

5

Resultados do Estudo do Queimador de Endrud (2000)

O presente capítulo apresenta um estudo da capacidade preditiva dos modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem, para a simulação da combustão turbulenta. Em particular, utilizaram-se para o cálculo das propriedades radiantes dos gases produtos de combustão, os modelos (i) Soma Ponderada dos Gases Cinzas (WSGGM) de Smith *et al.* (1982) e Mossi (2011) e (ii) Radcal. Além disto, os modelos (i) Sazhin (1994), (ii) Radcal, e, (iii) Rayleigh, foram aplicados para determinar as propriedades radiantes da fuligem. Aliados aos modelos de Ordenadas Discretas (DOM) e Moss-Brookes (MB), estes modelos visam descrever a taxa de transferência de calor por radiação associada aos gases produtos da combustão e à fuligem.

O estudo realizado neste capítulo também visa validar, por comparação com experimentos de radiação e da concentração da fuligem (Wang *et al.*, 2005), os modelos utilizados para o cálculo das propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem. Será enfatizada a discussão da influência sobre as propriedades termoquímicas e de radiação que exerce a temperatura da parede do queimador de Endrud (2000). Além disso, será estudada a influência que exercem sobre a radiação dos gases produtos da combustão os modelos Radcal e soma ponderada dos gases cinzas (WSGGM). Este último é aplicado considerando-se as diferentes tabelas de coeficiente polinomiais dos modelos WSGGM preconizadas por Smith *et al.* (1982) e Mossi (2011).

Cabe ressaltar que foi necessária, para a resolução do modelo Rayleigh, a discretização de n equações de transferência radiante global (g-RTE) para n faixas de comprimento de onda prescritos. Em cada faixa de comprimento de onda, $[\lambda_i - \lambda_{i+1})$, um coeficiente de absorção equivalente é calculado, $\bar{a}_{\lambda_i - \lambda_{i+1}} = \bar{a}_{\lambda_i - \lambda_{i+1},g} + \bar{a}_{\lambda_i - \lambda_{i+1},soot}$, resultando da soma do coeficiente de absorção equivalente dos gases produtos da combustão, $\bar{a}_{\lambda_i - \lambda_{i+1},g}$, e do coeficiente de absorção da fuligem, $\bar{a}_{\lambda_i - \lambda_{i+1},soot}$. Este último coeficiente é determinado pela aplicação de teoria de absorção/espalhamento de Rayleigh.

O processo de combustão turbulenta não pré-misturada estudado nesta seção é aquele que ocorre no queimador cilíndrico de tipo laboratorial (Endrud, 2000) de 200 mm de diâmetro e 1.150 mm de comprimento (ver Figura 5.1).

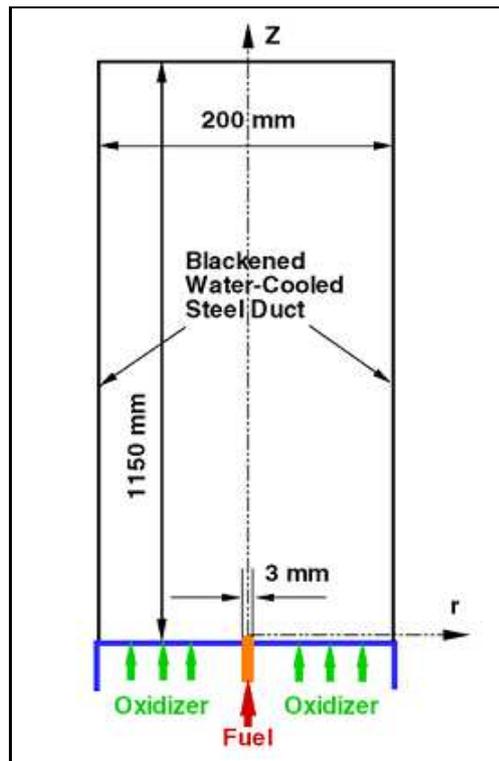


Figura 5.1: Diagrama esquemático do queimador empregado nas simulações (Wang *et al.*, 2005).

Os reagentes empregados são propano (C_3H_8) e uma mistura de ar enriquecido com oxigênio (40% O_2 e 60% N_2), os quais foram fornecidos ao queimador com velocidades de 21, 8 e 0, 6 m/s, respectivamente.

Note-se que a composição de oxigênio no oxidante escolhida pelos autores (Wang *et al.*, 2005) é fruto dos trabalhos experimentais de Wang *et al.* (2002) e Wang (2004), que estudaram as emissões de fuligem como função da concentração de oxigênio no oxidante. Considerando-se todos os demais parâmetros constantes, estes autores evidenciaram concentrações máximas de fuligem quando o propano é queimado com uma mistura de oxidante composta por 40% de oxigênio e 60% de nitrogênio. Este máximo fuligem ocorre devido à competição entre os processos de pirólise e de formação da fuligem, que são promovidos pela presença de elevadas temperaturas, e o processo de oxidação rápida da fuligem, consequência de uma concentração moderada de oxigênio.

5.1

Descrição da Geometria, Malha e Condições de Contorno

Tal como é ilustrado na Figura 5.1, o gás propano a 300 K e a uma velocidade média de 21, 8 m/s é injetado na parte inferior do queimador através de um duto de 3 mm de diâmetro. Este escoamento apresenta um número de

Reynolds de aproximadamente 15.000, ou seja, o ingresso do combustível no queimador ocorre em regime turbulento. Da mesma forma, oxidante a 300 K e 0,6 m/s, ingressa pela parte inferior do queimador na mesma direção do jato combustível (*coflow*), e escoo na região anular delimitada pela parede externa do duto do combustível e pela parede interna do queimador. Nota-se, também, que na parte externa da parede do queimador circula água que é mantida uma temperatura inferior a 373 K. A parte interna da parede longitudinal do queimador apresenta um revestimento preto que, segundo Wang *et al.* (2005), faz com que o queimador de Endrud (2000) possua emissividade interna próxima aquela exibida pelo corpo negro. Assim, em função da descrição mostrada pelos autores, neste trabalho adotou-se um valor de ϵ_P como sendo igual a 1.

5.1.1

Construção da Geometria e da Malha do Queimador

Na Figura 5.2, criada mediante o emprego do software *Design-Modeling* da AnsysTM, apresenta-se o domínio computacional e a geometria (simplificada) do queimador de Endrud (2000), considerado no presente estudo. Nesta figura também é possível observar que o domínio computacional representa apenas uma região circular de 6° (“fatia de pizza”) do queimador de Endrud (2000). Isto tem por objetivo reduzir, sob a hipótese de escoamento com simetria de revolução, o custo computacional associado à simulação da configuração completa e tridimensional do queimador. Além disso, cabe ressaltar que este domínio computacional foi levemente alterado, quando comparado ao queimador original, pela inclusão de um duto de 63 mm de comprimento para o fornecimento do propano. Isto visa garantir o desenvolvimento do escoamento do combustível a montante do queimador.

Sobre o domínio computacional, foi previamente desenvolvido um teste para se assegurar a independência de malha sobre resultados de propriedades termoquímicas e reduzir o custo de simulação computacional.

Assim, empregou-se o software AnsysTM *Meshing-Grid*, para desenvolver duas malhas hexaédricas não uniformes, (i) Malha 1, composto de 92.540 volumes de controle e (ii) Malha 2, conformado por 294.325 volumes de controle. Ambas malhas foram utilizadas na simulação da combustão turbulenta empregando-se apenas, os modelos $k-\epsilon$ padrão e dissipação dos turbilhões (EDM). Os fenômenos da radiação e da formação da fuligem não foram incluídos nesta simulação.

Os resultados de propriedades termoquímicas médias obtidas na saída do domínio computacional, isto é, de temperatura média e das frações mássicas

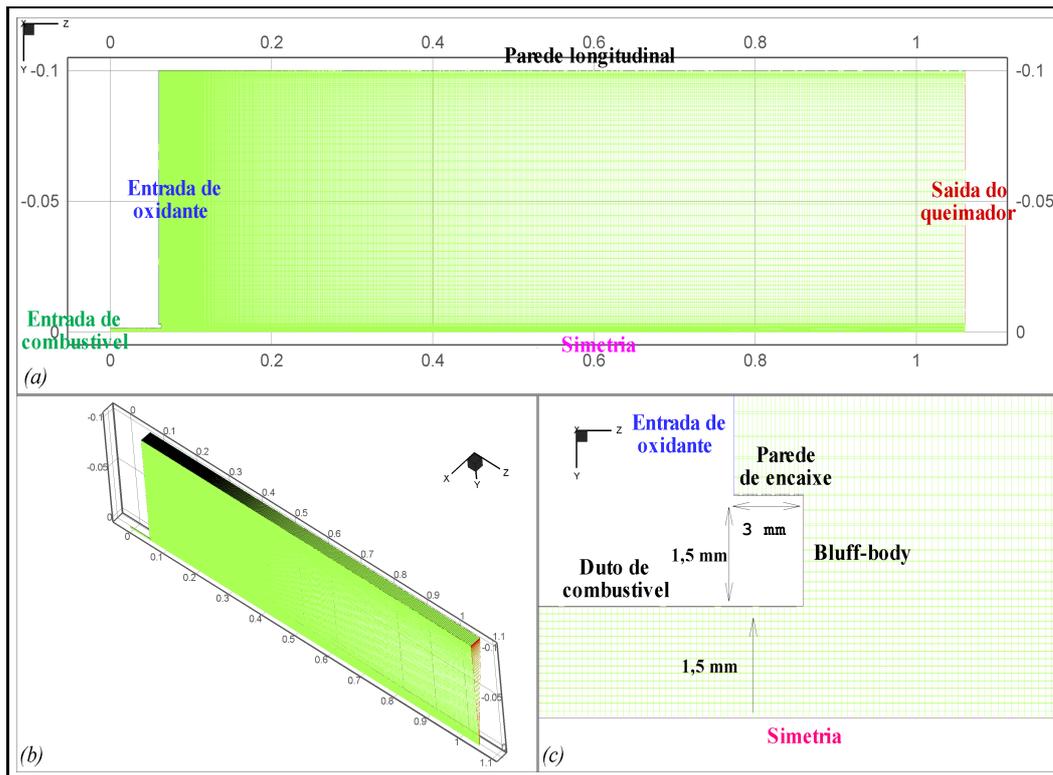


Figura 5.2: Domínio computacional desenvolvido nos softwares Design-Modeling e Meshing-Grid empregado nas simulações em Fluent (a) Disposição Frontal, (b) Disposição em perspectiva, e, (c) Detalhe da malha na região de entrada do propano ao queimador

médias de dióxido de carbono e vapor de água, não diferem em mais de 5%. Esta é a razão pela qual, foi escolhida a Malha 1 pois, além da pequena variação exibida por ambas malhas, a Malha 1 apresenta menor custo computacional. Cabe ressaltar que as propriedades termoquímicas previstas pelo modelo EDM são consideravelmente superestimadas, i.e., temperaturas máximas superiores a 3.500 K foram observadas em ambas as simulações.

Na construção da Malha 1, o domínio computacional foi dividido em 8 sub-domínios, os quais foram discretizados em 92.540 elementos hexaédricos não uniformes arranjados sobre 257.695 nós. As Figuras 5.2a, 5.2b e 5.2c mostram o resultado da discretização do domínio computacional. Nelas é possível verificar o alto grau de refino da malha obtida após o processo da discretização. O refino é mais pronunciado na vizinhança da região de injeção do combustível, onde são encontrados volumes de controle cuja arestas mínimas são de $100 \mu\text{m}$, tal como pode se perceber na Figura 5.2c. Neste domínio computacional, diversas taxas de crescimento foram empregadas na construção das malhas, as quais dependem da região do domínio (8 sub-domínios). A menor taxa de crescimento é 1,1, ao longo do eixo radial dos sub-domínios

próximos à injeção do combustível, onde espera-se obter elevados valores do gradiente de velocidade e de concentração das espécies. As taxas de crescimento na direção longitudinal foram mais elevadas, valores máximos de 2,5 foram prescritos, em particular, nas zonas próximas à saída do domínio.

5.1.2

Equações de Transporte, Condições de Operação e de Contorno

Tal como apresentado no Capítulo 3, são considerados, em todas as simulações, as equações de transporte de massa, quantidade de movimento e da energia escritas em contexto clássico de média de Reynolds. O modelo $k-\varepsilon$ realizável é utilizado para descrever o campo turbulento. Além disso, o modelo de elementos de chama não adiabático e em regime permanente (*Non-Adiabatic Flamelet Model*) é empregado para descrever a combustão turbulenta não pré-misturada, sendo que a construção da biblioteca de elementos de chama considera o mecanismo cinético detalhado GRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, 1999) [ver Anexo A] para descrever a cinética da oxidação do propano, C_3H_8 . O modelo Ordenadas Discretas (DOM) para a transferência de calor por radiação permite discretizar, em ângulos sólidos finitos, a equação de transferência da intensidade radiante (RTE) em cada volume de controle discreto. As propriedades radiantes dos gases, meio participante, foram obtidas mediante a aplicação dos modelos de Soma Ponderadas dos Gases Cinzas (Hottel e Sarofim, 1967) e Radcal (Grosshandler, 1993).

O modelo de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999) foi levado em conta para prever a produção da fuligem, função dos processo de nucleação, crescimento da superfície, aglomeração e oxidação. Para isto, é necessário que o modelo da cinética química das reações seja capaz de descrever o campo da concentração de acetileno (C_2H_2), o qual é o principal precursor da formação de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) que por sua vez, são precursores na formação da fuligem. Também é indispensável dispor da concentração do radical hidroxila (OH), principal responsável pela oxidação da fuligem. Finalmente, os modelos de Sazhin (1994), Radcal e Rayleigh permitem acoplar a radiação com a fuligem, pois estes calculam as propriedades radiantes da fuligem como função, entre outros parâmetros, de sua concentração.

Uma aceleração da gravidade desprezível ($g = 0 \text{ m/s}^2$) e uma pressão constante e igual à atmosférica (1 atm) são consideradas como condições de operação do queimador. As condições de contorno prescritas nas fronteiras do domínio computacional (ver Figuras 5.2a e 5.2c) são apresentadas em detalhe na Tabela 5.1. Note-se que, para as propriedades que não são explicitamente indicadas nesta tabela, a condição de fluxo nulo na fronteira é prescrita.

Tabela 5.1: Condições de contorno utilizada na simulação do queimador de Endrud (2000).

REGIÃO	PARÂMETROS
Entrada de Combustível	Combustível: Propano Gasoso (C_3H_8) $U_{z,0} = 21,8$ m/s, ($Re = 15.000$) $\mathcal{I}_t = \sqrt{u'^2}/\bar{U} = 3\%$, $l_t = 2$ mm, $T_0 = 300$ K, $X_{C_3H_8} = 1$, $\tilde{Z} = 1$, $\widetilde{Z'^2} = 0$ $\epsilon_P = 0$ (emissividade interna - parede fictícia) .
Entrada de Oxidante	Oxidante: 40% de Oxigênio (O_2) e 60% de Nitrogênio (N_2) $U_{z,0} = 0,6$ m/s $\mathcal{I}_t = \sqrt{u'^2}/\bar{U} = 3\%$, $l_t = 2$ mm, $T_0 = 300$ K, $X_{O_2} = 0,4$, $X_{N_2} = 0,6$, $\tilde{Z} = 0$, $\widetilde{Z'^2} = 0$ $\epsilon_P = 0$ (emissividade interna - parede fictícia)
Paredes	Tipo: superfície não deslizante $T_P = 300$ K $\epsilon_P = 1$ (emissividade da parede)
Saída	$p_{gauge} = 0$ atm $\epsilon_P = 0$ (emissividade interna - parede fictícia)

Nesta tabela, $U_{z,0}$ é a velocidade longitudinal instantânea na entrada dos reagentes, $X_{C_3H_8}$, X_{O_2} e X_{N_2} , são as frações molares do propano, oxigênio e nitrogênio, \tilde{Z} e $\widetilde{Z'^2}$ são a média e a variância da fração de mistura, \mathcal{I}_t é a intensidade turbulenta, definida como a razão entre o valor absoluto das flutuações turbulentas do campo de velocidade e a velocidade média, l_t é o comprimento integral característico da turbulência.

Os valores de \mathcal{I}_t e l_t são assumidos como iguais àqueles empregados no trabalho de Wen *et al.* (2003), que simularam a combustão turbulenta de um queimador de querosene/ar pré-vaporizado com características dimensionais e operacionais similares àquelas do queimador de Endrud (2000). Isto é necessário devido à ausência de dados destas propriedades turbulentas dos escoamentos nos trabalhos de Wang *et al.* (2002), Wang (2004) e Wang *et al.* (2005). Com a única exceção das propriedades da turbulência inicial do escoamento e da temperatura na parede do queimador, as demais condições de contorno são idênticas às empregadas por Wang (2004) e Wang *et al.* (2005). Estas condições de contorno são consideradas, aqui, como o ponto de partida das análises paramétricas a serem apresentadas na seção seguinte.

Finalmente, os parâmetros de referência utilizados no modelo Moss-Brookes para a simulação do queimador de metano com o ar são mostrados na Tabela 5.2. Novamente, com exceção do fator de escala que controla a taxa de crescimento da superfície da fuligem, C_γ , [Equação (3-58)] que foi

Tabela 5.2: Constantes do modelo Moss-Brookes empregados para simulação do queimador de Endrud (2000).

