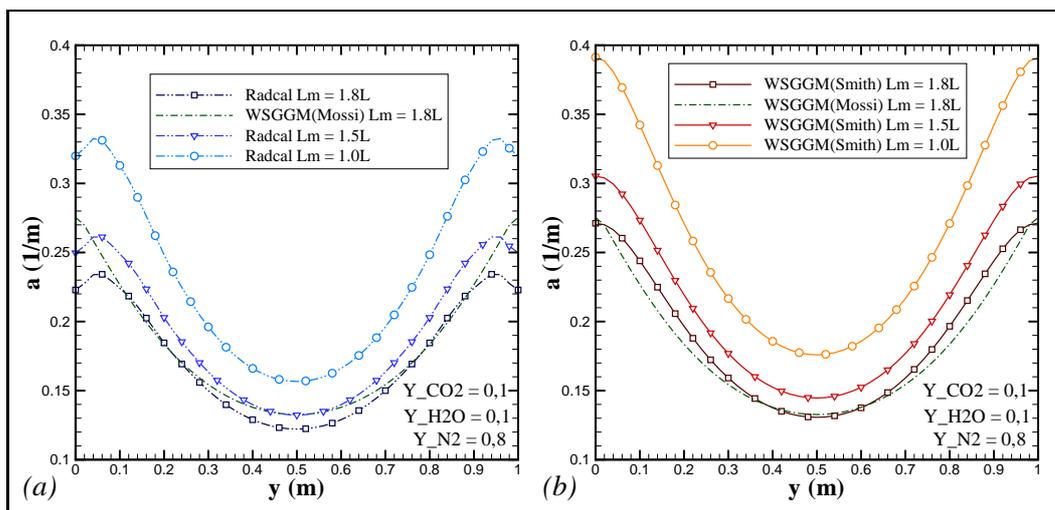


Figura 4.9: Coeficiente de absorção global obtidos com os modelos (a) Radcal e (b) WSGGM, para comprimentos médio do feixe iguais a $1,0L$, $1,5L$ e $1,8L$. O modelo WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$ é também apresentado para fins de referência.

global dos gases à medida que o comprimento médio do feixe é diminuído. No caso particular em que o modelo Radcal é empregado (ver Figura 4.9a), este incremento de a é aproximadamente 10 e 34% quando o comprimento médio do feixe passa de $1,8L$ para $1,5L$ e $1,0L$, respectivamente. Para o caso no qual o modelo WSGGM(Smith) é usado (ver Figura 4.9b), evidencia-se incrementos de 12 e 38% quando o comprimento médio do feixe vai de $1,8L$ para os respectivos $1,5L$ e $1,0L$.

Além disso, note-se que, para $L_m = 1,8L$, os resultados de a previstos pelo modelo Radcal apresentam para $y \leq 0,3$ e $y \geq 0,7$ m, boa semelhança com aqueles obtidos pelo modelo WSGGM(Mossi). Por outra parte, para $0,3 \leq y \leq 0,7$ m, o modelo Radcal, para $L_m = 1,5L$, é aquele que melhor assemelha aos resultados de WSGGM(Mossi) para $L_m = 1,8L$.

Finalmente, é importante ressaltar o comportamento monotônico decrescente com a temperatura do coeficiente de absorção global, $a = a_g$, apresentados pelos modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Mossi). Para estes modelos valores máximos de a são observados nas placas. Por outro lado, o modelo Radcal determina valores máximos do coeficiente de absorção, $a = a_E$ que se encontram afastados $0,05$ m da posição das placas. Este comportamento não monotônico do coeficiente de absorção fornecido pelo Radcal pode ser melhor elucidado a partir do rearranjo da Equação (4-10), $\bar{a}_E = (1/L_m) \ln[(I_{Radcal}\pi/\sigma - T^4)/(T_P^4 - T^4)]$. Assim, para temperaturas dos gases, T , que se encontram próximas à temperatura da parede T_P , o valor de I_{Radcal} é o suficientemente pequeno de forma que $\bar{a}_E = (1/L_m) \ln[(I_{Radcal}\pi/\sigma - T^4)/(T_P^4 - T^4)] \approx (1/L_m) \ln[-T^4/(T_P^4 - T^4)]$ e, desta forma, o coeficiente de absorção efetivo médio, a_E , aumenta com a temperatura dos gases. Porém, a medida que a temperatura dos gases se torna maior do que a parede, o valor de I_{radcal} cresce de maneira exponencial com o gradiente da temperatura, o que leva a uma subsequente redução de \bar{a}_E . Note-se que esta expressão é a usada pelo Radcal para calcular o coeficiente de absorção global \bar{a}_E , não sendo usada pelos demais modelos.

Caso IV - Influência da Separação na Faixa de Comprimento de Onda e do Tipo de Coeficiente de Absorção

Nesta seção, é analisada, através do emprego do acoplamento FluentTM/Radcal segundo a abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB), a influência sobre o resultado do divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, que exercem (i) a divisão do espectro de comprimento de onda em duas faixas contíguas (ii) a escolha do tipo de coeficiente de absorção. Para isto, foram simulados, para o mesmo problema do Caso II, cinco casos,

Tabela 4.4: Descrição dos casos simulados para o estudo da influência da separação das faixas de comprimento de onda e do tipo de coeficiente de absorção.

CASO	FAIXAS λ (μm)	PARÂMETROS
Radcal-1 faixa a_E	[1 – 200]	a_E
Radcal-2 faixas \bar{a}_E	[1 – 12, 5] e [12, 5 – 200]	$\bar{a}_E^{(1)}$ e $\bar{a}_E^{(2)}$
Radcal-2 faixas \bar{a}_P	[1 – 12, 5] e [12, 5 – 200]	$\bar{a}_P^{(1)}$ e $\bar{a}_P^{(2)}$
Radcal-2 faixas \bar{a}_{Patch}	[1 – 12, 5] e [12, 5 – 200]	$\bar{a}_{Patch}^{(1)}$ e $\bar{a}_{Patch}^{(2)}$
Radcal-2 faixas \bar{a}_{Geom}	[1 – 12, 5] e [12, 5 – 200]	$\bar{a}_{Geom}^{(1)}$ e $\bar{a}_{Geom}^{(2)}$