CONST.	DENOMINAÇÃO	VALOR
C_α	Constante da taxa de nucleação	54 s^{-1}
T_α	Temperatura de ativação da nucleação	21.000 K
C_β	Constante da taxa de coagulação	1
C_γ	Fator de escala da taxa de crescimento de superfície	$8.000 \text{ kg}\cdot\text{m}/\text{kmol}\cdot\text{s}$
T_γ	Temperatura de ativação da taxa de crescimento de superfície	12.100 K
C_ω	Constante de oxidação	$105,8125 \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1/2}\cdot\text{s}^{-1}$
η_{coll}	Parâmetro da eficiência de colisão	0,04
C_{oxid}	Parâmetro da taxa de escalonamento da oxidação	0,8

modificada de 11.700 para $8.000 \text{ kg}\cdot\text{m}/\text{kmol}\cdot\text{s}$, as demais constantes são aquelas empregadas por Brookes e Moss (1999) para descrever a combustão turbulenta de metano e ar. Esta modificação de C_γ foi adotada porque os resultados de simulações preliminares mostraram que o valor original de C_γ proposto por Brookes e Moss (1999) superestima, em aproximadamente 30%, os resultados experimentais de Wang *et al.* (2005), do fluxo de calor radiante na parede longitudinal do queimador, $q_{r,P}$.

5.1.3 Método Numérico

Empregou-se software FluentTM, onde o esquema Power-Law foi considerado para a discretização espacial das equações de transporte enquanto que o algoritmo SIMPLE foi levado em conta para o acoplamento entre a pressão e velocidade. Como critério de convergência, foram empregados um resíduo inferior a (i) 1×10^{-9} , para a equação da equação de transporte da energia e (ii) 1×10^{-6} , para as demais equações de transporte.

Com exceção do modelo de ordenadas discretas e de elementos de chama não adiabático, todas as equações de transporte são resolvidas de maneira sequencial a cada iteração. Para o caso do modelo elementos de chama não adiabático, as propriedades termoquímicas médias são atualizadas a cada 5 iterações. A resolução do método de ordenadas discretas é realizada a cada 10 iterações. Utilizou-se, em todas as simulações do queimador de Endrud (2000), 24 processos do procesador Quad-Core AMD OpteronTM 2350 de 8 núcleos, 2 Ghz de frequência e 32 Gb de memória RAM.

5.2

Resultados e Discussões

5.2.1

Considerações Iniciais

De forma geral, são apresentados e discutidos os resultados calculados de fluxo de calor radiante na parede longitudinal do queimador, $q_{r,P}$, e da fração volumétrica de fuligem equivalente, F_V^* . O valor F_V^* é calculado mediante a formulação proposta por Kent e Bastin (1984), a qual utiliza a teoria de absorção/espalhamento Rayleigh [Equação (3-95)] e a Lei de Beer-Lambert para obter,

$$F_V^* = \frac{\lambda}{6\pi d \Im\left(\frac{m^2-1}{m^2+2}\right)} \ln\left(\frac{I_n}{I_0}\right), \quad (5-1)$$

onde, F_V^* é a fração volumétrica da fuligem integrada sobre um caminho óptico igual ao diâmetro do injetor do combustível, que produz a mesma extinção da luz medida experimentalmente, m é o índice de refração complexo para a fuligem, cujo valor de $1,57 - 0,56i$ para a combustão de propano e ar foi obtido experimentalmente por Dalzell and Sarofim (1969) e sugerido por Smyth e Shaddix (1996). O comprimento de onda, λ , utilizado por Wang *et al.* (2005), é 632,8 nm, d é o diâmetro do injetor, e I_0 e I_n são as intensidades inicial e medida do feixe do laser. Nota-se que diferentes valores do índice de refração, m , conduzem a valores de F_V^* substancialmente diferentes, assim, este pode ser considerado apenas como uma constante multiplicativa. Além disso, trabalhos recentes (Degroux *et al.*, 2012) indicam que o índice de refração de partículas de fuligem varia ao longo do processo de formação e consumo, o que não é considerado neste estudo.

Uma vez que o FluentTM não fornece resultados de fração volumétrica equivalente, F_V^* , esta é determinada através da integração de resultados de coeficiente de absorção da fuligem, a_{soot} , para cada faixa de comprimento que compreende o diâmetro do queimador. A Figura 5.3 ilustra a metodologia de cálculo onde a intensidade do feixe de laser, I_i , que ingressa ao i -ésimo volume de controle é atenuada pela presença da fuligem no meio participante. Assim, da lei de Beer-Lambert, obtém-se que a intensidade do feixe da laser que sai do volume de controle, I_i , é igual a

$$I_{i+1} = I_i e^{-a_{soot,i} \Delta x_i}, \quad (5-2)$$

onde $a_{soot,i}$ e Δx_i são o coeficiente de absorção da fuligem e o caminho óptico que percorre o feixe de laser dentro o i -ésimo volume de controle

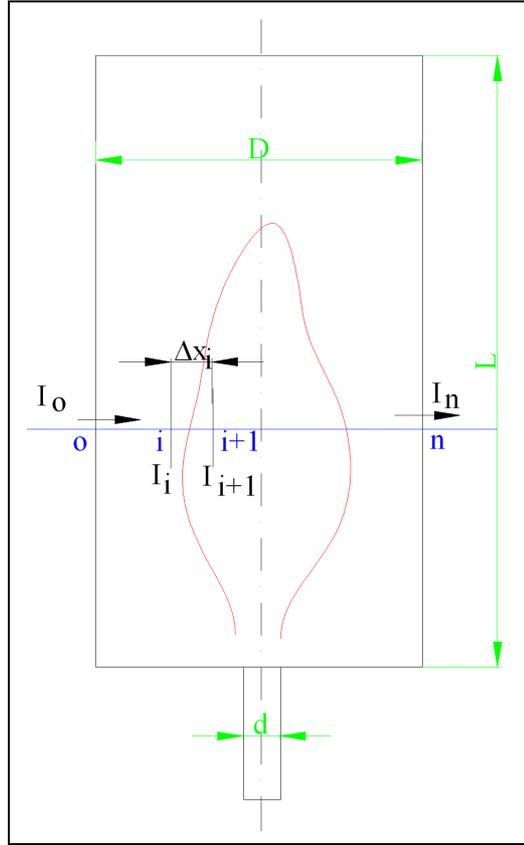


Figura 5.3: Esquema representativo no cálculo da fração volumétrica da fuligem equivalente, F_V^* , a partir de resultados de coeficiente de absorção da fuligem, a_{soot} .

respectivamente. A integração da Equação (5-2) sobre o diâmetro do queimador conduz à seguinte expressão

$$I_n = I_0 e^{-\sum_{i=0}^{n-1} a_{soot,i} \Delta x_i}, \quad (5-3)$$

ou

$$\ln \left(\frac{I_n}{I_0} \right) = - \sum_{i=0}^{n-1} a_{soot,i} \Delta x_i, \quad (5-4)$$

que, substituído na Equação (5-1), leva a

$$F_V^* = - \frac{\lambda}{6\pi d \mathfrak{S} \left(\frac{m^2-1}{m^2+2} \right)} \sum_{i=0}^{n-1} a_{soot,i} \Delta x_i. \quad (5-5)$$

Assim, F_V^* é calculado a partir do campo de a_{soot} , e este, por sua vez, é o resultado do emprego dos modelos (Sazhin, Rayleigh ou Radcal) que associam o coeficiente de absorção da fuligem, a_{soot} , com sua concentração (i.e., Y_{soot} , $[X_{soot}]$, f_V), que é determinada pelo modelo de Moss-Brookes.

Também são estudadas as mudanças de $q_{r,P}$ e F_V^* como resultado da variação da temperatura da parede do queimador, T_P . Cabe ressaltar que os campos calculados de temperatura, T , da radiação incidente, G , do coeficiente de absorção global, a , da fração volumétrica da fuligem, f_V , e da fração mássica de dióxido de carbono e vapor de água, Y_{CO_2} e Y_{H_2O} , são apresentados nesta seção. Suas variações são analisadas como resposta às modificações de T_P e C_γ e da escolha dos modelos que descrevem as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem [WSGGM, Sazhin, Rayleigh e Radcal].

A discussão dos resultados inicia-se com a comparação dos resultados experimentais e numéricos de Wang *et al.* (2005) com os modelos WSGGM (com dados de Smith *et al.*, 1982) e Sazhin (1994), os quais se encontram implementados no FluentTM. Estes modelos calculam as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem. As condições de contorno empregadas para esta comparação encontram-se nas Tabelas 5.1 e 5.2.

5.2.2

Comparação dos Resultados Obtidos em Relação aos de Wang et al. (2005)

Tal como foi detalhado no Capítulo 2, Wang (2004) e Wang *et al.* (2005), além de fornecer dados experimentais e de simulação numérica referente ao fluxo de calor radiante na parede do queimador e à fração volumétrica de fuligem ao longo do eixo do queimador, apresentam também resultados numéricos de temperatura e frações mássicas de dióxido de carbono e vapor de água. Para isto utilizaram o modelo P-1 Full Spectrum- κ [P1-FSK] para o cálculo da radiação dos gases produtos da combustão em ausência da fuligem, e o modelo P-1 Full Spectrum- κ acoplado com o modelo dos momentos [P1-FSK&MM] para a previsão da radiação com presença da fuligem.

Os resultados numéricos obtidos por Wang (2004) e Wang *et al.* (2005) são utilizados neste capítulo para comparação com aqueles obtidos no presente trabalho mediante o emprego (i) da junção dos modelos de ordenadas discretas e soma ponderada dos gases cinzas de Smith *et al.* (1982) [ou modelo DOM-WSGGM(Smith)], e (ii) do acoplamento dos modelos ordenadas discretas e soma ponderada dos gases cinzas de Smith *et al.* (1982) com os modelos de Moss Brookes e Sazhin, [ou modelo DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin]. Enquanto que o modelo DOM-WSGGM(Smith) determina a transferência de calor por radiação apenas dos gases produtos da combustão, o modelo DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin leva em conta a presença da fuligem na predição da transferência de calor por radiação.

A Figura 5.4, mostra o campo de temperatura obtido para o caso da

combustão turbulenta com radiação segundo os modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin, e sua comparação com aqueles oriundos da simulação de Wang *et al.* (2005) sem (modelo P1-FSK) e com (modelos P1-FSK&MM) a presença da fuligem. Nota-se que os resultados obtidos neste trabalho são discrepantes em relação aos de Wang *et al.* (2005). Uma vez que o mesmo modelo de transporte turbulento foi utilizado por Wang *et al.* (2005) e neste trabalho, as discrepâncias no campo de temperatura poderiam ser explicados seja pelo modelo de transporte de energia radiante seja pelo modelo de combustão. Na Figura 5.4a observa-se, na região inicial de desenvolvimento, uma forte redução da máxima temperatura do escoamento. Nesta região as espessuras ópticas são muito pequenas, o que implica que a temperatura é controlada pela combustão. Assim, a redução de temperatura observada quando da utilização do modelo de elementos de chama não adiabático indica que o emprego do modelo *Eddy Break-Up* por Wang *et al.* (2005) é inadequada. Pode ser concluído assim, que nesta região ocorre forte interação entre combustão e turbulência, o que é usual neste escoamento de tipo jato livre (Masri *et al.*, 1996).

Estas discrepâncias no campo de temperatura levam consigo a divergências apreciáveis nos contornos das frações mássicas de dióxido de carbono e vapor de água, tal como é mostrado na Figura 5.5. Neste caso particular, o emprego dos modelos Flamelet não adiabático e WSGGM(Smith)&Sazhin fornece campos de Y_{CO_2} e Y_{H_2O} que são mais uniformes do que aqueles previstos pelos modelos EBU e P1-FSK&MM de Wang *et al.* (2005).

A Figura 5.6 apresenta os resultados de temperatura e das frações mássicas de dióxido de carbono e vapor de água ao longo do eixo de simetria do queimador de Endrud (2000) empregando-se os modelos DOM–WSGGM(Smith) e DOM&MB–WSGGM(Smith)&Sazhin, e comparados com aqueles obtidos da simulação numérica por Wang *et al.* (2005) mediante os modelos P1-FSK e P1-FSK&MM. Para efeitos de simplificação, os modelos DOM–WSGGM(Smith) e DOM&MB–WSGGM(Smith)&Sazhin serão designados pelas seguintes nomenclaturas WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin, respectivamente.

De forma geral, percebe-se que a temperatura obtida dos modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin são maiores do que a obtida pelos modelos P1-FSK e P1-FSK&MM na maior parte do domínio de análise. Além disso, nota-se a existência de uma maior uniformidade na distribuição de temperatura dos modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin do que nos modelos P1-FSK e P1-FSK&MM. Acredita-se que estas discrepâncias são devidas, principalmente, à escolha do modelo de combustão. Enquanto,

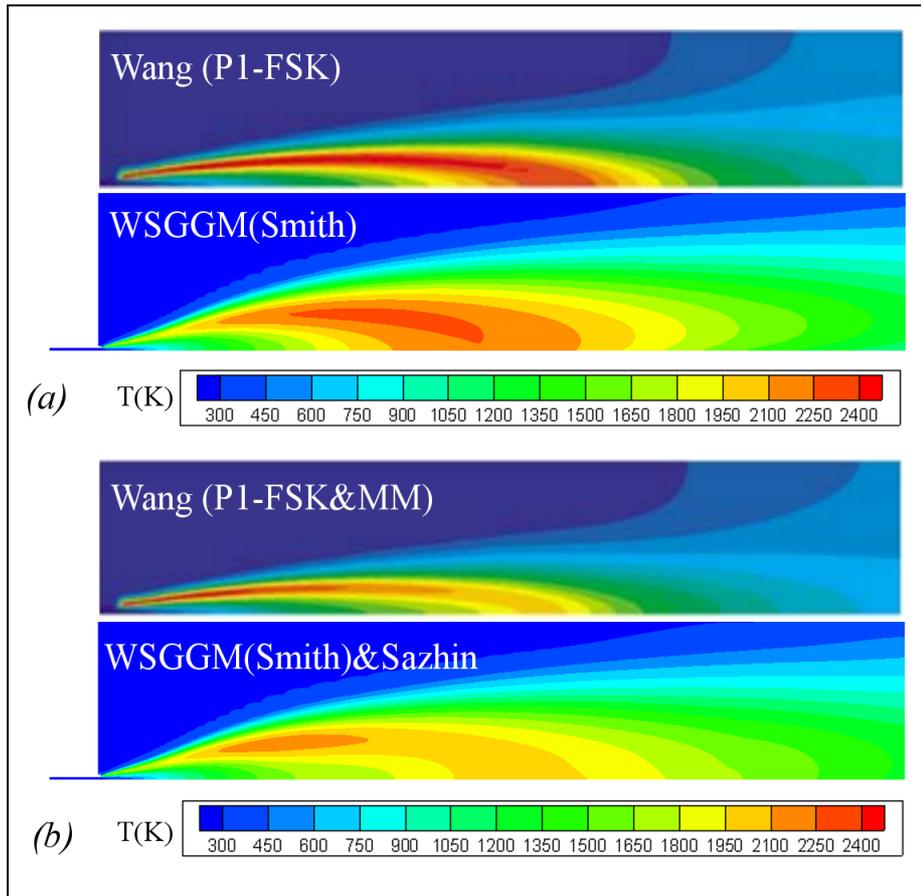


Figura 5.4: Comparação do campo de temperatura obtidos pelos modelos (a) DOM–WSGGM(Smith) e P1-FSK, e, (b) e DOM&MB–WSGGM(Smith)&Sazhin e P1-FSK&MM.

Wang *et al.* (2005) emprega o modelo EBU (*Eddy Break-up, EBU*), o presente trabalho utilizou o modelo de elementos de chama não adiabático (*Non-Adiabatic Flamelet*) em suas simulações.

Além disso, a Figura 5.6a mostra que os modelos de propriedades radiantes que levam em conta a fuligem [i.e., P1-FSK&MM e WSGGM(Smith)&Sazhin], trazem como resultado a uma maior homogeneidade no perfil longitudinal da temperatura, e a uma redução significativa de seu valor máximo. Isto indica que a presença da fuligem exerce influência sobre a transferência da energia térmica por radiação, modificando assim o campo de temperatura. Cabe ressaltar que esta influência é determinada principalmente pela concentração de fuligem formada em um processo de combustão.

As Figuras 5.6b e 5.6c mostram, respectivamente, a evolução longitudinal das frações mássicas de dióxido de carbono e de vapor de água obtidas com os modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin. Neste caso, percebe-se que a inclusão da fuligem não modifica substancialmente a distribuição das

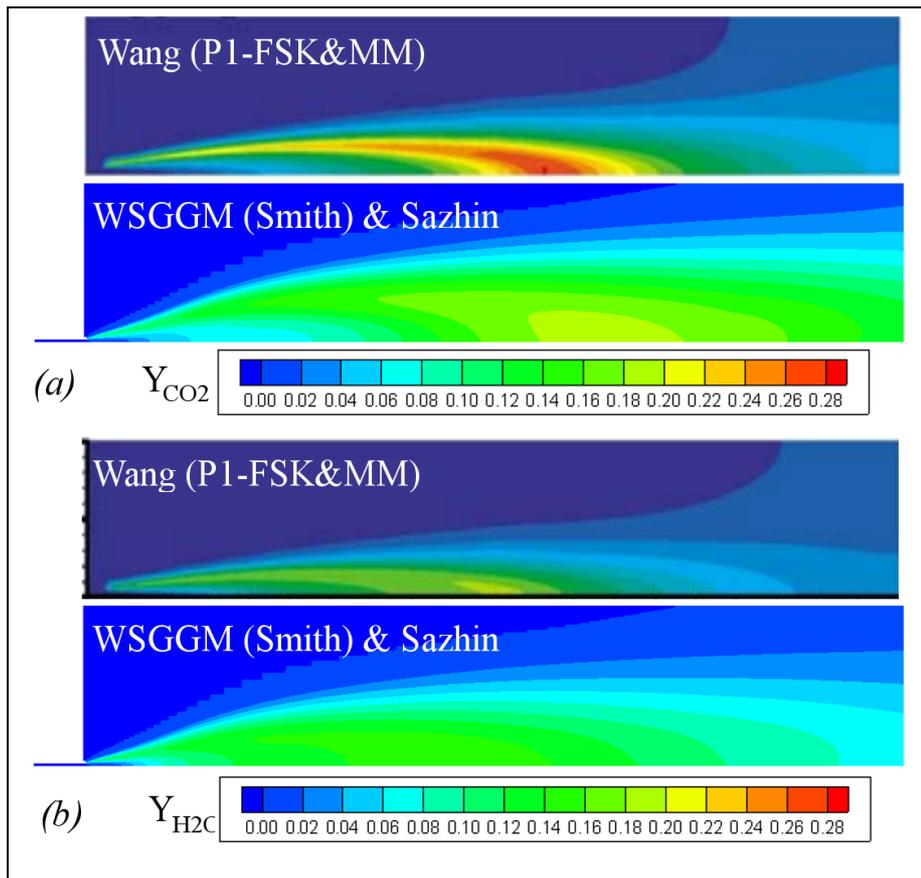


Figura 5.5: Comparação do campo de fração mássica de (a) dióxido de carbono, e (b) vapor de água, obtidos na presente simulação com os modelos DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin e P1-FSK&MM.

frações mássicas. Um comportamento similar pode ser observado nos resultados numéricos de Wang *et al.* (2005) quando os modelos P1-FSK e P1-FSK&MM são comparados.

Nota-se também, das Figuras 5.6b e 5.6c, uma discrepância apreciável nos resultados numéricos de Y_{CO_2} e Y_{H_2O} quando os modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin são comparados com os modelos P1-FSK e P1-FSK&MM. Esta discrepância sustenta a hipótese de que os diferentes modelos de combustão empregados são os responsáveis pela discordância na previsão dos campos de temperatura e das frações mássicas das espécies químicas. Assim, o modelo de elemento de chama não adiabático utilizado neste trabalho fornece perfis de frações mássicas mais uniformes do que os previstos pelo modelo EBU empregado por Wang *et al.* (2005).

Assim, é de se esperar grandes discrepâncias na comparação dos resultados numéricos de fluxo de calor radiante na parede do queimador, $q_{r,P}$, e da fração volumétrica da fuligem equivalente, F_V^* . Uma vez que existem resultados experimentais de $q_{r,P}$ e F_V^* , estes serão utilizados para a validação de modelos

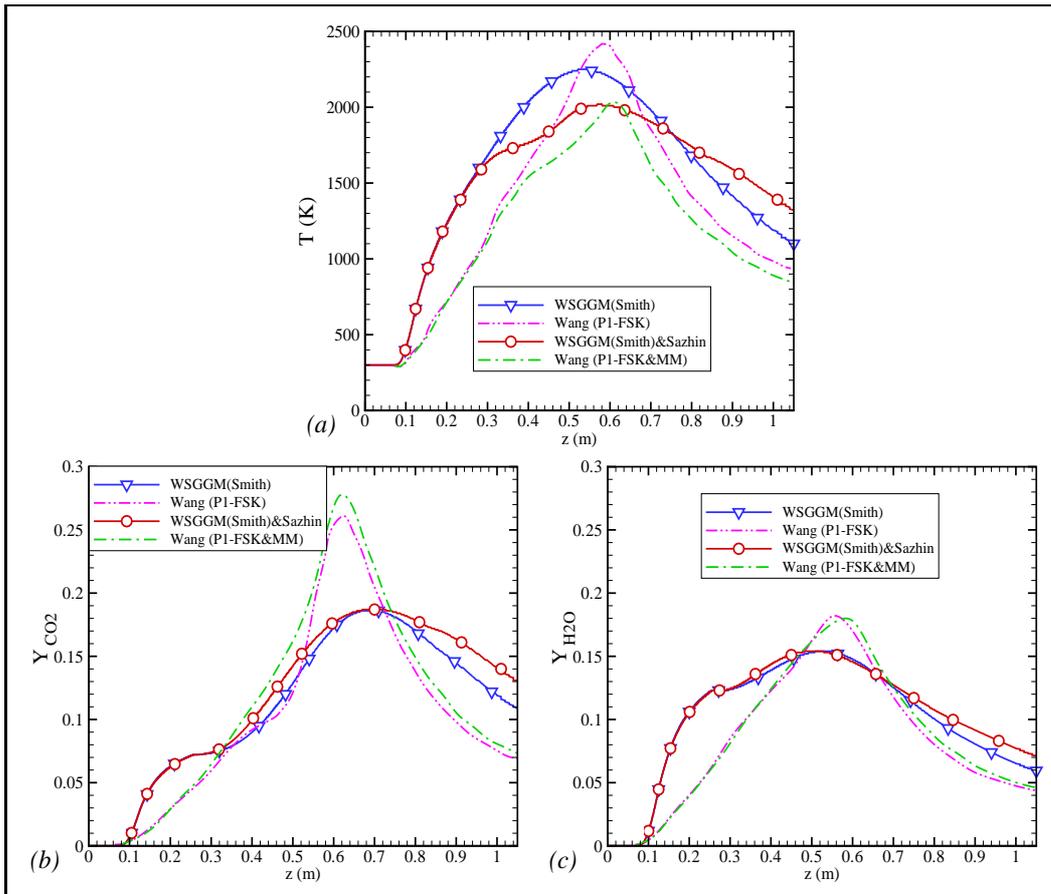


Figura 5.6: Comparação dos resultados numéricos de Wang *et al.* (2005) ao longo do eixo de simetria, com aqueles obtidos com os modelos DOM-WSGGM(Smith) e DOM&MB-WSGGM(Smith)&Sazhin. (a) Temperatura, (b) fração mássica de dióxido de carbono e, (c) fração mássica de vapor de água.

de propriedades radiantes de gases produtos de combustão e da fuligem.

Na Figura 5.7 são mostrados os resultados experimentais de Wang *et al.* (2005) do fluxo de calor radiante na parede do queimador, $q_{r,P}$, e da fração volumétrica da fuligem equivalente, F_V^* , ao longo do queimador. Esta figura também traz os resultados calculados no presente trabalho mediante o emprego dos modelos, (i) Ordenadas Discretas e Soma Ponderada dos Gases Cinzas de Smith *et al.* (1982) [WSGGM(Smith)], para o cálculo da radiação apenas dos gases produtos da combustão, e, (ii) Ordenadas Discretas e Soma Ponderada dos Gases Cinzas de Smith *et al.* (1982) acoplado com o modelo de Moss Brookes e Sazhin, [WSGGM(Smith)&Sazhin], que determina a radiação dos gases produtos da combustão e da fuligem. Além disso, são apresentados nesta figura os resultados numéricos de $q_{r,P}$ obtidos por Wang *et al.* (2005) aplicando-se (a) o modelo de radiação P1-Espectral sem previsão da fuligem [P1-FSK], e (b) o modelo dos momentos na previsão da fuligem acoplados

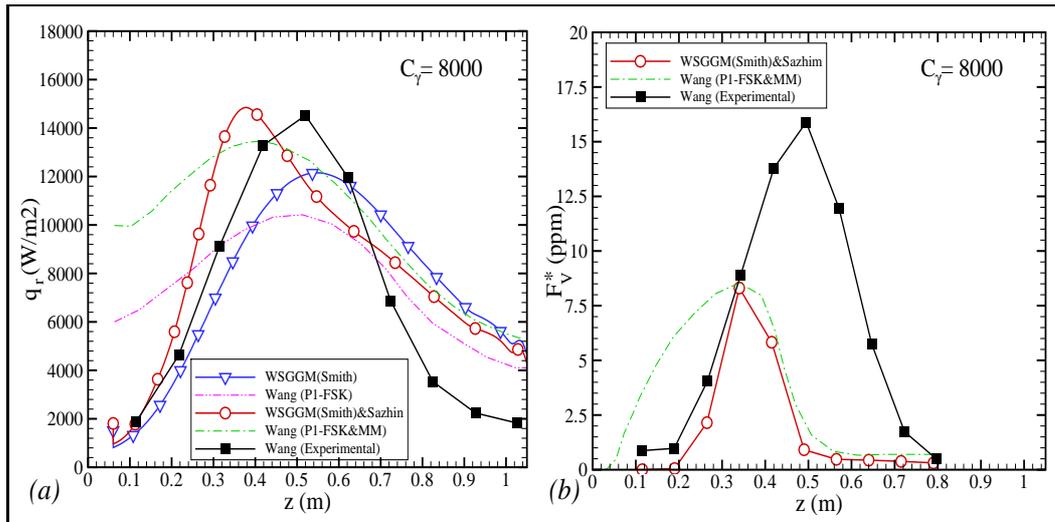


Figura 5.7: Comparação do modelo WSGGM(Smith) e do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin com os resultados experimentais e numéricos de Wang *et al.* (2005) referente ao (a) fluxo de calor radiante na parede do queimador, $q_{r,P}$, e, (b) fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* .

modelo P1-Espectral [P1-FSK&MM].

Nos casos em que a formação da fuligem não é levada em conta, percebe-se, da Figura 5.7a, que o fluxo de calor radiante obtido no presente estudo com o modelo WSGGM(Smith) apresenta, em termos globais, uma melhor concordância com os resultados experimentais de Wang *et al.* (2005), do que aqueles previstos por Wang *et al.* (2005) utilizando o modelo P1-FSK. O modelo WSGGM(Smith) subestima, levemente, os valores experimentais do fluxo de calor radiante na parede do queimador na região próxima à entrada dos reagentes, enquanto que o modelo P1-FSK superestima em até 6 vezes o valor de $q_{r,P}$, nesta região. Segundo Wang (2004), a razão principal pelo qual os valores de $q_{r,P}$ são elevados é a superestimação do campo de temperatura pelo modelo *Eddy Break-Up*, que fornece taxas de reação demasiadamente elevadas e, portanto, temperaturas de chama próximas à de equilíbrio. Outra explicação possível da discrepância apresentada nos resultados numéricos de Wang *et al.* (2005) é a limitação intrínseca do modelo de radiação P1, cujos resultados que são tão menos acurados quanto menos espesso é o caminho óptico. Na região próxima à saída do jato de combustível, a espessura óptica normal à parede, aD , não supera 0, 1.

Assim, os resultados indicam que o modelo de elementos de chama não adiabático é mais adequado do que o modelo *Eddy Break-Up* para descrever o processo termoquímico nas chamas turbulentas não pré-misturadas, em presença de radiação. Não obstante, vale a pena ressaltar que, apesar do modelo elementos de chama não adiabático representar melhor as propriedades ter-

moquímicas do processo de combustão turbulenta não pré-misturada, sua capacidade preditiva depende da qualidade do mecanismo cinético químico escolhido e da função densidade de probabilidade usada para obter as propriedades termoquímicas médias do escoamento reativo.

Acredita-se que a superestimação do fluxo de calor radiante nas regiões da parede longitudinal vizinhas à saída dos gases é devida, principalmente, ao maior valor das temperaturas calculadas. Esta hipótese não pode ser verificada, devido à inexistência de medidas do campo de temperatura no queimador de Endrud (2000).

Note-se que o decréscimo de $q_{r,P}$ com z é mais lento nos resultados de simulação do que nos experimentais. Esta característica é comum a todos os resultados obtidos e sua origem será discutida na seção 5.3.6.

Nos casos em que a fuligem é levada em conta, os resultados do fluxo de calor radiante obtidos com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin exibem, quando comparados com os experimentos, uma melhor previsão do valor máximo de $q_{r,P}$ do que o modelo P1-FSK&MM. O valor máximo de $q_{r,P}$ obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin é muito semelhante àquele encontrado nos resultados experimentais ($\approx 15.000 \text{ W/m}^2$). Entretanto, ocorre um ligeiro deslocamento à montante da posição do valor máximo de $q_{r,P}$. O desvio do valor máximo de $q_{r,P}$ está diretamente relacionado à localização da concentração máxima da fuligem, a qual depende da interação entre os modelos de turbulência, combustão, radiação e formação/oxidação da fuligem.

Na Figura 5.7b apresentam-se os resultados da fração volumétrica da fuligem equivalente, F_V^* , obtidos no presente trabalho com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e aqueles obtidos por Wang *et al.* (2005) através da experimentação e da simulação numérica [P1-FSK&MM]. Observa-se que para $z < 330 \text{ mm}$, o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin apresenta uma melhor previsão do valor medido de F_V^* do que o modelo P1-FSK&MM de Wang *et al.* (2005). Ambos modelos exibem um máximo de F_V^* de 8,5 ppm em $z = 330 \text{ mm}$, e uma mesma taxa de decaimento na região mais a jusante, resultado da oxidação da fuligem. Cabe ressaltar que, para $z > 330 \text{ mm}$, ambos modelos, WSGGM(Smith)&Sazhin e P1-FSK&MM, não reproduzem corretamente os resultados experimentais de Wang *et al.* (2005). Como será visto mais adiante, a inexistência de acetileno, C_2H_2 (calculado pelo modelo cinético GRI-Mech 3.0) nas regiões a jusante de $z = 450 \text{ mm}$ leva a este decaimento prematuro de F_V^* .

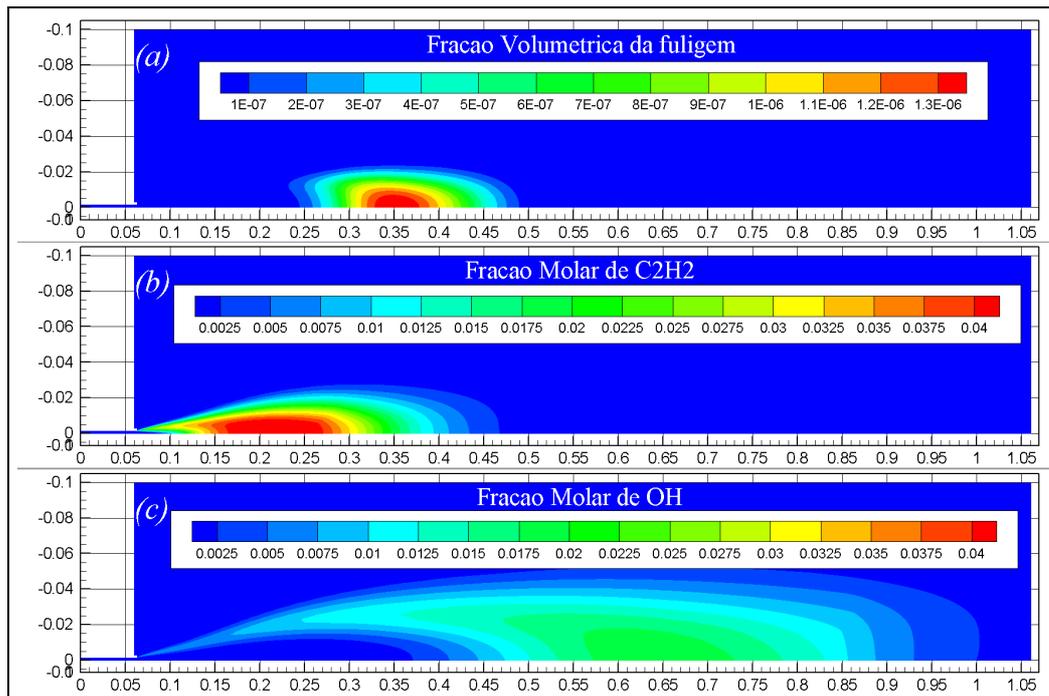


Figura 5.8: Resultado do acoplamento do modelo elementos de chama não adiabático com o conjunto de modelos DOM&MB–WSGGM(Smith)&Sazhin. Campos de (a) fração volumétrica da fuligem, f_V , e das frações molares do (b) acetileno, $X_{C_2H_2}$, e, (c) hidroxila, X_{OH} .

5.2.3 Análise da Formação da Fuligem

A Figura 5.8 apresenta os campos da fração volumétrica da fuligem, f_V , [obtidos do modelo de Moss-Brookes, quando acoplado com o modelo de Sazhin (1994)] e das frações molares do acetileno, $X_{C_2H_2}$, e da hidroxila, X_{OH} , obtidos do modelo elementos de chama não adiabático. Como se pode perceber na figura, o aparecimento da fuligem inicia-se na região de $z = 230$ mm, a mesma onde é evidenciada a presença de campos de concentrações máximas do acetileno. Isto reflete o fato que a produção da fuligem segue um processo governado pela competição entre as taxas de formação (nucleação e crescimento da superfície) e oxidação, sendo o acetileno, C_2H_2 , e a hidroxila, OH , os únicos agentes precursor e oxidante da fuligem nos modelos empregados.

Assim, a formação da fuligem é máxima nas proximidades de $z = 350$ mm, região onde é também iniciada a queda monotônica de concentrações de acetileno e da concentração de hidroxila. Mais a jusante, a fuligem é consumida devido à preponderância da hidroxila sobre o acetileno. Este processo é continuamente desenvolvido até que a fuligem é completamente oxidada na região de $z = 470$ mm, onde é observada a ausência completa do acetileno e a presença de concentrações apreciáveis da hidroxila.

Esta discussão pode também ser ampliada levando-se em conta cada uma das contribuições, no modelo de Moss-Brookes [Equação (3-58)], para geração e consumo da fuligem. Assim, é apresentado na Figura 5.9, o campo da fração volumétrica da fuligem, f_V , e as taxas correspondentes de (i) formação [nucleação, $(\frac{dM}{dt})_{inception}$, e crescimento da superfície, $(\frac{dM}{dt})_{surf,growth}$], (ii) consumo por oxidação, $(\frac{dM}{dt})_{oxidation}$, da fração mássica da fuligem [Equação (3-57)]. Em linhas gerais, percebe-se, desta figura, que os processos de crescimento da superfície e de oxidação são os principais contribuintes para a formação e o consumo da fuligem. Por outro lado, é verificada a pequena, ainda que essencial, a contribuição do processo de nucleação na formação da fuligem.