mostrados na Tabela 4.4, isto é,

- Um caso de referência no qual o Modelo de Gás Cinza (GGM) [*Radcal – 1 Faixa (Cinza)*] é aplicada. Neste caso, o Radcal calcula, em todo o espectro de comprimento de onda, um único coeficiente de absorção global, o coeficiente de absorção médio efetivo, $a = a_E$, empregado na equação de transferência radiante cinza (g-RTE) resolvida no FluentTM [Equações (3-68) ou (3-69)].
- Quatro casos de aplicação do Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB), [*Radcal – 2 Faixas*], nos quais o espectro de comprimento de onda é dividido em duas faixas contíguas [1 – 12, 5] e [12, 5 – 200] μm . O Radcal determina para cada um dos quatro casos um par de coeficientes médio, (i) de absorção efetivo, $(\bar{a}_E^{(1)}, \bar{a}_E^{(2)})$, (ii) de emissão de Planck $(\bar{a}_P^{(1)}, \bar{a}_P^{(2)})$, (iii) de Patch $(\bar{a}_{Patch}^{(1)}, \bar{a}_{Patch}^{(2)})$, e, (iv) Geométrico, $(\bar{a}_{Geom}^{(1)}, \bar{a}_{Geom}^{(2)})$, que são necessários para resolver no FluentTM, um par ($N_b = 2$) de Equações de Transferência Radiante [Equação (4-14)].

A Figura 4.10 mostra, para os cinco casos analisados, o resultado do divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, tendo como referência o resultado de Mossi (2011) do modelo linha por linha (LBL-HITEMP). Os resultados obtidos pela abordagem do Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) considerando-se os coeficientes geométrico, $\bar{a}_{Geom}^{(j)}$, e efetivo, $\bar{a}_E^{(j)}$, são aqueles que melhor se aproximam dos resultados de Mossi (2011). Esta figura também mostra que a adoção dos coeficientes de emissão de Planck, $\bar{a}_P^{(j)}$, e de Patch, $\bar{a}_{Patch}^{(j)}$, não permite prever corretamente o divergente do fluxo de calor radiante. Enquanto o primeiro superestima os valores de $-dq_r/dy$ em mais do dobro dos valores obtidos com o modelo LBL-HITEMP (Mossi, 2011), o segundo subestima 2/3 os resultados numéricos fornecidos por Mossi (2011).

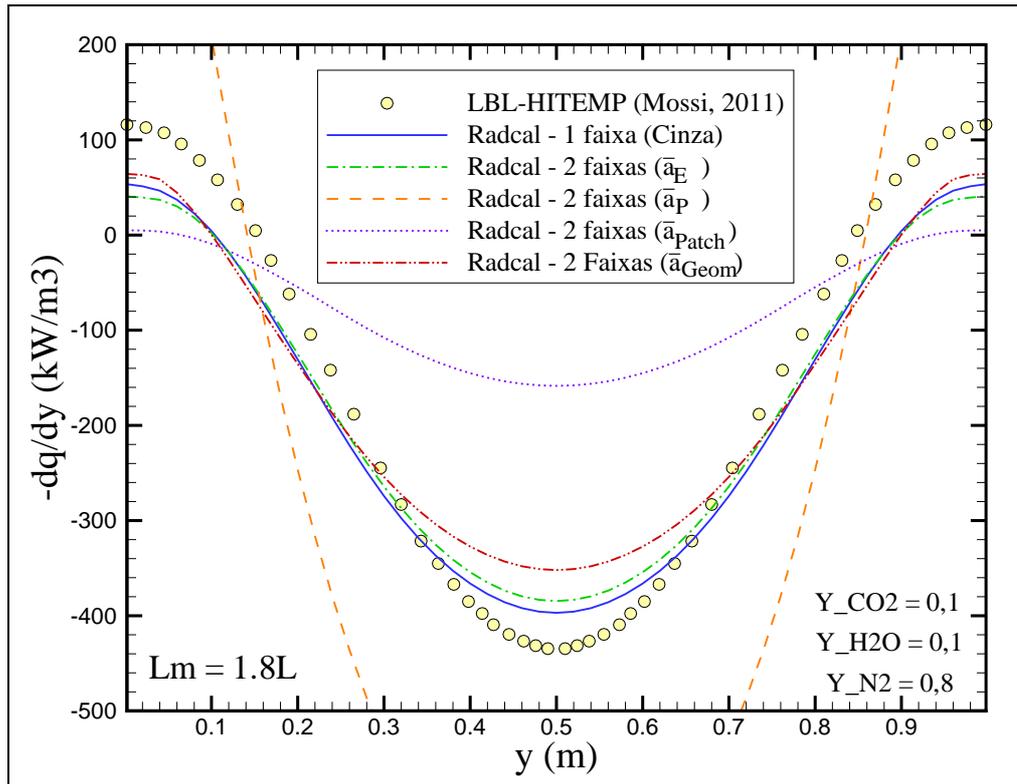


Figura 4.10: Divergente do fluxo de calor radiante de gases produtos da combustão em placa plana paralela empregando-se o modelo Radcal.

A grande discrepância apresentada pelo uso do coeficiente de emissão de Planck, $\bar{a}_p^{(j)}$, no modelo GWB, foi também reportada por Demarco *et al.* (2011). Neste estudo, foi empregado o modelo GWB, para $N_b = 6$ bandas, em casos de radiação de um meio participante composto por gases produtos da combustão e fuligem em condições (i) homogêneas e isotérmicas e (ii) não homogênea e não isotérmicas. Foram obtidas discrepâncias de até 80%, com respeito aos resultados do Modelo de Banda Estreita Estatística Correlacionada do Comprimento de Onda (*Statistical Narrow Band Model k-Correlated, SNBCK*).

Isto evidencia a existência de uma forte dependência dos resultados de radiação calculada com a escolha do tipo de coeficiente de absorção do Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB). Para detalhar a origem das discrepâncias encontradas na solução de $-dq_r/dy$, estudou-se um caso, ainda mais simples, de radiação unidimensional em uma mistura homogênea e isotérmica de gases ($Y_{CO_2} = 0,10$, $Y_{H_2O} = 0,10$ e $X_{N_2} = 0,80$, @ $T = 1.000$ K), confinados entre paredes espaçadas 1,8 m, cuja temperatura uniforme é de 500 K.