Uma comparação dos campos apresentados pelas Figura 5.9c e 5.9d, mostra que, na região delimitada por $250 < z < 400$ mm e próxima ao eixo de simetria, o processo de formação da fuligem é resultado apenas da contribuição do crescimento de partículas e fuligem, $(\frac{dM}{dt})_{surf,growth}$. Este comportamento, poderia ser esperado, devido à inexistência do radical hidroxila (ver Figura 5.8c). Um balanço das contribuições exercidas na geração/consumo da fuligem pelos processos de nucleação, crescimento da superfície e oxidação, é exibido na Figura 5.9e. Nela, claramente são diferenciadas duas regiões, a saber,

- A primeira região, delimitada por $250 < z < 400$ mm e $0 < y < -16$ mm, que exibe valores positivos de $\frac{dM}{dt}$, o que indica uma geração de fuligem. É nesta mesma região onde são verificadas concentrações máximas de fuligem (ver Figuras 5.8a e 5.9a).
- A segunda região, por $100 < z < 1.063$ mm e $-20 < y < -100$ mm, na qual são obtidos valores negativos de $\frac{dM}{dt}$, o que aponta a um consumo da fuligem. Cabe ressaltar que esta região é a mesma onde são observadas concentrações apreciáveis do radical hidroxila (ver Figura 5.8c).

Desta forma, fica evidente o papel preponderante que desempenham o acetileno e a hidroxila na formação/consumo da fuligem. Assim, a correta descrição dos campos de acetileno e hidroxila, aliado à valores confiáveis das constantes oriundas do modelo de Moss-Brookes, são determinantes para a previsão da distribuição da fuligem quando da queima turbulenta de hidrocarbonetos.

A seguir são discutidos os diferentes resultados obtidos quando do emprego dos modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e fuligem, assim como da variação das condições de contorno e do parâmetro que controla a taxa de crescimento, C_γ , no modelo de Moss-Brookes.

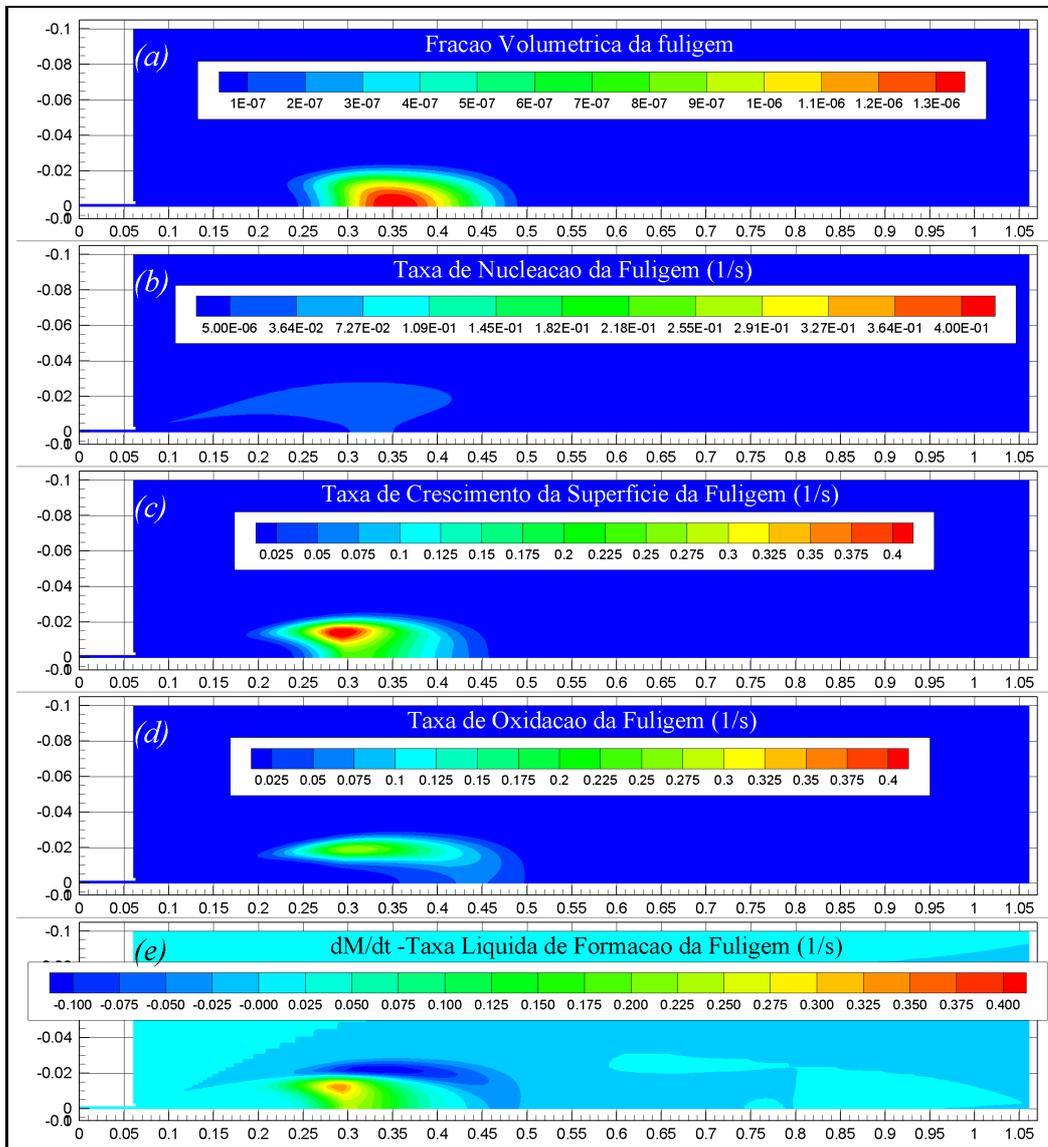


Figura 5.9: Balanço da taxa de geração de fração mássica de fuligem resultante da Equação (3-58) no modelo de Moss-Brookes (Brookes e Moss, 1999). Campos de (a) fração volumétrica da fuligem, f_V , e taxas de (b) nucleação, $\left(\frac{dM}{dt}\right)_{inception}$, (c) crescimento da superfície, $\left(\frac{dM}{dt}\right)_{surf,growth}$, (d) oxidação, $\left(\frac{dM}{dt}\right)_{oxidation}$, e, (e) líquido $\frac{dM}{dt}$, da fuligem.

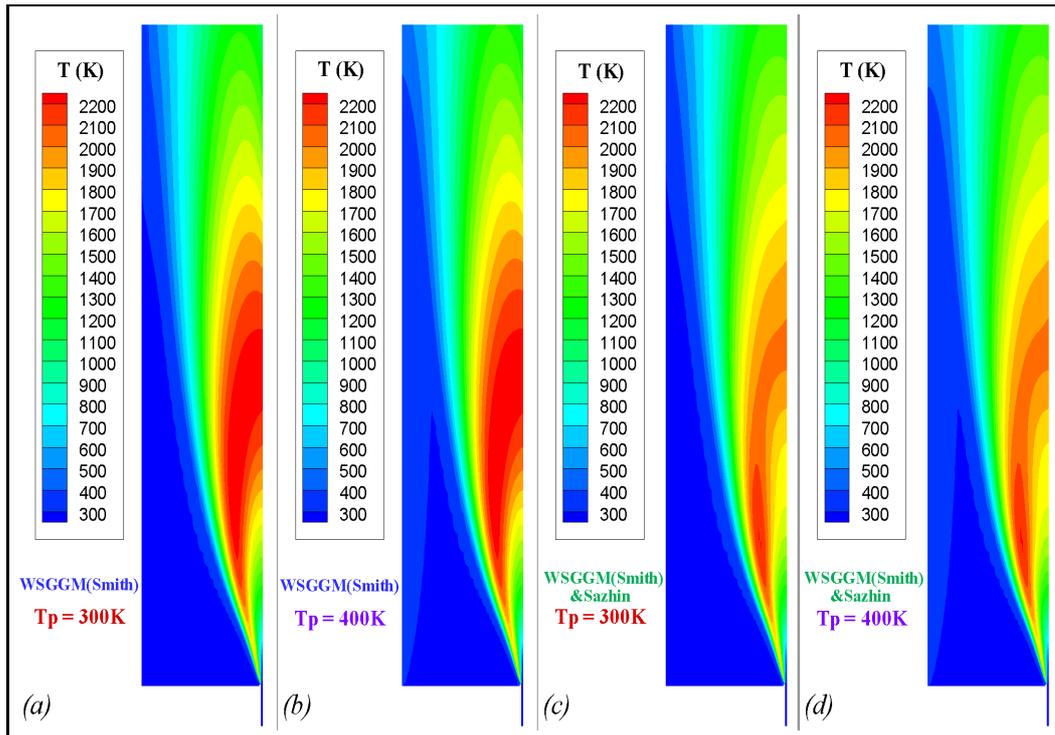


Figura 5.10: Campos de temperaturas do escoamento obtidos com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

5.2.4

Estudo da Influência da Temperatura da Parede e da Presença da Fuligem

Nesta seção apresentam-se e discutem-se os resultados da influência, sobre as propriedades do escoamento, da temperatura da parede lateral do queimador e da inclusão nas simulações de modelos de formação/oxidação da fuligem. Para isto, os modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin são empregados para simular quatro casos. Nos dois primeiros casos, emprega-se o modelo WSGGM(Smith) para levar em conta apenas a radiação dos gases produtos da combustão, meio participante, e temperaturas de parede iguais a 300 e 400 K. A influência da presença da fuligem é considerada, nos dois outros casos, com o emprego do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e considerando-se temperaturas de parede de 300 e 400 K. Cabe ressaltar que no caso do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin foi prescrito o valor de $C_\gamma = 8.000$ kg-m/kmol-s no modelo de Brookes e Moss (1999). Este valor é aquele que permite a melhor descrição da formação/oxidação da fuligem, quando da combustão do propano com 40% de oxigênio a pressão ambiente.

Na Figura 5.10 apresentam-se os campos de temperatura do escoamento obtidos como resultado da simulação dos quatro casos. Assim, nos dois

primeiros casos (Figuras 5.8a e 5.8b), quando a formação da fuligem não é levada em conta, a mudança da temperatura da parede de 300 para 400 K não exerce influência significativa sobre a temperatura do escoamento, cujo valor máximo não supera 2.287 K. Um comportamento similar é observado nos dois casos seguintes, quando a formação da fuligem e sua interação com a radiação são levados em conta (Figuras 5.8c e 5.8d). Nestes, a temperatura máxima é inferior a 2.204 K, isto é, evidencia-se uma redução da temperatura máxima do escoamento de aproximadamente 80 K como resultado da inclusão da fuligem.

Balanco Energético Global

Um balanço energético foi realizado de forma a detalhar a distribuição de troca de energia entre o domínio e suas fronteiras. Pretende-se, assim, quantificar a influência que exercem, sobre a taxa de transferência de calor por radiação à parede do queimador, $\dot{Q}_{r,P}$, a temperatura da parede do queimador e a presença da fuligem na simulação. Assim as Tabelas 5.3 e 5.4 apresentam, respectivamente, as taxas de transferência de energia total sensível e por radiação entre o domínio e suas fronteiras. Note-se que os valores apresentados nestas tabelas correspondem apenas à “fatia de pizza” de 6° como domínio de estudo.

De forma geral, observa-se da Tabela 5.3 que quase toda a energia liberada pela combustão atravessa as fronteiras de saída (dos gases produtos da combustão) e a parede do queimador. Além disso, percebe-se que a energia transferida para a parede representa aproximadamente 30% da energia liberada. Uma análise mais detalhada permite verificar que o aumento da temperatura da parede longitudinal de 300 K para 400 K reduz em aproximadamente 16,5% a energia total sensível que é transferida para a parede longitudinal. A consideração da fuligem, utilizando o modelo de Sazhin (1994), traduz-se por um acréscimo de aproximadamente 9% da energia total total sensível transferida para a parede longitudinal do queimador.

Na Tabela 5.4, note-se que para o caso de $T_P = 400$ K, que é o caso mais representativo da temperatura da parede do queimador, existe uma excelente concordância entre o resultado da taxa de transferência de energia por radiação, $\dot{Q}_{r,P}$, obtido pelo modelo WSGGM(Smith) quando este é comparação com o experimento de Wang *et al.* (2002). Esta aparente concordância é enganosa pois, para um caso mais realista, isto é, quando o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, que considera a radiação da fuligem, o valor de $\dot{Q}_{r,P}$ supera em aproximadamente 14% daquele fornecido pelo experimento. Acredita-se que esta superestimação de $\dot{Q}_{r,P}$ é devido à escolha da emissividade da parede, $\epsilon_P = 1$. De fato, quando a temperatura do meio é maior do que a

Tabela 5.3: Balanço térmico nos contornos obtido com modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA TOTAL SENSÍVEL (W)				
Resultado experimental do calor de reação = 295 W (Wang <i>et al.</i> , 2002)				
FRONTEIRAS	WSGGM(Smith)		WSGGM(Smith) &Sazhin	
	$T_P = 300$ K	$T_P = 400$ K	$T_P = 300$ K	$T_P = 400$ K
	Entrada de oxidante	-0,34	-0,89	-0,85
Parede longitudinal	-88,0	-73,6	-95,3	-82,6
Encaixe	0,00	0,01	0,01	0,01
Bluff-body	-0,02	-0,02	-0,02	-0,02
Entrada de combustível	0,02	0,02	0,02	0,02
Duto de combustível	0,00	0,00	0,00	0,00
Saída do queimador	-190	-204	-184	-199
Calor de reação (Fonte)	278	278	280	283
SOMA	0,01	0,01	0,01	-0,01

temperatura da parede, a redução de ϵ_P , embora diminua a potência emissiva da parede, apresenta uma considerável contribuição na reflexão da radiação térmica que incide na parede proveniente do meio. Isto leva a uma redução, quase proporcional à emissividade da parede, da taxa de transferência de energia por radiação. Assim a adoção de $\epsilon_P \approx 0,9$ levaria a resultados de $\dot{Q}_{r,P}$ mais próximos dos obtidos nos experimentos.

Uma comparação entre resultados das Tabelas 5.4 e 5.3 permite identificar a forte influência sobre os demais processos de transferência de calor que exerce a radiação do meio participante sobre a parede do queimador. Assim, para $T_P = 300$ K, independentemente da consideração da fuligem, percebe-se que a taxa de transferência de energia por radiação na parede longitudinal do queimador, $\dot{Q}_{r,P}$, representa aproximadamente 92% da taxa de transferência de energia para a parede. Os 8% restantes são devidos aos processos de advecção e difusão.

Das Tabelas 5.3 e 5.4 evidencia-se que, no caso em que $T_P = 400$ K, para ambos modelos, WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin, a taxa de transferência de calor por radiação que é fornecida pelo meio participante para a parede do queimador, $\dot{Q}_{r,P}$, é aproximadamente 6,5% maior do que a taxa de transferência de energia total que é fornecida para a parede $\dot{Q}_{T,P}$. Isto denota a existência de uma taxa de transferência de calor por convecção, que neste caso é fornecida pela parede ($T_P = 400$ K) para o meio participante adjacente a esta fronteira ($T = 300$ K).

Tabela 5.4: Taxa de transferência de calor por radiação nos contornos obtidos com modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) DWSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA TOTAL POR RADIAÇÃO (W)				
Resultado experimental de $\dot{Q}_{T,P} = -72,4$ W (Wang <i>et al.</i> , 2002)				
COND. CONTORNO	WSGGM(Smith)		WSGGM(Smith)&Sazhin	
	$T_P = 300$ K	$T_P = 400$ K	$T_P = 300$ K	$T_P = 400$ K
Entrada de oxidante	-1,03	-1,56	-1,54	-2,08
Parede longitudinal	-80,5	-78,8	-88,1	-87,5
Encaixe	0,00	0,00	0,00	0,00
Bluff-Body	0,00	0,00	0,00	0,00
Entrada de comb.	0,00	0,00	0,00	0,00
Duto de combustível	0,00	0,00	0,00	0,00
Saída do queimador	0,00	0,00	0,00	0,00
SOMA	-81,5	-80,4	-89,6	-89,6

Os resultados dos campos de temperatura do escoamento apresentados para a condição de $T_P = 400$ K (ver Figuras 5.10b e 5.10d), permitem identificar, na região a jusante do queimador, uma grande similitude com aqueles resultados obtidos para $T_P = 300$ K (ver Figuras 5.10a e 5.10c). Entretanto, nota-se que à diferença do caso de $T_P = 300$ K, existe para $T_P = 400$ K uma camada limite térmica (visível na versão digital) que se inicia na região a montante da parede, a qual permite a transferência de energia por convecção desta região da parede para o escoamento (oxidante).

A Tabela 5.5 mostra as propriedades médias na saída do queimador. Quando a temperatura da parede é aumentada de 300 para 400 K, evidencia-se um acréscimo da temperatura na saída dos gases de 32 K devido, principalmente, à redução em 16,5% da energia total sensível que transfere o escoamento para a parede longitudinal do queimador. A inclusão do modelo Sazhin (1994), para determinar a fuligem, leva a uma redução da temperatura média na saída dos gases de até 15 K, resultado de um incremento de 9% da energia total sensível que é transferida para a parede longitudinal do queimador.

Variações insignificantes das frações mássicas de vapor de água (H_2O) e dióxido de carbono (CO_2), são observadas na Tabela 5.5. Isto permite afirmar que a presença da fuligem e/ou o incremento da temperatura da parede longitudinal não alteram de maneira significativa a termoquímica da queima do propano com o oxigênio. De fato, a Tabela 5.3 revela que a variação da taxa de energia liberada é inferior a 2%.

É apresentada na Figura 5.11 a radiação incidente total, G , [Equação

Tabela 5.5: Propriedades médias na saída do queimador Endrud (2000) fornecidos pelos modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

PARÂMETROS MÉDIOS NA SAÍDA DO QUEIMADOR				
PROPRIEDADE	WSGGM(Smith)		WSGGM(Smith)&Sazhin	
	$T_P = 300\text{K}$	$T_P = 400\text{K}$	$T_P = 300\text{K}$	$T_P = 400\text{K}$
Temperatura (K)	731	760	717	751
Fração Mássica C ₃ H ₈	7,45E-12	6,45E-12	9,15E-12	7,54E-12
Fração Mássica CO	3,06E-04	3,37E-04	3,13E-04	3,37E-04
Fração Mássica H ₂ O	2,55E-02	2,55E-02	2,56E-02	2,59E-02
Fração Mássica CO ₂	4,65E-02	4,64E-02	4,67E-02	4,73E-02

3-67] obtida nestes mesmos quatro casos. Nota-se que, com o aumento da temperatura da parede longitudinal do queimador de 300 para 400 K, o valor de G permanece inalterado nas regiões do escoamento onde ocorrem temperaturas elevadas e altas concentrações de gases CO_2 e H_2O (não mostrados) e fuligem. Não obstante, o acréscimo da temperatura da parede de 300 para 400 K conduz a um aumento homogêneo de aproximadamente 50% da radiação incidente nas regiões do escoamento vizinhas à parede. Isto pode ser percebido pelo deslocamento das isolinhas de $G = 10.000$ e 20.000 W/m² para a direção da parede (ver Figuras 5.11b e 5.11d).

O coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$, calculado para estes quatro casos é mostrado na Figura 5.12. Nesta figura, é possível corroborar, por comparação entre os dois primeiros e os dois últimos casos, a invariância do coeficiente de absorção quando a temperatura da parede é incrementada de 300 para 400 K. Os valores máximos de $a = a_g$ ($a_{soot} = 0$) são inferiores a $0,7$ m⁻¹ nos primeiros dois casos. O valor de $a = a_g + a_{soot}$ nos dois últimos casos atinge $3,28$ m⁻¹, principalmente na região do escoamento onde é evidenciada a presença de concentrações apreciáveis de fuligem, o que pode ser visto na Figura 5.13.

A Figura 5.13 mostra a fração volumétrica da fuligem para os casos onde a fuligem é considerada na simulação mediante o emprego do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin e para temperaturas de parede do queimador de 300 e 400 K. Desta figura, verifica-se que este incremento da temperatura da parede praticamente não altera o campo de fração volumétrica da fuligem, cujos valores máximos são próximos a $1,41$ ppm. Isto é o reflexo da pouca influência que exerce esta variação de temperatura da parede sobre as propriedades termoquímicas e radiantes do escoamento.

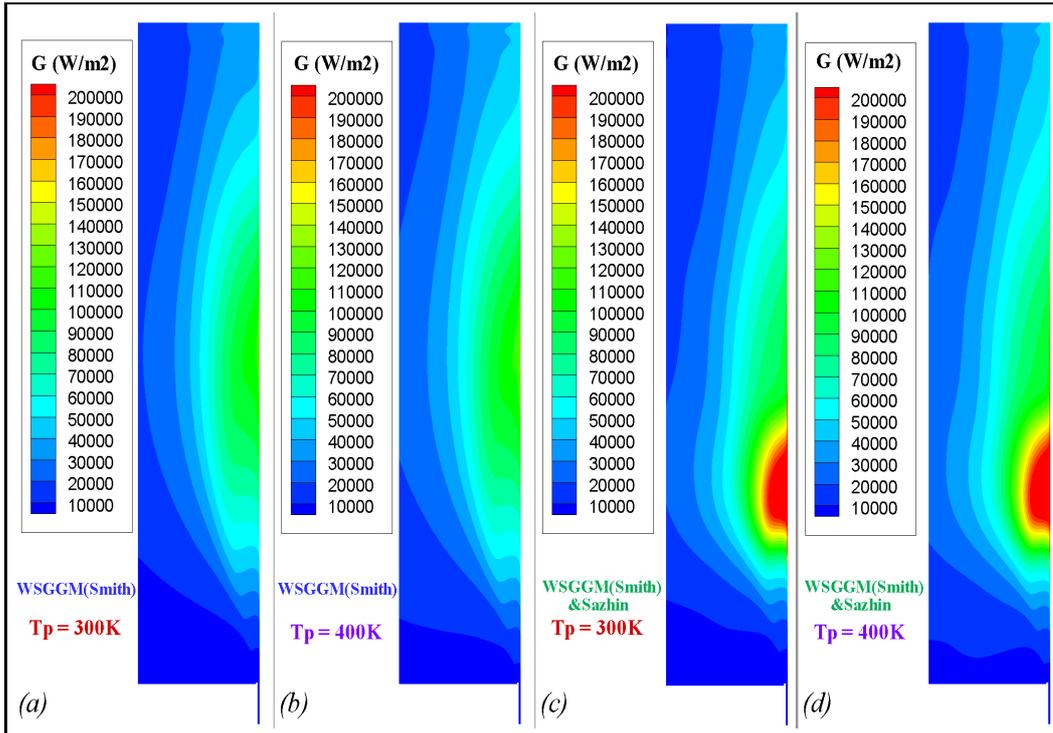


Figura 5.11: Radiação incidente, G , obtidos com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

Análise de Propriedades Integrais

São apresentados na Figura 5.14 os resultados do fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, ao longo da parede do queimador obtidos com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Smith)&Sazhin, e para as temperaturas de parede de 300 e 400 K. Também são apresentados, para fins de referência, os resultados experimentais de Wang *et al.* (2005), e de simulação numérica empregando os modelos P1-FSK e P1-FSK&MM.

Negligenciando-se a formação da fuligem [modelo WSGGM(Smith)], observa-se da Figura 5.14a, que um aumento da temperatura na parede do queimador de 300 para 400 K conduz a uma redução pouco significativa no fluxo de calor radiante em quase toda a parede. Apenas é perceptível uma diminuição de $q_{r,P}$ na região da parede longitudinal localizada entre $z = 63$ e $z = 150$ mm. Esta diminuição é o resultado do aumento da energia radiante que é emitida pela parede como consequência do aumento de T_P , e que apenas é manifesto nas regiões da parede que se encontram próximas às regiões “frias” do escoamento. Da mesma forma, a Figura 5.14b mostra um mesmo comportamento de $q_{r,P}$ quando o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin é empregado para T_P iguais a 300 e 400 K. Note-se, para ambos modelos

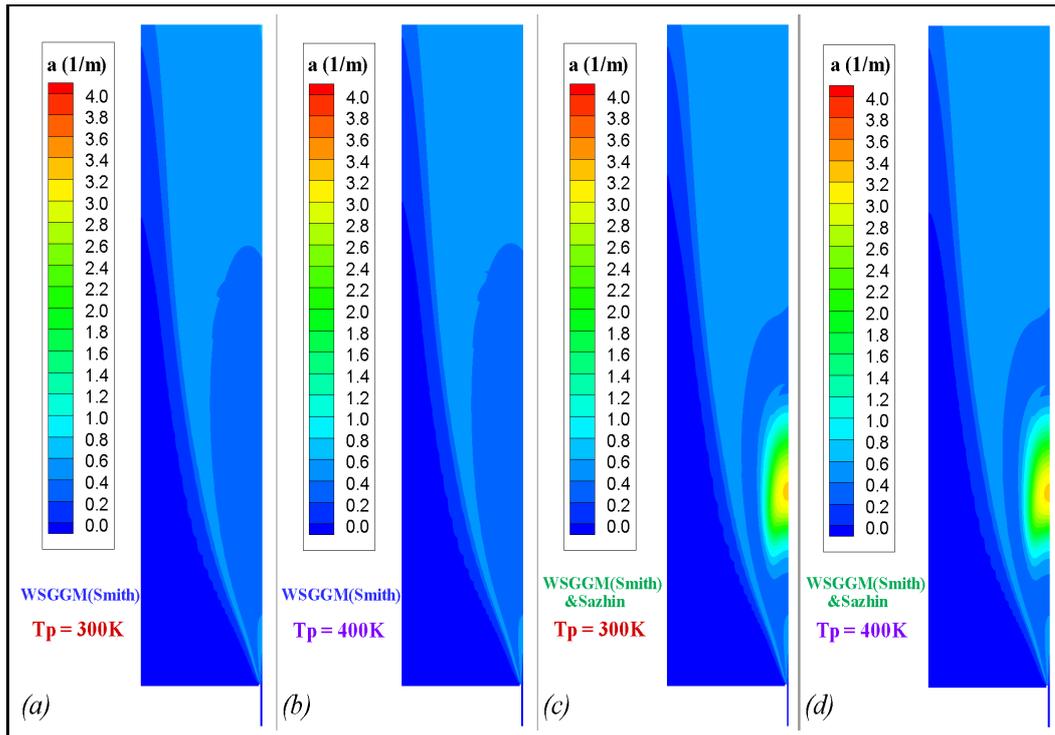


Figura 5.12: Coeficiente de absorção global, a , obtidos com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ K, (b) WSGGM(Smith) @ $T_P = 400$ K, (c) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (d) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

[WSGGM(Smith) e WSGGM(Smith)&Sazhin], que a redução do fluxo de calor radiante na região da parede longitudinal vizinha à entrada dos reagentes é pequena diante ao seu valor máximo, $q_{r,max}$.

A Figura 5.15 apresenta o efeito do incremento da temperatura da parede do queimador de 300 para 400 K sobre evolução longitudinal da fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , empregando-se o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Nota-se que este incremento de temperatura da parede não exerce nenhuma influência no valor de F_V^* . Este comportamento pode ser atribuído, novamente, à pequena contribuição da radiação da parede sobre o escoamento, a qual é restrita à camada limite térmica que se desenvolve na parede do queimador.

Análise de $T_P = 700$ K

Uma vez que as propriedades termoquímicas do escoamento não foram apreciavelmente modificadas com o aumento da temperatura de 300 para 400 K, foi investigado com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin um caso em que a temperatura da parede é de 700 K, a fim de avaliar sua influência neste caso extremo.

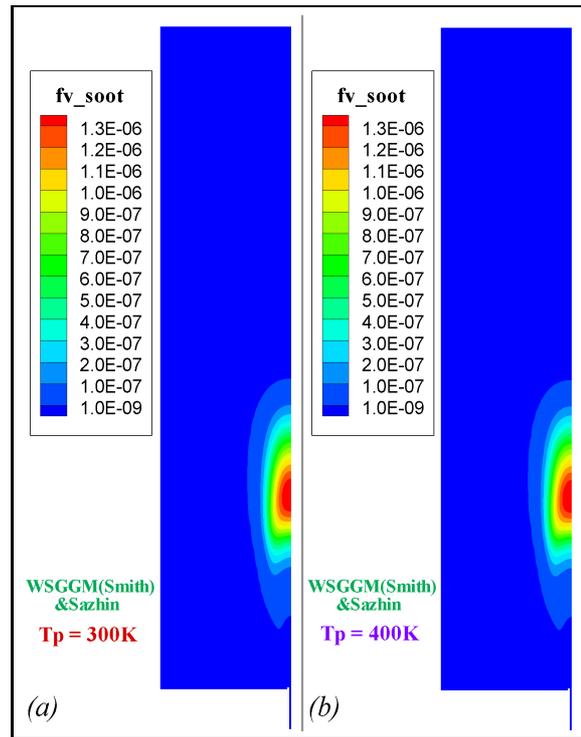


Figura 5.13: Fração volumétrica da fuligem, f_V , obtidas com os modelos e para temperaturas da parede iguais a (a) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ K, e, (b) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 400$ K.

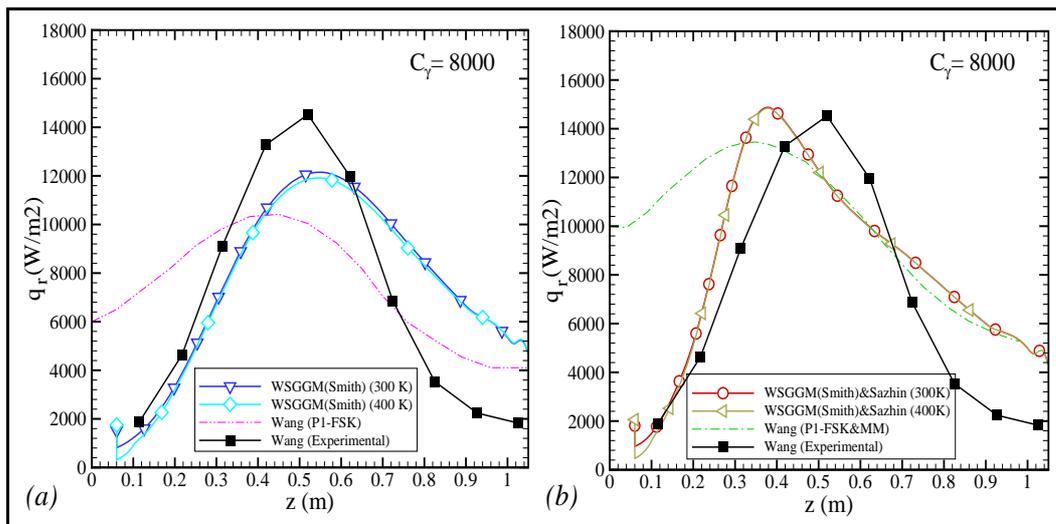


Figura 5.14: Fluxo de calor radiante na parede longitudinal do queimador de Endrud (2000) calculado com os modelos, (a) WSGGM(Smith) @ $T_P = 300$ e 400 K, e (b) WSGGM(Smith)&Sazhin @ $T_P = 300$ e 400 K.

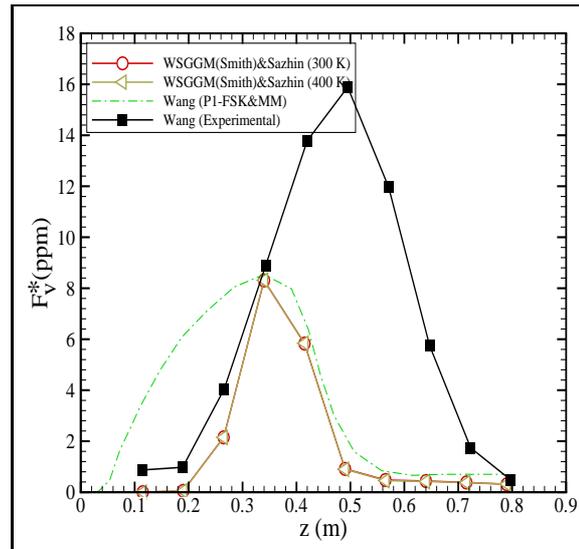


Figura 5.15: Fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , do queimador de Endrud (2000) calculado com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e para $T_P = 300$ e 400 K.

A Figura 5.16 mostra os campos de temperatura, T , e de radiação incidente, G , calculados com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, a temperaturas de parede, T_P , de 300 e 700 K. É possível perceber que este incremento de T_P conduz a um acréscimo apreciável da temperatura do escoamento apenas nas regiões próximas à parede. Mudanças quase imperceptíveis da temperatura do escoamento são observadas na região central do queimador.

Além disto, é notável na Figura 5.16 um incremento uniforme da radiação incidente no escoamento como consequência do aumento da temperatura da parede de 300 para 700 K. Cabe ressaltar que o aumento de G responde, principalmente, ao incremento da temperatura na parede do queimador, sendo pouca a contribuição da variação das propriedades termoquímicas do meio participante. Esta afirmação será corroborada na discussão a seguir.

Apresentam-se na Figura 5.17, os campos da fração mássica de dióxido de carbono, Y_{CO_2} , e do coeficiente de absorção global, a , obtidos com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para temperaturas de parede de 300 e 700 K. Desta figura, percebe-se que este incremento de 400 K não acarreta mudança apreciável nos campos da fração mássica do dióxido de carbono nem do coeficiente de absorção global. Cabe ressaltar que este mesmo comportamento é também observado para as demais espécies químicas (H_2O , C_3H_8 , CH_4 , fuligem, etc.) que participam da combustão, cujo campos não são mostrados por questões de brevidade.

Voltando à discussão da Figura 5.16, levando-se em conta as pequenas mudanças observadas nos campos de temperatura (ver Figura 5.16a e c) e do

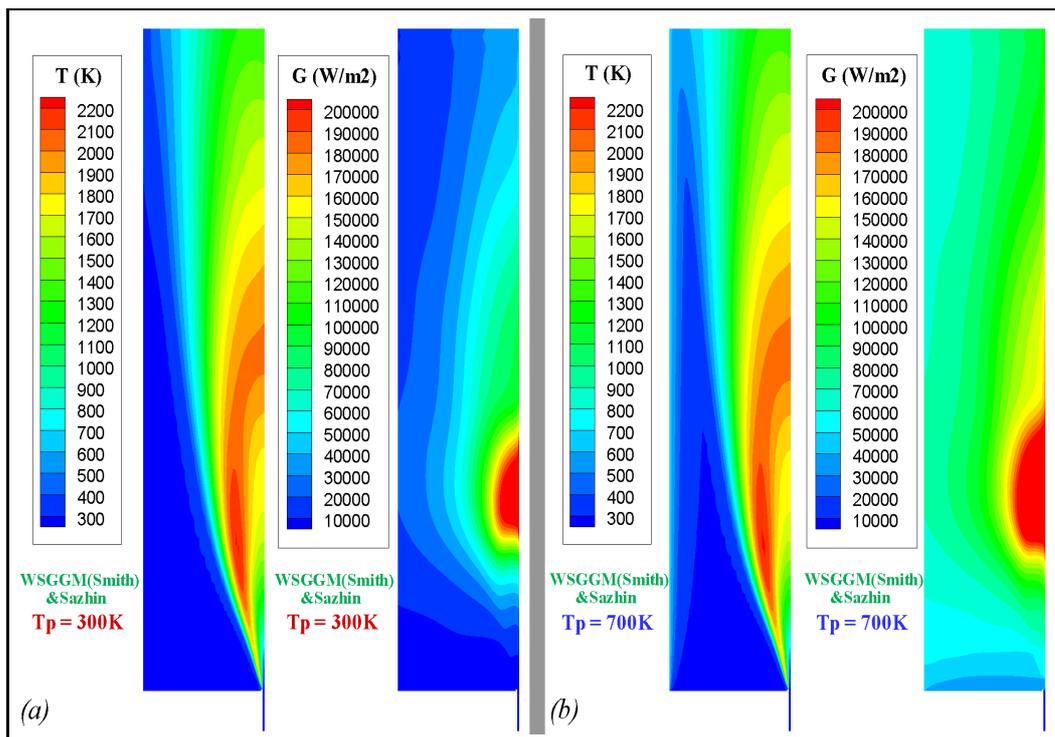


Figura 5.16: Campos de temperatura e radiação incidente obtidos da simulação usando o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para (a) $T_P = 300$ K, e, (b) $T_P = 700$ K.