Assim, as Figuras 4.11 e 4.12 apresentam a intensidade de radiação espectral, I_λ , e o coeficiente de absorção espectral, a_λ , calculados pelo Radcal através das abordagens Modelo de Gás Cinza (GGM) e Modelo de Banda

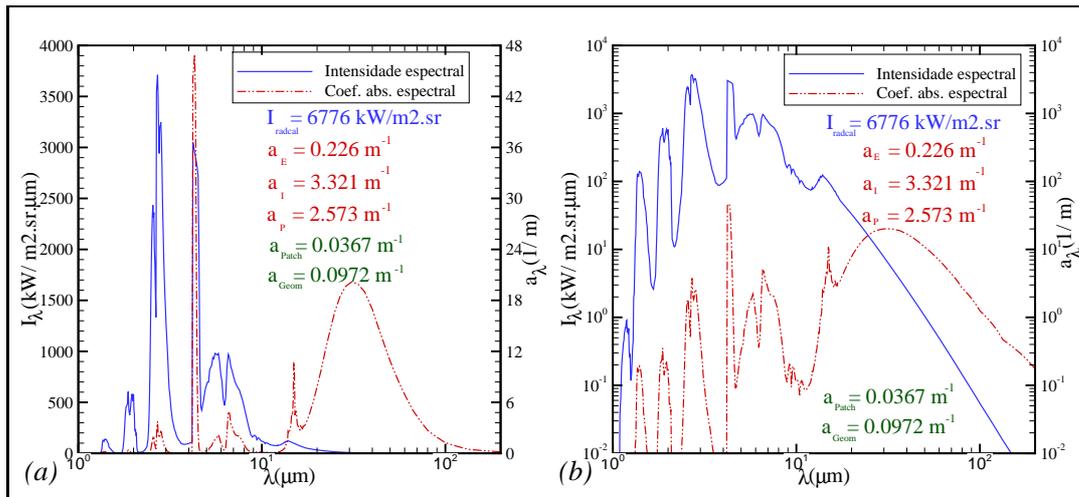


Figura 4.11: Intensidade de radiação espectral e coeficiente de absorção espectral obtidos do Radcal para uma mistura de gases homogênea e isotérmica empregando-se a abordagem de Modelo Gás Cinza. Coordenadas (a) Natural e (b) Logaritmica.

Larga-Cinza (GWB). Note-se, de ambas figuras, que um mesmo comportamento de I_λ e a_λ é evidenciado ao aplicar as duas abordagens, isto é, os pontos de maior emissão de energia radiante, nesta condição particular, acontecem, principalmente, nos comprimentos de onda 1,90; 2,63; 2,94; 4,30; 5,5 e 6,3 μm (ver Figura 4.11a). Nestes seis comprimentos de onda, o CO_2 é principal responsável pela emissão de energia radiante nas faixas adjacentes dos quatro primeiros comprimentos de onda, enquanto que o H_2O é o principal emissor de energia radiante nas duas últimas faixas de comprimento de onda.

Além disso, é evidenciada nas Figuras 4.12 e 4.13 que, embora a intensidade de radiação espectral, I_λ , esteja ligada de maneira direta ao coeficiente de absorção espectral, a_λ , a sua influência é forte apenas nas regiões vizinhas a $n\lambda T = 2898 \mu\text{m K}$ (Lei de deslocamento de Wien). Para o presente caso, isto é, $T = 1000 \text{ K}$, e $n = 1$, o coeficiente de absorção espectral influi fortemente na intensidade espectral do meio apenas nas regiões de comprimento de onda próximas a 2,9 μm .

A Tabela 4.5 mostra os resultados, obtidos com o Radcal, dos diferentes coeficientes de absorção equivalentes neste problema de radiação unidimensional, quando são aplicadas as abordagens de Modelo de Gás Cinza (GGM) e Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB). Note-se que, para o caso do Modelo Gás Cinza, observa-se que os diversos tipos de coeficientes de absorção calculados pelo Radcal são fortemente divergentes. Assim, é de esperar, dos resultados de radiação de Placa Plana, que o coeficiente médio de absorção/emissão efetivo, a_E , seja o único capaz de calcular com boa exatidão as propriedades

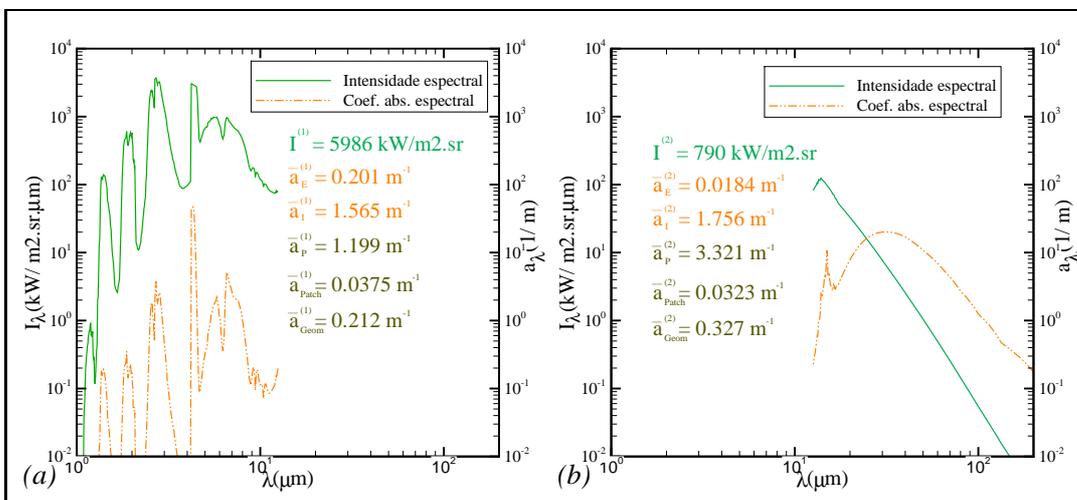


Figura 4.12: Intensidade de radiação espectral e coeficiente de absorção espectral obtidos do Radcal para uma mistura de gases homogênea e isotérmica mediante a abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) para $N_b = 2$ faixas de comprimento de onda (a) [1 – 12, 5] μm , (b) [12, 5 – 200] μm.

Tabela 4.5: Resultado da simulação em Radcal aplicando-se as abordagens de Modelo de Gás Cinza (GGM) e Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) para uma problema de radiação unidimensional de uma mistura homogênea e isotérmica.