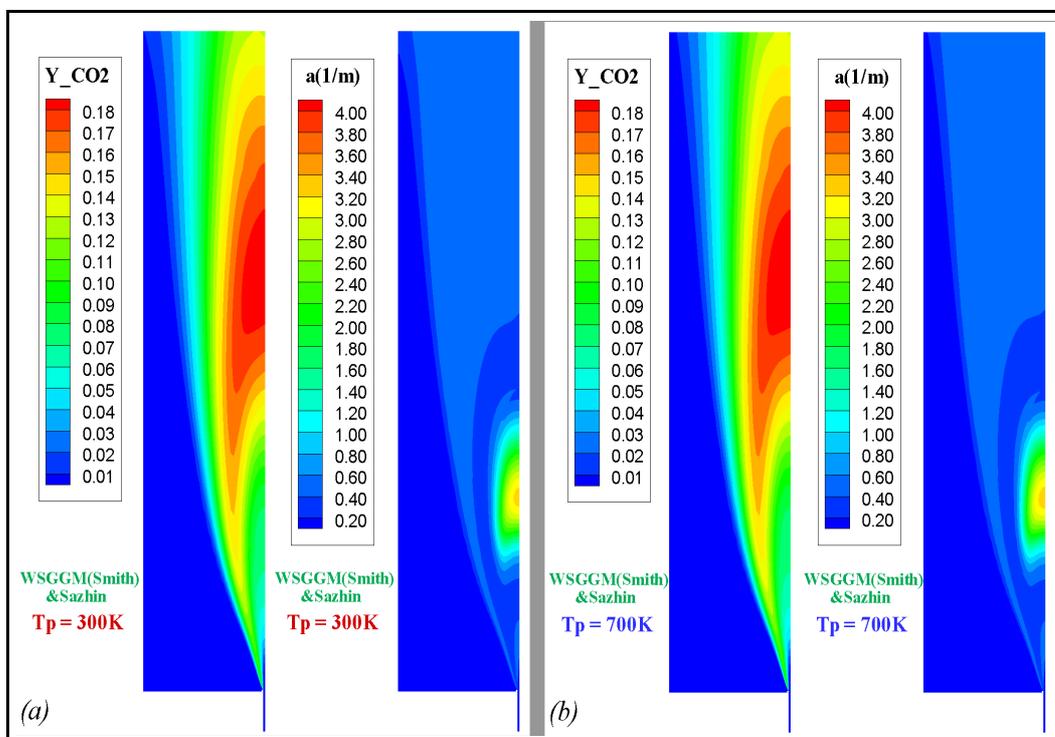


Figura 5.17: Campos de fração mássica de CO_2 e coeficiente de absorção obtidos da simulação usando o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para (a) $T_P = 300$ K, e, (b) $T_P = 700$ K.

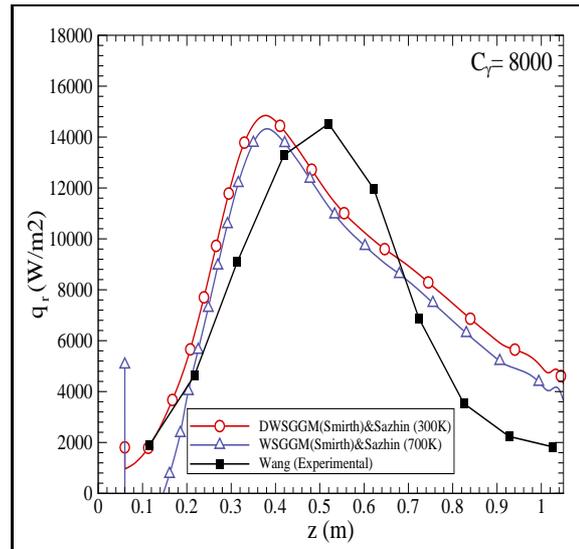


Figura 5.18: Fluxo de calor radiante na parede longitudinal do queimador de Endrud (2000) calculado com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para $T_P = 300$ e 700 K.

coeficiente de absorção global (ver Figura 5.17b e d), e a equação de transferência radiante cinza [Equação (3-69)], conclui-se que a distribuição espacial do campo da intensidade de radiação, dI/ds , a qual é diretamente proporcional ao divergente do campo da radiação incidente, ∇G , permanece constante se os campos de temperatura e coeficiente de absorção se mantêm inalterados. Desta forma é corroborada a invariância do campo de ∇G para os casos de T_P iguais a 300 e 700 K. Assim, a variação do valor de G é resultado apenas do aumento de temperatura imposto na parede e não das modificações das propriedades do escoamento, as quais permanecem praticamente inalteradas.

A Figura 5.18 mostra os perfis do fluxo de calor radiante ao longo da parede lateral do queimador, $q_{r,P}$, obtidos com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin para $T_P = 300$ e 700 K. Nesta figura, é possível verificar uma redução quase uniforme de $q_{r,P}$ na maior parte da região da parede. Porém, existe uma região da parede, localizada a montante de $z = 200$ mm, onde o valor de $q_{r,P}$ cai de maneira drástica, o que indica que ocorre uma transferência líquida de energia radiante que vai da parede para o escoamento, ou seja, a emissão prepondera sobre a absorção. Este resultado indica claramente que, pelo menos no início do queimador, $T_P = 700$ K não representa a temperatura real da parede.

Desta forma, um aumento da temperatura da parede longitudinal induz a uma redução do fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, conseqüentemente, a taxa de transferência de energia por radiação na parede longitudinal, $\dot{Q}_{r,P}$, é também reduzida. Um balanço térmico na parede longitudinal do queimador, mostrado

na Tabela 5.6 é realizado de forma a corroborar esta afirmação.

Tabela 5.6: Balanço térmico na parede longitudinal do queimador obtido com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, e para temperaturas da parede, T_P , de (a) 300 K, e, (b) 700 K. Estes resultados são comparado com aquele do experimento de Wang *et al.* (2002)

GRANDEZA	$T_P = 300\text{K}$	$T_P = 700\text{K}$	Exp.
Taxa de Transf. de Calor Total (W)	-95,3	-56,7	-
Taxa de Transf. de Calor por Radiação (W)	-88,1	-76,5	-72,4
Taxa de Transf. de Calor por Convecção (W)	-7,21	+19,79	-
Temp. Média na Saída do Queimador (K)	717,8	798	-

Note-se desta tabela, que o aumento de 300 para 700 K da temperatura da parede leva a uma redução de 14% da taxa de transferência de calor por radiação, $\dot{Q}_{r,P}$, como consequência do incremento da energia radiante transferida da parede para o escoamento. Nota-se, também, que o aumento da temperatura na parede longitudinal conduz a uma troca apreciável da energia térmica em direção ao escoamento (de sinal positivo) como resultado da convecção (difusão e advecção). Observa-se redução de até 40% da energia térmica total transferida pelo escoamento para a parede longitudinal do queimador, o que dá como resultado um incremento de aproximadamente 82 K da temperatura média na saída do queimador.

5.2.5

Influência dos Modelos que Acoplam a Radiação com a Fuligem

Nesta seção são discutidos os resultados de um estudo de sensibilidade aos modelos que calculam as propriedades radiantes da fuligem. Para isto, são considerados os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Note-se que, nos dois primeiros casos, emprega-se o modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas de Smith *et al.* (1982). Por outro lado, o Radcal determina, para cada volume de controle, o coeficiente de absorção espectral dos gases produtos da combustão e da fuligem, $a_\lambda = a_{\lambda,g} + a_{\lambda,soot}$. Um valor equivalente do coeficiente de absorção, $\bar{a}_{1-200} = a_E$, é calculado através da aplicação, pelo Radcal, da Equação (4-10). Isto tem por objetivo fornecer ao FluentTM esta propriedade para a resolução da equação de transporte da radiação cinza, g-RTE [Equação (3-69)]. Cabe ressaltar que a temperatura da parede foi mantida em 300 K para os três casos.

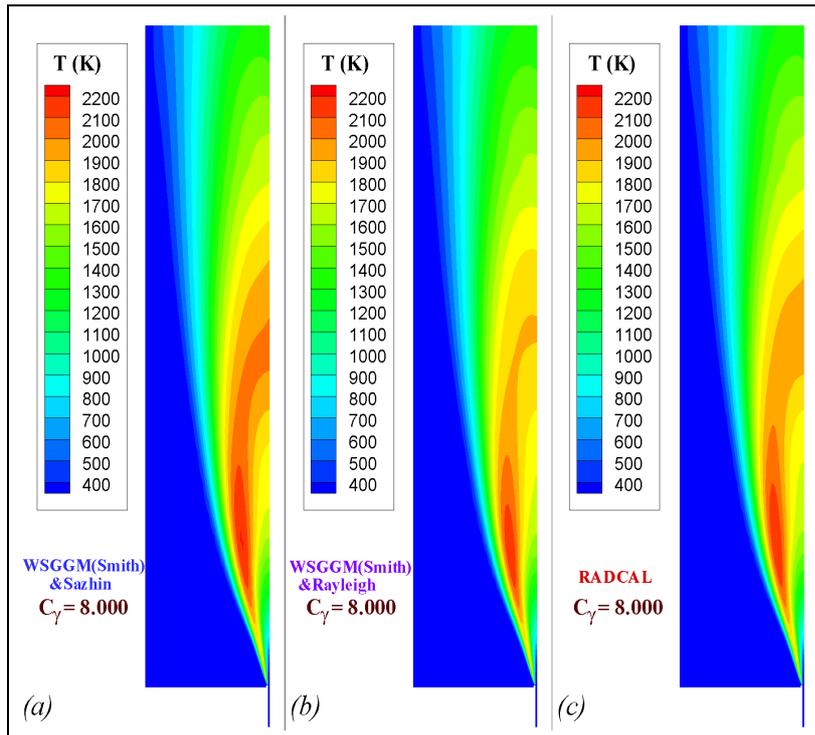


Figura 5.19: Campos de temperaturas do escoamento obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

Análise Energética

A Figura 5.19 apresenta os campos de temperatura obtidos da simulação do queimador de Endrud (2000) empregando-se os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Nota-se que o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh é aquele que fornece o campo de temperaturas mais uniforme, o que resulta em uma maior transferência de energia radiante por comparação com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal. Isto leva, também, a uma maior taxa de transferência de energia por radiação, $\dot{Q}_{r,P}$, tal como será discutido empregando-se a Tabela 5.7.

Na Tabela 5.7 a comparação da taxa de transferência de energia total, $\dot{Q}_{T,P}$, e por radiação, $\dot{Q}_{r,P}$, do escoamento para a parede do queimador utilizando-se os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Nesta tabela, é possível verificar que o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh leva a taxas de transferência de energia por radiação, $\dot{Q}_{r,P}$, 7% maiores do que as fornecidas pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal. Embora estes dois últimos modelos apresentem taxas de transferência de energia idênticas e inferiores aos previstos pelo modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh, os valores são 22% superiores àqueles observados no experimento de Wang *et al.* (2002). Note-se que, a adoção si-

Tabela 5.7: Taxas de transferência de energia sensível na parede longitudinal e temperatura média na saída do Queimador de Endrud (2000) obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

Propriedade	WSGGM&Sazhin	WSGGM&Rayleigh	Radcal	Experim.
$\dot{Q}_{T,P}$ (W)	-95,3	-101.1	-96,0	-
$\dot{Q}_{r,P}$ (W)	-88,1	-94.8	-88,6	-72,36
\tilde{T}_{saida} (K)	717	708	718	-

multânea de $T_P = 400$ K e $\epsilon_P \approx 0,9$ levaria a resultados numéricos de $\dot{Q}_{r,P}$ próximos da experimentação.

Uma vez que a radiação térmica corresponde a 90% da transferência de energia total sensível que o escoamento fornece para a parede, a Tabela 5.7 evidencia que a taxa de transferência de energia total sensível, $\dot{Q}_{T,P}$, obtida com o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh é apenas 6% maior do que as apresentadas pelos modelos WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Como consequência, ocorre uma diminuição da temperatura média na saída dos gases de combustão de 10 K.

Tabela 5.8: Propriedades máximas do escoamento obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

PROPRIEDADE	WSGGM&Sazhin	WSGGM&Rayleigh	Radcal
T_{max} (K)	2.203	2.182	2.188
G_{max} (W/m ²)	724.000	762.000	802.000
$Y_{CO_2,max}$	0,187	0,188	0,188
a_{max} (1/m)	3,27	5.42	4,32
$f_{V,max}$ (ppm)	1,41	1,84	1,27

Por outro lado, é de se notar que os modelos WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal fornecem resultados de taxas de transferência de energia (radiante e total) que variam apenas 2,5%, o que leva a variações insignificantes da temperatura média na saída do queimador.

Nota-se também, da Tabela 5.8, que as variações das temperaturas máximas obtidas com os três modelos não ultrapassam 21 K. Desta forma, pode-se afirmar, em função dos resultados apresentados, que os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal conduzem a campos de temperatura que são similares e, conseqüentemente, a uma equivalência nos resultados do calor total sensível que é cedida pelo escoamento para a parede, pois variações de $\dot{Q}_{T,P}$ não superam 6%.

Os campos da radiação incidente, G , calculados pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal são apresen-

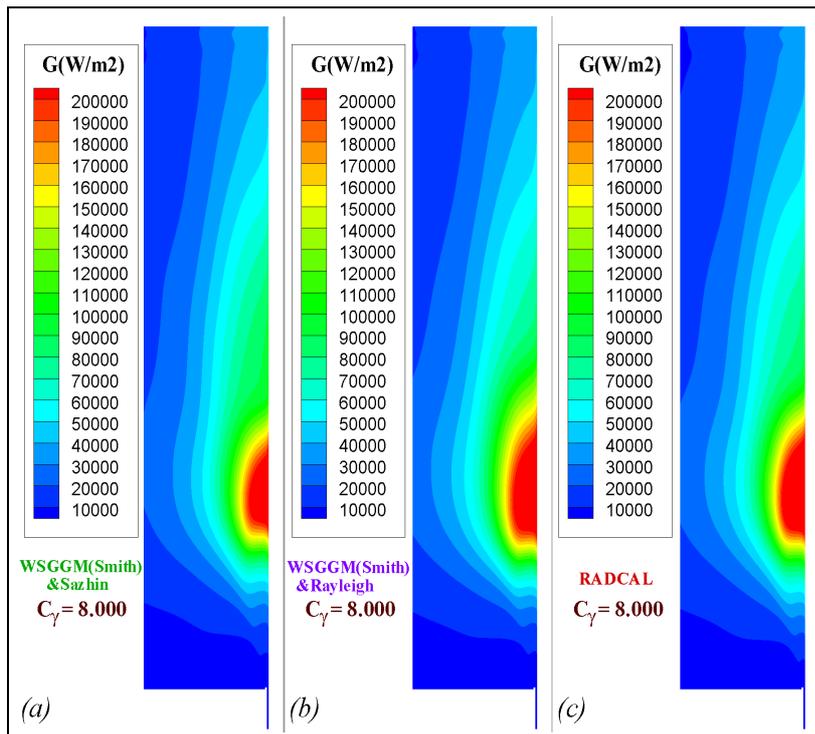


Figura 5.20: Radiação incidente do escoamento obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

tados na Figura 5.20. Percebe-se que o campo da radiação incidente resultante do emprego do modelos WSGGM(Smith)&Rayleigh (Figura 4.18b) exibe valores maiores do que os oriundos do modelo Radcal, que por sua vez, é maior do que o obtido com emprego do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Assim, o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh é aquele que apresenta a maior propagação da energia radiante do escoamento e que incide sobre a parede do queimador. Portanto, para um dado valor de T_P e ϵ_P , o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh conduz a uma maior taxa de transferência de calor por radiação. Este incremento de $\dot{Q}_{r,P}$ corrobora os dados da Tabela 5.7. Por outro lado, o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin fornece uma região de $G > 200 \text{ kW/m}^2$ que é ligeiramente menor do que o modelo Radcal, levando a uma taxa de transferência de calor por radiação que é reduzida de apenas 0,6%

Análise Termoquímica

A Figura 5.21 mostra os contornos da fração mássica do dióxido de carbono resultante do uso dos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Observa-se, nos três casos, uma grande similitude da distribuição de Y_{CO_2} em todo o domínio. Cabe ressaltar que resultados similares também foram obtidos nos campos de fração mássica do vapor de água e dos reagentes (propano e oxigênio), não sendo mostrados por

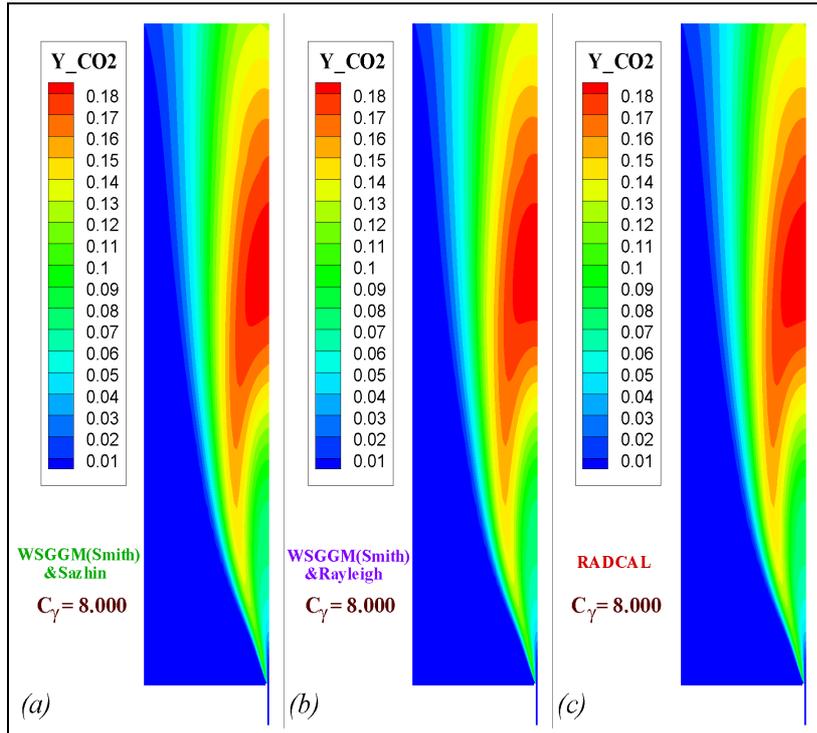


Figura 5.21: Fração mássica de dióxido de carbono obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

questões de brevidade. Estes resultados enfatizam a pequena influência dos modelos escolhidos na previsão das propriedades radiantes da fuligem sobre as espécies químicas majoritárias que participam da combustão turbulenta.