Propriedade	Modelo Gás Cinza	Modelo Banda Larga-Cinza	
Índice		$j = 1$	$j = 2$
Faixa de λ [μm]	[1 – 200]	[1 – 12, 5]	[12, 5 – 200]
$I_{Radcal}, I^{(j)}$ [kW/m ² .sr]	6.776	5.986	790
$a_E, \bar{a}_E^{(j)}$ [m ⁻¹]	0,226	0,201	0,0184
$a_I, \bar{a}_I^{(j)}$ [m ⁻¹]	3,321	1,565	1,756
$a_P, \bar{a}_P^{(j)}$ [m ⁻¹]	2,573	1,199	3,321
$a_{Patch}, \bar{a}_{Patch}^{(j)}$ [m ⁻¹]	0,0367	0,0375	0,0323
$a_{Geom}, \bar{a}_{Geom}^{(j)}$ [m ⁻¹]	0,0972	0,212	0,327

radiantes do meio homogêneo e isotérmico estudado.

No caso em que a abordagem do Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) é empregada, a Tabela 4.5 mostra que o meio participante estudado emite a maior quantidade de energia radiante na faixa de comprimento de onda delimitado entre 1 e 12,5 μm . A intensidade de radiação emitida pelo meio nesta faixa corresponde 88% do total emitido em todo o espectro de comprimento de onda. Assim, pode se afirmar que os coeficientes de absorção calculados nesta faixa de comprimento de onda ($[1 - 12,5] \mu\text{m}$ ou $j = 1$), são aqueles que mais influem no cálculo das propriedades radiantes globais. Estes resultados ilustram como a escolha do coeficiente de absorção em uma faixa de comprimento de onda é determinante para a previsão das propriedades radiantes do meio. Uma vez que o comprimento médio do feixe empregado em ambos problemas é o mesmo ($L_m = 1,8 \text{ m}$), é de se esperar, dos resultados de $-dq_r/dy$ mostrados na Figura 4.11, e pela similitude dos dados de coeficiente de absorção, que a adoção dos coeficientes de absorção/emissão efetivo ($\bar{a}_E^{(1)}, \bar{a}_E^{(2)}$) e Geométrico ($\bar{a}_{Geom}^{(1)}, \bar{a}_{Geom}^{(2)}$) no modelo GWB, leva às melhores estimativas das propriedades radiantes globais. Cabe resaltar que esta afirmação é válida apenas para as condições aqui estudadas, e não pode ser generalizada para todos os problemas de radiação.

Caso V - Influência dos Modelos que Calculam as Propriedades Radiantes dos Gases Produtos da Combustão e da Fuligem

Nesta seção são verificadas as implementações desenvolvidas para calcular as propriedades radiantes da fuligem usando o modelo de Sazhin (1994), a teoria de absorção/espalhamento de Rayleigh e o acoplamento FluentTM/Radcal. Para isto, considerou-se o mesmo problema de placas planas paralelas dos casos I, II, III e IV. Porém, partículas de fuligem foram acrescentadas à uma nova mistura de gases que, agora, é composta (em massa) por 10% de dióxido de carbono, 10% vapor de água, 1% de fuligem e 79% de nitrogênio. Estes valores são representativos daqueles encontrados nas chamas estudadas nos capítulos seguinte.

As propriedades radiantes desta mistura são determinadas para calcular o coeficiente de radiação global de radiação, $a = a_g + a_{soot}$, através dos modelos (i) WSGGM(Smith)&Sazhin, (ii) WSGGM(Smith)&Rayleigh (ver Anexo D) e, (iii) Radcal. Note-se que é utilizado nesta seção, o modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas (WSGGM) de Smith *et al.* (1982) para o cálculo do coeficiente de absorção global dos gases produtos da combustão, a_g . Isto é necessário pois os modelos Sazhin (1994) e Rayleigh servem, apenas, para determinar, respectivamente, os coeficientes de absorção global, a_{soot} , e

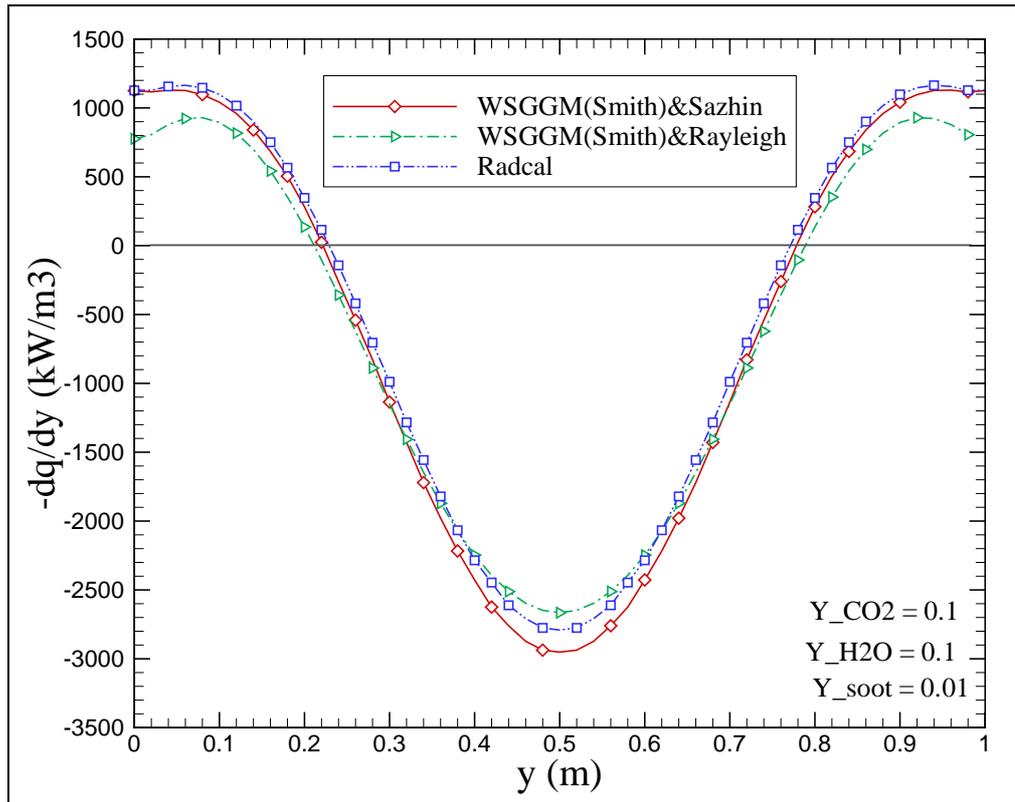


Figura 4.13: Divergente do fluxo de calor radiante da mistura de gases produto da combustão e fuligem obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal.

espectral, $a_{soot,\lambda}$, da fuligem.

Também é importante lembrar que o modelo Radcal determina o valor de $a_\lambda = a_{\lambda,g} + a_{\lambda,soot}$ e que, para o cálculo do coeficiente de absorção espectral da fuligem, emprega-se a teoria de absorção/espalhamento Rayleigh, isto é, $a_{soot,\lambda} = C_\lambda f_V / \lambda$, onde o valor de C_λ foi aquele adotado por Grosshandler (1993), isto é, $C_\lambda = 7$.

São mostrados na Figura 4.13, os perfis do divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, obtido pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Percebe-se uma boa concordância nos resultados de $-dq_r/dy$ fornecidos pelos modelos Radcal e WSGGM(Smith)&Sazhin ao longo de todo o domínio de análise, onde as discrepâncias na região central não superam 6%.

Porém, observa-se, na região vizinha da parede, que o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh leva a valores do divergente do fluxo de calor radiante que subestimam, em até 30%, os resultados obtidos pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal. Na região central do escoamento, a divergência destes é menor, pois, o valor de $-dq_r/dy$ que é previsto pelo

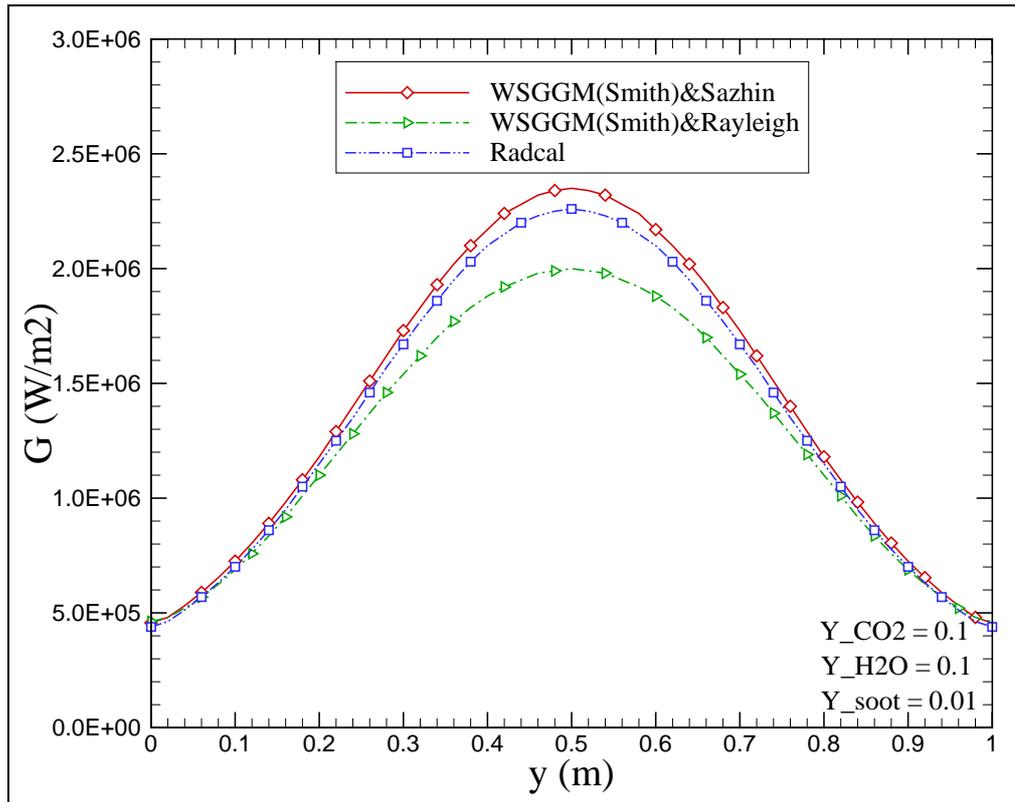


Figura 4.14: Radiação Incidente da mistura de gases produto da combustão e fuligem obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal.

modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh difere em 9% daquele previsto pelo modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Estes resultados indicam o sucesso da implementação do modelo Rayleigh e do acoplamento Radcal/FluentTM.

A Figura 4.14 mostra a radiação incidente, G , calculada pelos modelos considerados nesta seção. Novamente, percebe-se uma boa similaridade nos resultados de G previstos pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, Radcal, em todo o espaço entre as placas. A discrepância calculada não supera 4%. No entanto, a radiação incidente que é predita com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh é 15% menor do que a obtida com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Acredita-se que esta discrepância do modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh seja devida à metodologia de discretização empregada para calcular os valores de $\bar{a}_{soot,j}$ [ver Anexo D]. Este ponto de divergência não será investigado.

Note-se, da Figura 4.15, que todos os modelos aqui considerados determinam quase o mesmo valor de G na região vizinha às placas, o que tem como consequência que o divergente do fluxo de calor radiante seja linearmente proporcional, ao coeficiente de absorção, isto é, $-dq_r/dy = [-G + 4\pi n^2 \sigma T^4] a \propto \mathcal{K}a$,