Os campos da fração volumétrica da fuligem, f_V , e do coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$, obtidos dos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal, são apresentados nas Figuras 5.22 e 5.23. Partindo-se, como ponto de referência, do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, a aplicação do WSGGM(Smith)&Rayleigh resulta na maior extensão da distribuição da fuligem. Como poderia ser esperado das Equações (3-114) e (D-5), este incremento da extensão se reflete nos campos do coeficiente de absorção, já que os valores de a do modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh são distribuídos em maior extensão do que os do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin.

Um comportamento contrário é observado no caso do modelo Radcal, que conduz a valores de f_V que são ligeiramente menores do que os preditos pelo modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Não obstante, o modelo Radcal prevê valores de a que são maiores do que obtidos com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin.

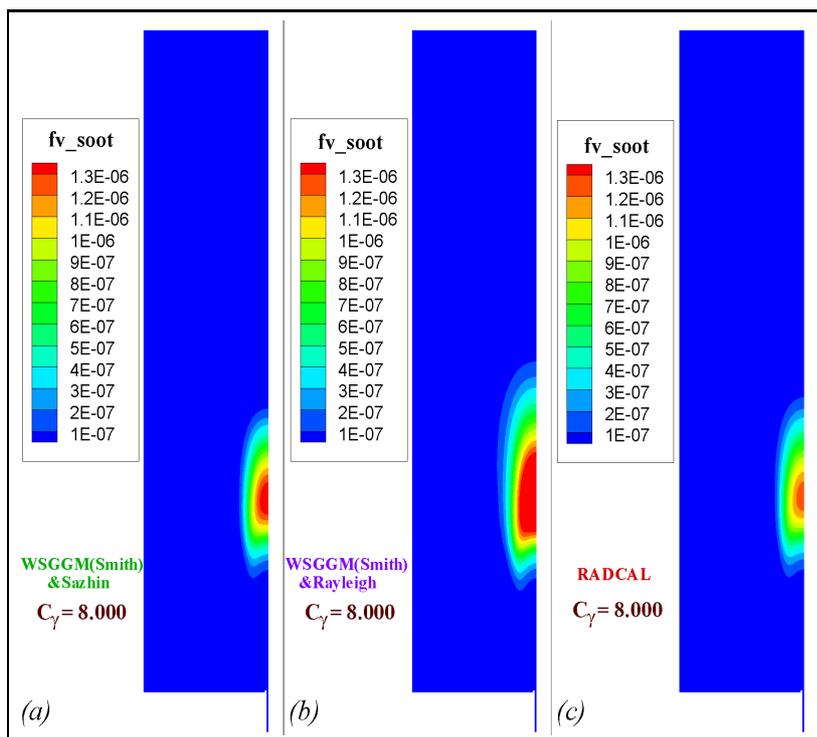


Figura 5.22: Fração volumétrica de fuligem obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

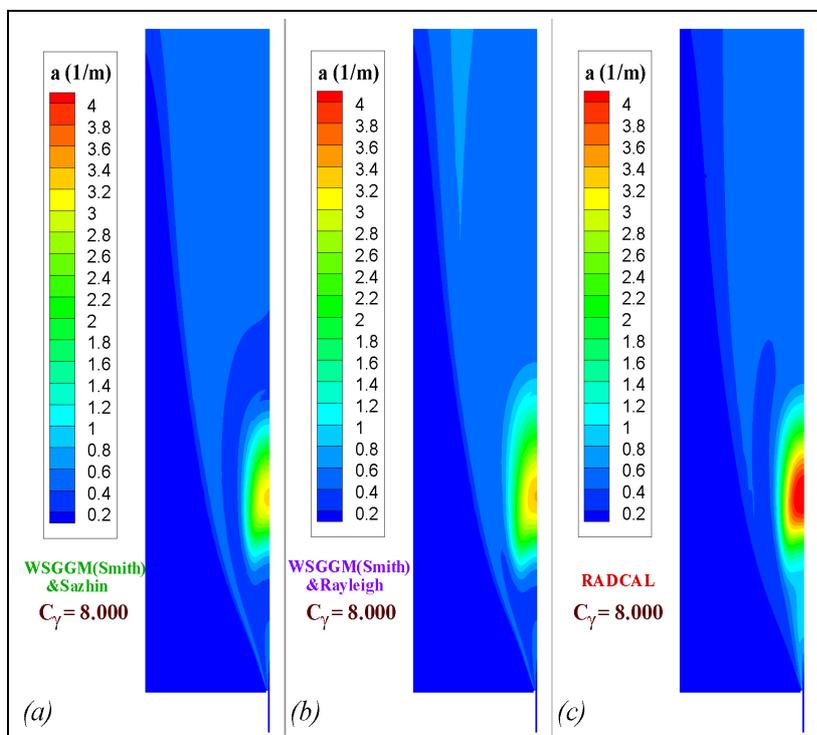


Figura 5.23: Coeficiente de absorção global obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, (b) WSGGM(Smith)&Rayleigh, e, (c) Radcal.

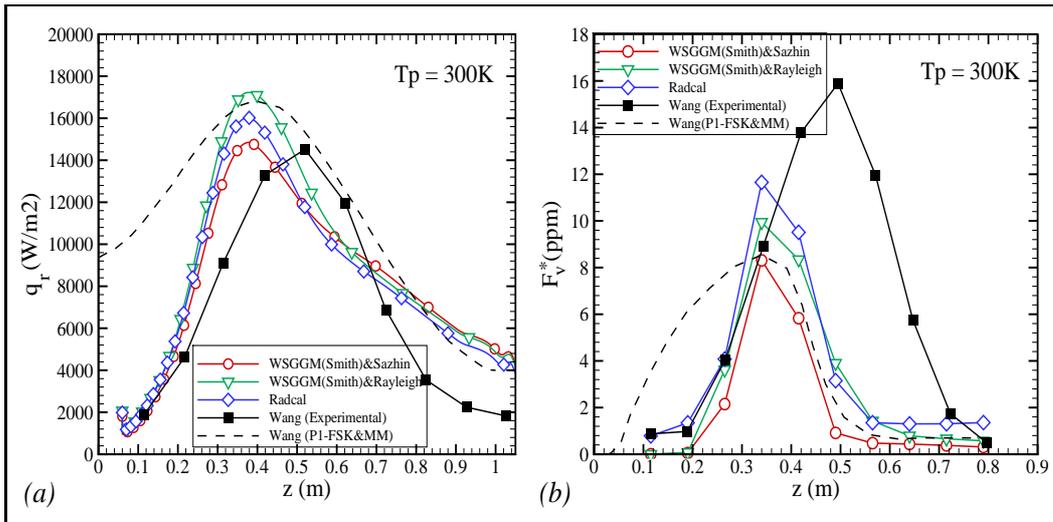


Figura 5.24: Comparação com resultados experimentais e numéricas de Wang *et al.* (2005) ao longo do queimador de Endrud (2000) dos resultados obtidos com modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal, no que diz respeito (a) ao fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, e (b) à fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* .

Análise Integral

A Figura 5.24 apresenta as comparações, com resultados numéricos e experimentais de Wang *et al.* (2005), do fluxo de calor radiante ao longo da parede longitudinal, $q_{r,P}$, e da fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , obtidos com os três modelos aqui considerados. No que diz respeito ao fluxo de calor radiante, observa-se da Figura 5.24a uma melhor concordância dos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal, em contraposição aos resultados numéricos P1-FSK–MM de Wang *et al.* (2005), quando comparados aos resultados experimentais obtidos por Wang *et al.* (2005).

Tal como foi discutido acima, os resultados obtidos com o modelo de WSGGM(Smith)&Sazhin, exibem uma boa concordância com as medidas de Wang *et al.* (2005), no que diz respeito ao valor máximo de $q_{r,P}$. Entretanto, o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh superestima este valor máximo medido em aproximadamente 20%, o que é coerente com os resultados de elevadas concentrações de fuligem (ver Figura 5.22) e do campo de coeficiente de absorção global do modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh (ver Figura 5.23).

Por outro lado, o modelo Radcal apresenta uma distribuição de $q_{r,P}$ que é apenas 12% superior àquela exibida pelos experimentos de Wang *et al.* (2005). Tal como visto na Figura 5.23 isto está associado a valores de a que são maiores (mas não mais extensos) do que os demais. Deve ser ressaltado que o acoplamento da radiação com a fuligem, mediante o uso do modelo

Radcal, fornece um campo de fração volumétrica, f_V , cujos valores são os menores dentre os obtidos. Cabe lembrar que o valor de $q_{r,P}$ resultante do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin é aquele que fornece as melhores estimativas desta medida, devido ao ajuste de C_γ para 8.000 kg-m/kmol-s, feito de forma a manter o escoamento com níveis de $q_{r,P}$ similares aos observados nos experimentos de Wang *et al.* (2005).

No que diz respeito à evolução da fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , a comparação dos resultados da simulação com os experimentais mostra que todos os modelos considerados neste trabalho apresentam melhores estimativas de F_V^* do que os do modelo P1-FSK-MM de Wang *et al.* (2005). Além disso, percebe-se que todos os modelos conseguem reproduzir o gradiente de formação e oxidação da fuligem. O modelo Radcal é aquele que melhor representa a formação da fuligem analisada desta perspectiva integral, pois reproduz com maior exatidão o valor máximo de F_V^* , o qual é apenas 25% inferior aos obtidos nos experimentos de Wang *et al.* (2005). O valor máximo de F_V^* predito pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e WSGGM(Smith)&Rayleigh são respectivamente, 50 e 67% dos valores máximos experimentais.

Apesar do modelo Radcal fornecer a melhor distribuição de F_V^* (ver Figura 5.24), este modelo apresenta o menor campo de f_v . Esta incongruência origina-se do cálculo, ao longo do queimador, da fração volumétrica da fuligem equivalente, F_V^* , cujos valores são diretamente relacionados ao campo do coeficiente de absorção global da fuligem, a_{soot} . Assim, para mesmo um campo de f_v , o campo de a_{soot} resultante da simulação depende da escolha do modelo que acopla a radiação com a fuligem [WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh ou Radcal].

Note-se que, para os três modelos aqui considerados [sejam estes, WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh, Radcal], o aparecimento da fuligem é iniciado na região onde ocorrem concentrações máximas de acetileno, principal precursor na formação da fuligem. Tal como foi verificado para o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin (ver Figura 5.8), a competição entre a fuligem que é formada e seu precursor, que é consumido, determina a região do escoamento na qual encontram-se elevadas concentrações de fuligem e o consumo completo do acetileno. Desta forma, infere-se, para os três modelos, a forte influência que exercem a concentração de acetileno na formação da fuligem. Uma vez que o C_2H_2 resulta do processo de combustão, os valores de F_V^* estimados pelos modelos de propriedades radiantes da fuligem se encontram diretamente relacionados ao modelo de combustão, em particular, do esquema cinético químico escolhido. Infelizmente os resultados experimentais disponíveis do queimador de Endrud (2000) não permitem a validar, ex-

austivamente, o modelo de elementos de chama não adiabático, utilizado nas simulações. Para isto seria necessário dispor, também, de medidas de espécies químicas relevantes para formação de fuligem, tais como acetileno, os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos e a hidroxila.

5.2.6

Influência dos Modelos de Propriedades Radiantes dos Gases Produtos da Combustão

Discute-se nesta seção a influência sobre as propriedades do escoamento que exerce do modelo de transporte de propriedades radiantes de gases produtos da combustão (CO_2 e H_2O). São empregados o modelo Radcal e dois modelos de tipo Soma Ponderada dos Gases Cinzas, (i) de Smith *et al.* (1982) [WSGGM(Smith)] e (ii) de Mossi (2011), [WSGGM(Mossi)] para calcular o coeficiente de absorção dos gases produtos da combustão, a_g . Cabe ressaltar que, para o modelo WSSM(Mossi), foi necessária a implementação de uma rotina via UDF do FluentTM, que se encontra disponível no Anexo C. Note-se que, por simplicidade, não foram considerados modelos de formação/oxidação da fuligem, portanto $a_{soot} = 0$. Assim, não pode ser esperado um bom acordo com os resultados experimentais.

Os campos de temperatura obtidos da simulação do queimador de Endrud (2000) mediante o emprego dos modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal são apresentados na Figura 5.25. Nesta figura é possível perceber pequenas discrepâncias de T na região central do escoamento, em particular, onde as temperaturas são as mais elevadas, isto é, acima de 2.000 K. O modelo WSGGM(Sazhin) prevê uma temperatura máxima de 2.286 K, já as temperaturas máximas do escoamento correspondentes aos modelos WSGGM(Mossi) e Radcal são reduzidas para 2.229 e 2.254 K, respectivamente.

Como pode ser visto na Figura 5.26, esta redução da temperatura encontra-se correlacionada com os resultados obtidos do coeficiente de absorção global dos gases produtos da combustão, $a = a_g$. De fato, na região vizinha à entrada de combustível, os modelos WSGGM(Mossi) e Radcal apresentam uma similitude no campo de $a = a_g$ cujo valor é da ordem de $0,9 \text{ m}^{-1}$. Já o modelo WSGGM(Smith) apresenta, nesta região, um campo de coeficiente de absorção global inferior a $0,6 \text{ m}^{-1}$.

Esta discrepância do coeficiente de absorção global pode ser explicada à luz da razão de pressões parciais de H_2O e CO_2 , mostrada na Figura 5.26, parâmetro que controla a escolha dos coeficientes do modelo (ver Seção 3.3.5) Nesta figura verifica-se que o coeficiente de absorção global dos gases obtido pelos modelos WSGGM(Smith) e WSGGM(Mossi) exibem dis-

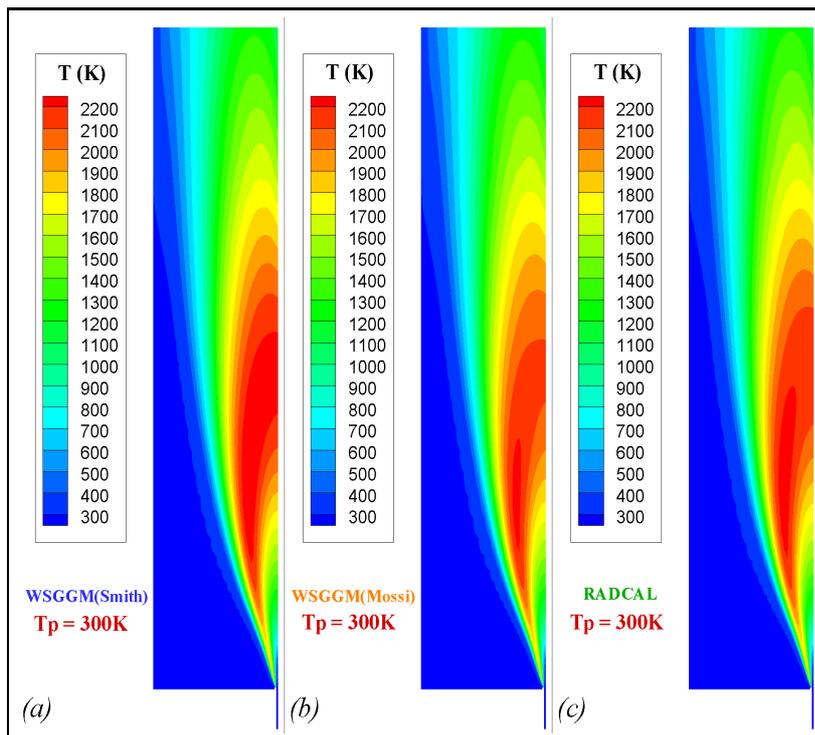


Figura 5.25: Campos de temperatura do escoamento, T , obtidos com os modelos (a) WSGGM de Smith *et al.* (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.