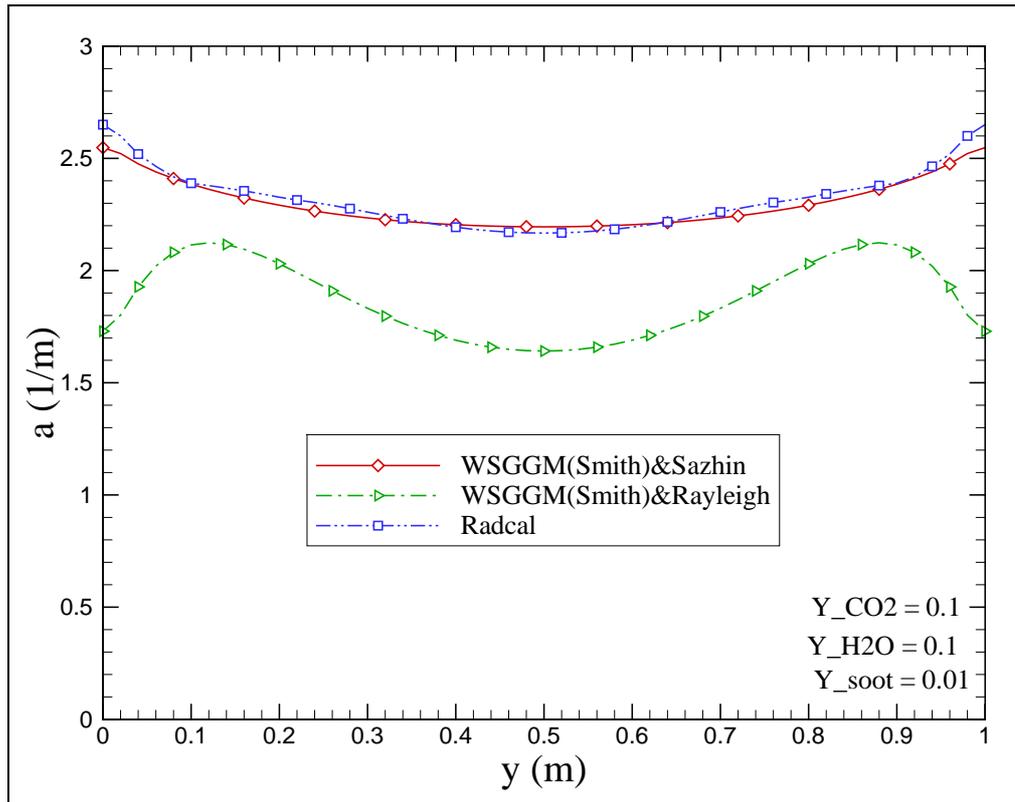


Figura 4.15: Coeficiente de absorção global da mistura de gases produto da combustão e fuligem obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal.

É apresentado na Figura 4.15 o coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$, obtido com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Desta figura, observa-se que os modelos Radcal e WSGGM(Smith)&Sazhin apresentam, mais uma vez, o mesmo coeficiente de absorção global ao longo do domínio, enquanto que o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh prediz valores de a até 33% menores do que o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin.

Cabe ressaltar que, embora o modelo Radcal use, também, a teoria de Rayleigh para o cálculo do coeficiente de absorção, a , este procedimento é feito utilizando apenas um valor constante de C_λ (igual a 7). Por outro lado, o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh leva em conta uma expressão para C_λ que depende do índice complexo de refração, $m = n + iq$, que por sua vez, dependem do comprimento de onda (Chang e Charalampopoulos, 1990). Assim, os valores de C_λ calculados com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, variam com o comprimento de onda, de maneira não monotônica, entre 4, 3 e 0, 3.

Os tempos de processamento da simulação do problema de radiação de placas planas paralelas e infinitas aplicando-se os mod-

Tabela 4.6: Tempo de processamento associado aos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal.

Modelo	WSGGM(Smith) &Sazhin	WSGGM(Smith) &Rayleigh	Radcal
δt_{iter} (s)	1,4 s	10,4 s	44,7 s
$\delta t_{iter} / \delta t_{iter,min}$	1	7,4	31,9

elos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal são apresentados na Tabela 4.6. Percebe-se que a aplicação do modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh representa um custo de processamento por iteração equivalente a 7,4 vezes maior do que o do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Para o caso do modelo Radcal, o custo computacional é 31,9 vezes maior do que aquele do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin.

Caso VI - Influência do Espalhamento da Fuligem

Nas seções anteriores foram consideradas, apenas a emissão e absorção da mistura de gases composta por produtos de combustão e por fuligem nestes dispersa. No entanto, o espalhamento radiante da fuligem poderia desempenhar um papel preponderante na transferência de calor por radiação, principalmente na combustão turbulenta de hidrocarbonetos pesados em equipamentos de combustão de porte industrial (fornos e caldeiras), pois, neste tipo de processo, formam-se quantidades apreciáveis de fuligem.

Nesta seção é estudada a influência que exerce o espalhamento da fuligem sobre o processo de transferência de calor por radiação. Para isto, considerou-se o mesmo problema descrito para o Caso II, entretanto, será empregado apenas o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, com e sem a inclusão do espalhamento da fuligem para os seguintes casos,

- Quantidades apreciáveis da fuligem, $Y_{soot} = 0,01$ – o que equivale a frações volumétricas, f_V , que variam entre de 0,838 e 3,00 ppm.
- Quantidades moderadas da fuligem $Y_{soot} = 0,001$ – onde as frações volumétricas, f_V , que se encontram entre 0,0838 e 0,30 ppm.

Cabe enfatizar que estes valores mínimo e máximo da fração volumétrica da fuligem correspondem ao resultado obtido considerando-se uma mistura de gases perfeitos, e um valor típico da densidade da fuligem, ρ_{soot} , de 2.000 kg/m³.

A Figura 4.16 apresenta a influência do espalhamento sobre o divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, aplicando-se o modelo

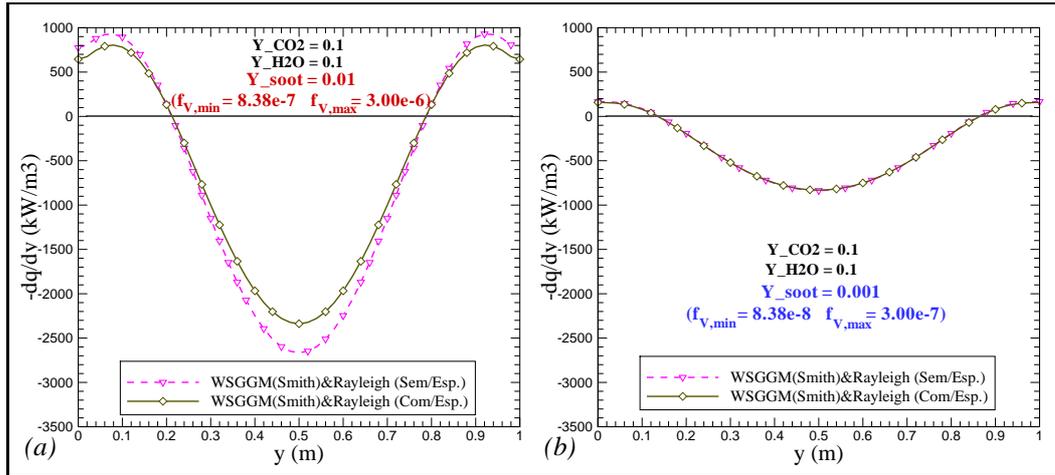


Figura 4.16: Divergente do fluxo de calor radiante da mistura de gases produtos da combustão e fuligem, obtido do modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, para os casos em que o espalhamento é e não é levado em conta. (a) $Y_{soot} = 0,01$ e (b) $Y_{soot} = 0,001$.

WSGGM(Smith)&Rayleigh para os casos em que existe (a) quantidade apreciável de fuligem, $Y_{soot} = 0,01$, (Figura 4.16a) e (b) quantidade moderada de fuligem, $Y_{soot} = 0,001$ (Figura 4.16b). Nota-se da Figura 4.16a, obtida para o caso em que existe quantidade apreciável de fuligem, que a consideração do espalhamento nas simulações leva a uma redução de até 18% no divergente do fluxo de calor radiante, $-dq_r/dy$, nas regiões próximas às paredes, ou seja, para $0 \text{ m} \leq y \leq 0,22 \text{ m}$ e $0,78 \text{ m} \leq y \leq 1 \text{ m}$. De forma similar, percebe-se, também, uma redução de $-dq_r/dy$ na região central inferior a 13% do módulo do fluxo de calor radiante.

Não obstante, observa-se, quando estão presentes quantidades moderadas de fuligem (ver Figura 4.16b), o divergente do fluxo de calor radiante permanece inalterado quando o espalhamento é levado em conta. Isto indica que considerar o espalhamento para quantidades moderadas da fuligem conduz a um redução de $|-dq_r/dy|$ inferior a 1 e 5% nas regiões central e próximas à parede, respectivamente.

Desta forma é verificado que o fenômeno de espalhamento contribui apenas ligeiramente para a atenuação do divergente do fluxo de calor por radiação. Uma vez que este é o termo fonte na equação de energia, $S_r = -dq_r/dy$, a inclusão do espalhamento isotrópico da fuligem levaria a uma diminuição no transporte de energia radiante, cuja intensidade depende, principalmente, da concentração da fuligem que se encontra dispersa no meio gasoso.

A Figura 4.17 apresenta a influência do espalhamento sobre a radiação incidente, G , para os casos de presença de quantidades elevadas (Figura 4.17a) e moderadas (Figura 4.17b) de fuligem. Para o primeiro caso, nota-se que a

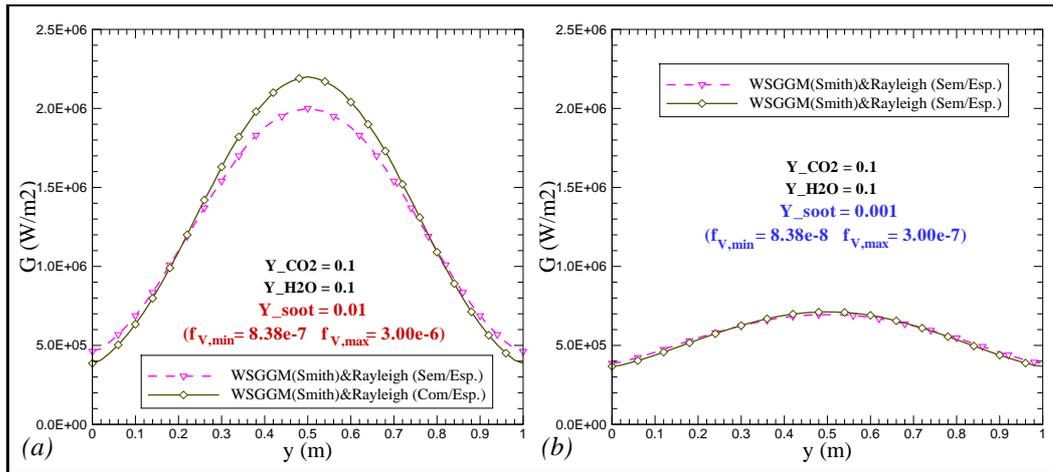


Figura 4.17: Radiação incidente da mistura de gases da mistura de gases produtos da combustão e fuligem, obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, para os casos em que o espalhamento é e não é levado em conta. (a) $Y_{soot} = 0,01$ e (b) $Y_{soot} = 0,001$.

radiação incidente, G , exibe que os pontos de inflexão (em $y = 0,22$ e $0,78$ m) determinam a localização onde ocorre a preponderância da radiação incidente quando o espalhamento da fuligem é, ou não, considerado. Assim, para $0,22 \text{ m} \leq y \leq 0,78 \text{ m}$, o resultado obtido pelo modelo que considera o espalhamento, é maior, em até 11%, do que o resultante do uso do modelo que não leva em conta o espalhamento. Situação contrária acontece para $0 \text{ m} \leq y \leq 0,22 \text{ m}$ e $0,78 \text{ m} \leq y \leq 1 \text{ m}$, onde a radiação incidente obtida do modelo que não contempla o espalhamento é maior, em até 20%, do que quando espalhamento é levado em consideração.

Para o caso de quantidades moderadas de fuligem, a Figura 4.17b evidencia um comportamento similar ao reportado para o caso de elevadas concentrações, porém, os pontos de inflexão são localizados em $y = 0,27$ e $0,73$ m. Contudo, os respectivos incrementos e decrementos de G na região central e vizinha às paredes não superam 2,5 e 5%, respectivamente, quando o espalhamento de quantidades moderadas da fuligem é levada em conta.

Na Figura 4.18 apresenta-se a comparação dos coeficientes global de absorção, $a = a_g + a_{soot}$, obtidos com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh quando o espalhamento é ou não considerado, e para os casos em que existem a presença de quantidades apreciáveis (Figura 4.18a) e moderadas (Figura 4.18b) da fuligem. Note-se que, neste problema de temperatura prescrita, considerar ou não o espalhamento não altera o valor de a obtido no domínio. Em problemas nas quais a equação de energia é acoplada ao transporte das demais propriedades do fluido, o coeficiente de absorção poderia ser modificado por intermédio das alterações de G associados à consideração ou não do

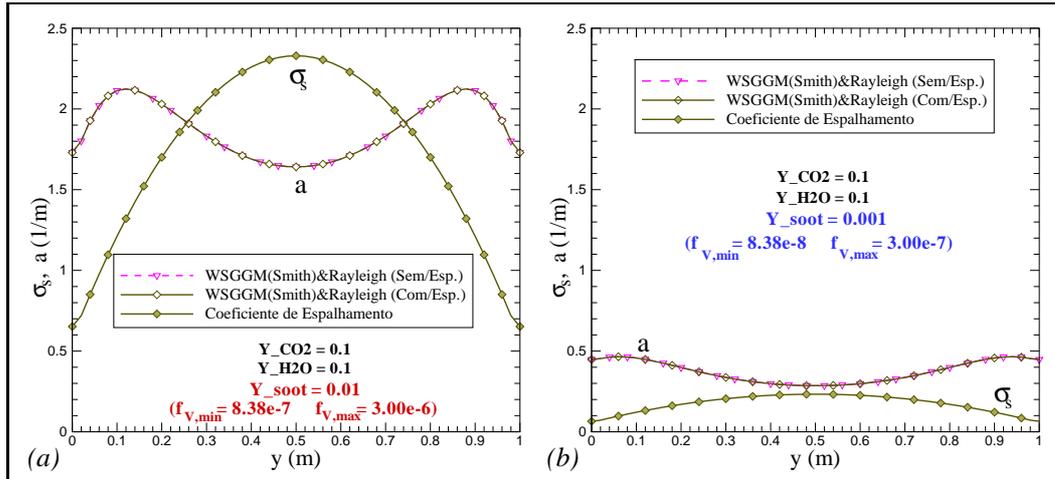


Figura 4.18: Coeficientes global de absorção e de espalhamento da mistura de gases produtos da combustão e fuligem, obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, para os casos em que o espalhamento é e não é levado em conta. (a) $Y_{soot} = 0,01$ e (b) $Y_{soot} = 0,001$.

espalhamento.

Além disso, é mostrada, nesta figura, a distribuição do coeficiente global de espalhamento, σ_s , quando o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh com espalhamento é empregado para ambos os casos. Assim, percebe-se que o valor de σ_s apresenta um comportamento similar e proporcional àquele prescrito para a temperatura da mistura dos gases e fuligem [ver Equação (4-22)]. Isto acontece pois, para um valor de Y_{soot} constante, o valor de σ_s é função linear da fração volumétrica da fuligem, f_V , que é uma função linear da temperatura dos gases, T , pela equação de estado de gás perfeito.

4.3 Considerações Finais

Neste capítulo, foram descritas as formulações que utiliza o Radcal para o cálculo das propriedades radiantes espectrais dos gases produtos da combustão e da fuligem como meio participante. Também foi apresentado o acoplamento realizado do Radcal com o FluentTM mediante o emprego de duas abordagens, isto é, o de Modelo de Gás Cinza (GGM) e o Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB).

Resultados de radiação em placa plana paralela mostraram, para o caso do abordagem de Modelo de Gás Cinza (GGM), que o emprego do coeficiente de absorção/emissão médio efetivo, a_E , como substituto do coeficiente de absorção global, a , é aquele que melhor representa as propriedades radiantes do meio participante. Um resultado similar foi obtido quando a abordagem de

Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB) foi empregado. Contudo, é de ressaltar, nesta análise, a grande influência que exerce a escolha dos coeficientes médios de absorção incidente, a_I , e de emissão de Planck, a_P , sobre os resultados de radiação. Esta situação era esperada, pois estes coeficientes, embora globais, apenas são aplicados em uma equação de transporte radiante semi-cinza (sg-RTE) [Equações (3-63) e (4-16)], sendo inviável o seu emprego na equação de transporte radiante cinza (g-RTE) [Equações (3-68), (3-69) e (4-14)]. Apenas nas situações de transferência de radiação térmica nas quais a emissão da energia radiante é consideravelmente superior à auto-absorção de energia radiante (i.e., para espessuras ópticas finas) os coeficientes médios de emissão de Planck, a_P , e de Patch, a_{Patch} , representam a adequadamente.

Além disso, foi também estudada a influência que exerce a escolha do comprimento médio do feixe, L_m , sobre os resultados de radiação térmica. Assim, é imprescindível, em simulações de transporte da radiação térmica, que uma análise seja feita da influência da escolha do comprimento do feixe. Espera-se que seu valor seja fortemente dependente da configuração geométrica do domínio analisado, assim como das propriedades termoquímicas do meio participante. Tal como foi colocado no capítulo anterior, a escolha óbvia de um comprimento médio do feixe em geometrias complexas pode não existir.

Outro aspecto dos resultados apresentados é a escolha dos modelos de propriedades radiante para os gases produtos da combustão. Foi observado que, o modelo Radcal fornece resultados de radiação que são similares com aqueles de Mossi (2011) para comprimento de feixe $L_m = 1,5L$, enquanto que o modelo WSGGM(Smith) apresenta uma melhor concordância com os resultados de Mossi (2011) em $L_m = 1,8L$. Ambos valores de comprimento médio do feixe situam-se na faixa típica dos estudos de placas planas paralelas [i.e. $L_m = 1,54$ (Baclic, 1987) e $L_m = 1,778$ (Olfe, 1961)].

No que diz respeito aos modelos que determinam as propriedades radiantes da fuligem, foi verificada a grande concordância de dq_r/dy , a e G existente entre os modelos de Sazhin (1994) e Radcal, enquanto que os resultados obtidos pelo modelo Rayleigh subestimam levemente ditas propriedades. Acredita-se que a origem destas ligeiras discrepâncias seja devida à metodologia de discretização empregada para calcular os valores de $\bar{a}_{soot,j}$ pois não foram considerados os efeitos da emissividade espectral. Outra causa possível seria o valor da constante, C_λ . Por um lado, o modelo Radcal, que também emprega a teoria de absorção/espalhamento Rayleigh, considera que C_λ igual a 7,0, o valor de C_λ empregado no modelo Rayleigh é uma função do índice complexo de refração que, por sua vez, depende, segundo as formulações de Chang e Charalampopoulos (1990), do comprimento do onda. Assim, o valor

de C_λ no modelo Rayleigh é uma função de λ , cujo valor máximo observado é de 4,22 [ver Figura D.2 do Anexo D].

Finalmente, a inclusão do espalhamento da fuligem para o cálculo do transporte radiante levou a mudanças perceptíveis no que diz respeito ao divergente do fluxo de calor radiante, dq_r/dy , e radiação incidente, G , apenas para os casos em que, concentrações apreciáveis de fuligem são considerados na simulação. No caso em que concentrações moderadas de fuligem são levadas em conta, a inclusão do espalhamento da fuligem conduz a uma invariância nos resultados de dq_r/dy e G . Cabe ressaltar que o espalhamento da fuligem não alterou os resultados de coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$, o que é característico deste problema de temperatura prescrita.