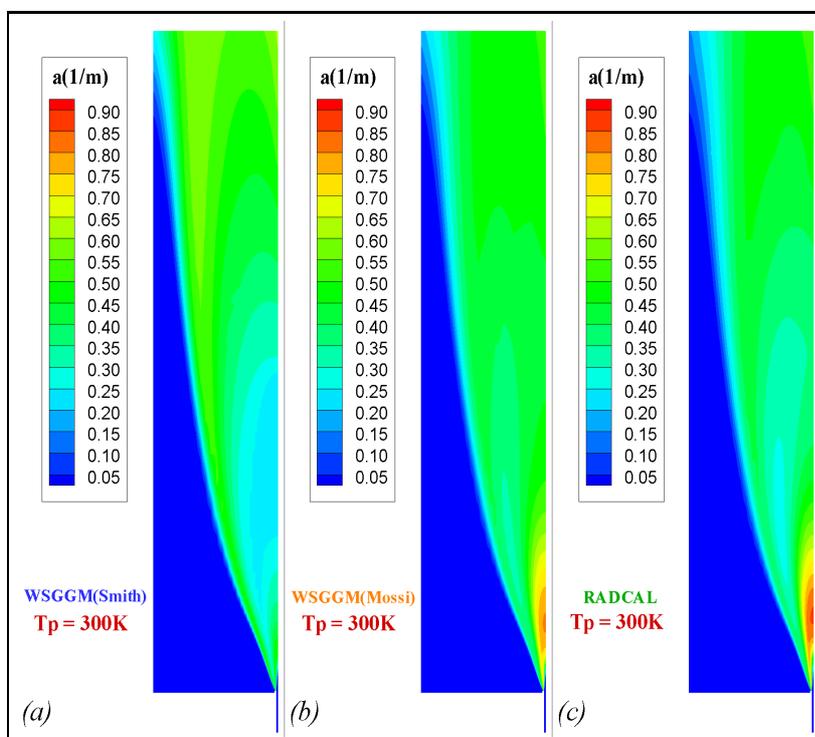


Figura 5.26: Coeficiente de absorção dos gases produtos da combustão, a_g , obtido com os modelos (a) WSGGM de Smith *et al.* (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.

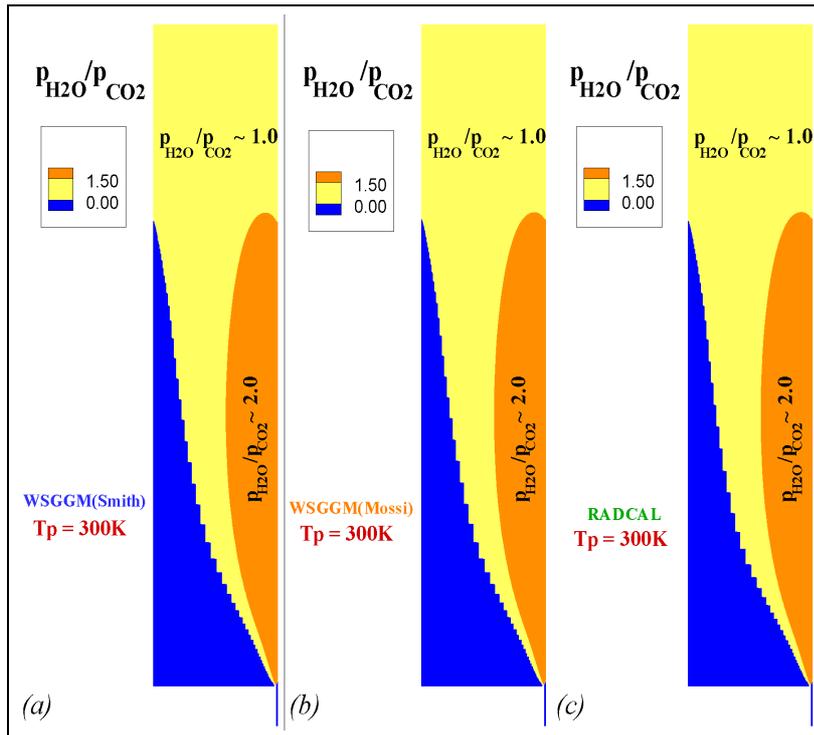


Figura 5.27: Razão das pressões parciais, p_{H_2O}/p_{CO_2} obtidos com o modelo elementos de chama não adiabático acoplado com os modelos ordenadas discretas e (a) WSGGM de Smith *et al.* (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.

crepâncias apreciáveis na região onde a razão p_{H_2O}/p_{CO_2} é maior do que $3/2$. Abaixo desse valor ambos modelos fornecem, praticamente, os mesmos resultados. Ora, quando $p_{H_2O}/p_{CO_2} < 3/2$, os valores dos coeficientes polinomiais e de absorção de gás cinza empregados por ambos modelos são semelhantes, tal como pode ser visto nas tabelas 3.2 e 3.3. No entanto, diferenças apreciáveis destes coeficientes polinomiais ocorrem para $p_{H_2O}/p_{CO_2} \approx 2$, o que explica as discrepâncias observadas no campo de a_g .

A Figura 5.28 mostra os campos da radiação incidente, G , calculados pelos modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal. Observa-se nesta figura uma grande semelhança dos valores de G obtidos com os três modelos em quase todo o domínio. Os resultados dos modelos WSGGM(Mossi) e Radcal, quando comparados com o modelo WSGGM(Smith), mostram um pequeno incremento de G na região próxima à entrada do combustível. Isto é consequência de um maior valor de a_g nesta região.

A fração mássica do vapor de água obtida com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal é apresentada na Figura 5.29. Uma vez mais, o valor de Y_{H_2O} não é influenciado pela escolha dos modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão. Cabe ressaltar que

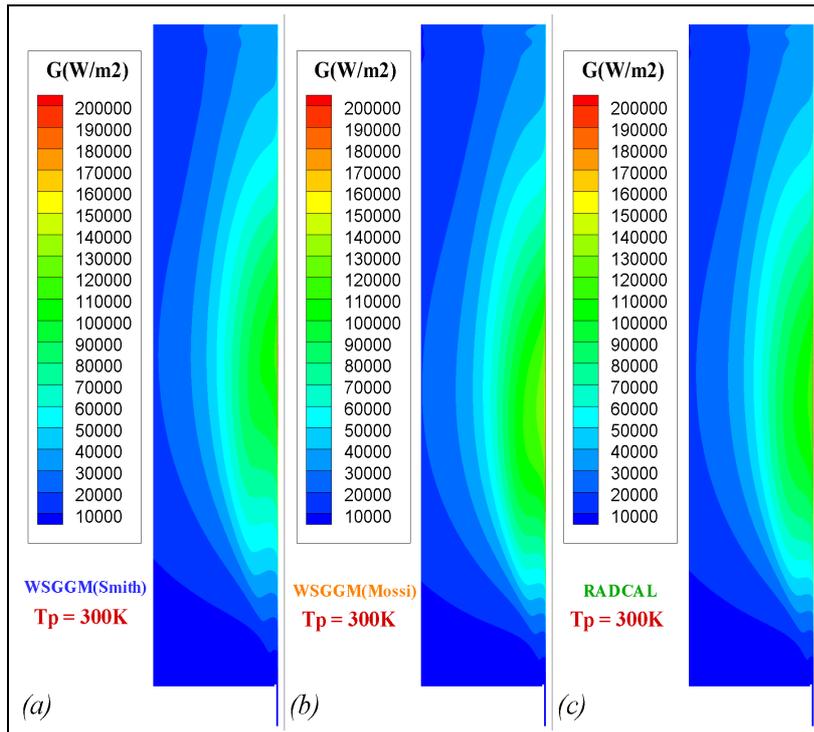


Figura 5.28: Radiação incidente, G , obtida com os modelos (a) WSGGM de Smith *et al.* (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.

este comportamento foi observado para o dióxido de carbono (não mostrado aqui), e para as demais espécies químicas majoritárias. Pode ser concluído que as frações mássicas das espécies majoritárias do escoamento não são significativamente modificadas pelo emprego dos diferentes modelos de propriedades radiantes dos gases produtos da combustão. Esta conclusão também é válida para os modelos que levam em conta as propriedades radiantes da fuligem (Sazhin, Rayleigh, Mossi).

Finalmente, a Figura 5.30 apresenta a comparação com os dados experimentais de Wang *et al.* (2005) do fluxo de calor radiante ao longo do queimador de Endrud (2000), $q_{r,P}$, obtidos da simulação com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal. Tomando-se como referência os resultados experimentais e aqueles obtidos do modelo padrão do FluentTM [modelo WSGGM(Smith)], percebe-se que os resultados de $q_{r,P}$ obtidos com o modelo Radcal apresentam uma distribuição similar àquela do modelo WSGGM(Smith). Apenas um deslocamento de 40 mm é observado na posição do valor máximo de $q_{r,P}$ fornecido pelo modelo Radcal, quando comparado com o do modelo WSGGM(Smith).

Por outra parte, o modelo WSGGM(Mossi) apresenta um melhor acordo com os dados experimentais de Wang *et al.* (2005). Porém, cabe lembrar que nos experimentos há presença da fuligem enquanto que os modelos de radiação

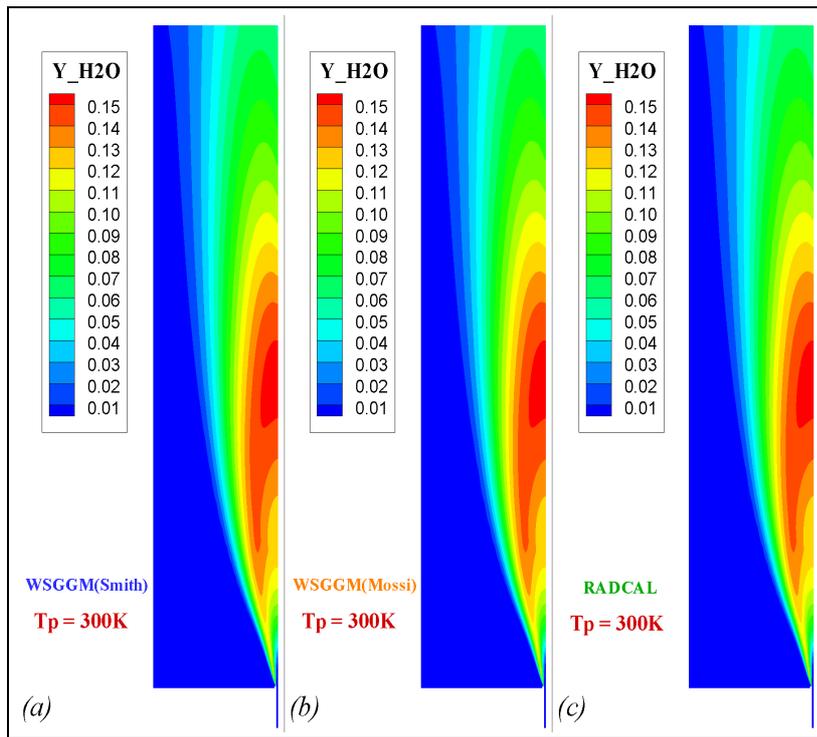


Figura 5.29: Fração mássica de vapor de água, Y_{H_2O} , obtida com os modelos (a) WSGGM de Smith *et al.* (1982) (b) WSGGM de Mossi (2011) e (c) Radcal.

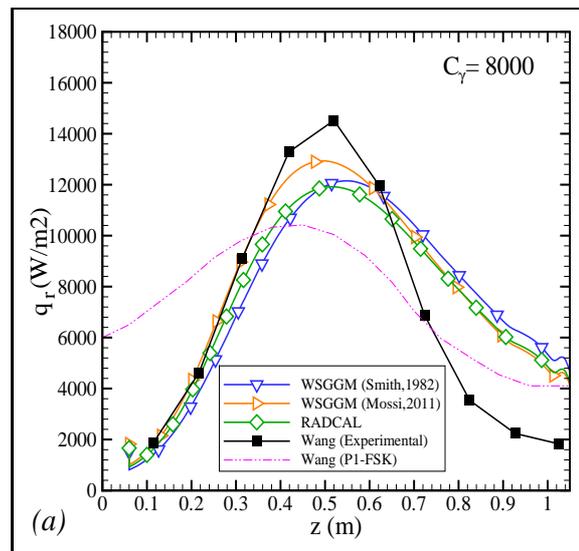


Figura 5.30: Fluxo de calor radiante ao longo da parede longitudinal do queimador, $q_{r,P}$, calculados com os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal. Comparação com dados experimentais de Wang *et al.* (2005).

utilizados nesta seção levam em conta apenas o transporte da radiação dos gases produtos da combustão. Assim, a inclusão ao modelo Mossi dos modelos que levem conta a radiação da fuligem i.e., modelo Sazhin (1994) ou Rayleigh, levaria, possivelmente, a uma superestimação de $q_{r,P}$ na região próxima à de formação de fuligem.

5.2.7

Influência do Parâmetro de Escalonamento da Oxidação do Modelo de Moss Brookes

Nesta seção é estudada a influência sobre a formação da fuligem e demais propriedades termoquímicas e de radiação que exerce a variação do parâmetro de escalonamento da oxidação da fuligem, C_{oxid} , do Modelo de Moss Brookes [Equação (3-58)]. Para isto, os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal foram empregados para a descrição das propriedades radiantes dos gases produtos da combustão e da fuligem. São adotados dois valores de $C_{oxid} = 0,8$ (valor original) e $C_{oxid} = 0,4$ (valor modificado). Espera-se, assim, retardar a oxidação da fuligem e melhorar o acordo com os resultados experimentais na região de $z > 0,4$ m.

A Figura 5.31 mostra os campos da fração volumétrica da fuligem, f_V , obtidos pelos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal para os casos em que C_{oxid} é igual a 0,8 e 0,4. Note-se, para ambos modelos, que a redução do valor desta constante leva a um incremento da extensão longitudinal e transversal de f_V . Isto é devido à redução da taxa de oxidação da fuligem, $(dM/dt)_{oxidation}$ [Equação (3-58)], para a metade do seu valor original. A consequência é uma maior produção de fuligem, acompanhada de um consumo mais lento por oxidação. Quando $C_{oxid} = 0,8$ o Radcal prevê uma concentração da fuligem menor do que o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. A redução de C_{oxid} de 0,8 para 0,4 leva a um maior incremento de f_V para o modelo Radcal do que do modelo WSGGM(Smith)&Sazhin.

Uma vez que o coeficiente de absorção global é diretamente proporcional à concentração da fuligem [Equação (3-52)], o aumento de f_V conduz a um incremento do coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$. Assim, a Figura 5.32 permite verificar que ambos modelos respondem com um incremento de a quando C_{oxid} é reduzido de 0,8 para 0,4. Note-se que, para $C_{oxid} = 0,4$ o acoplamento do modelo Radcal com o modelo de Moss Brookes prevê valores de coeficiente de absorção global que são maiores do que os associados ao modelo Moss Brookes acoplado com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin. Isto é consequência do maior valor de f_V calculado.

A Figura 5.33 apresenta a radiação incidente obtidas pelos modelos

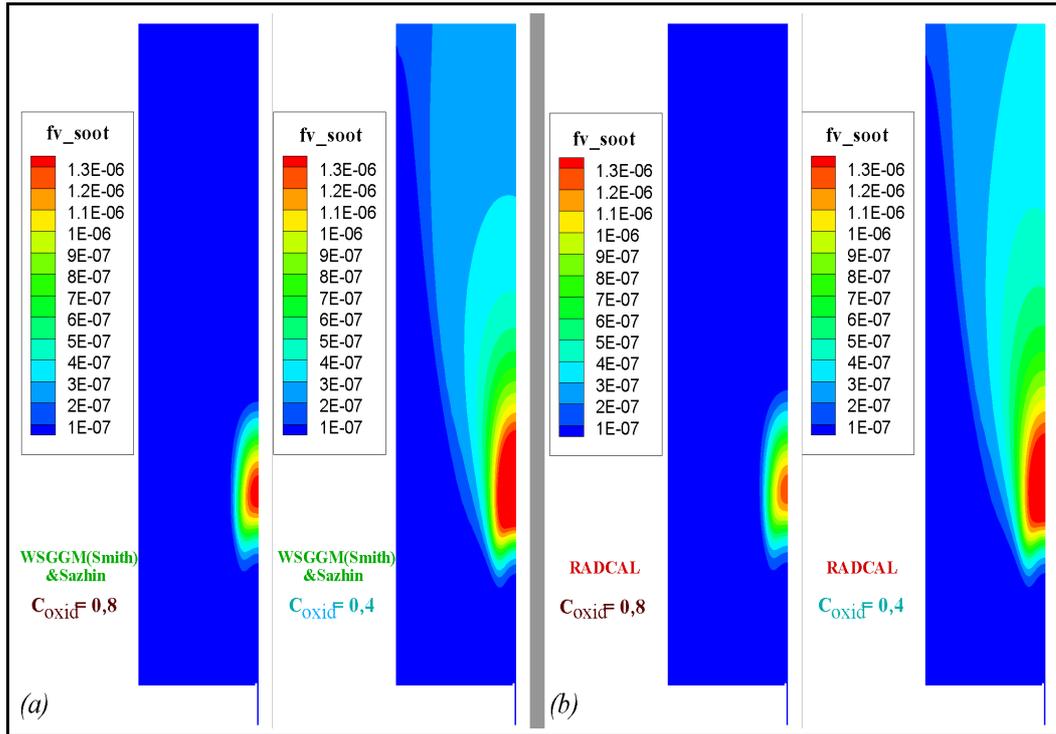


Figura 5.31: Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de fração volumétrica de fuligem obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin e (b) Radcal.

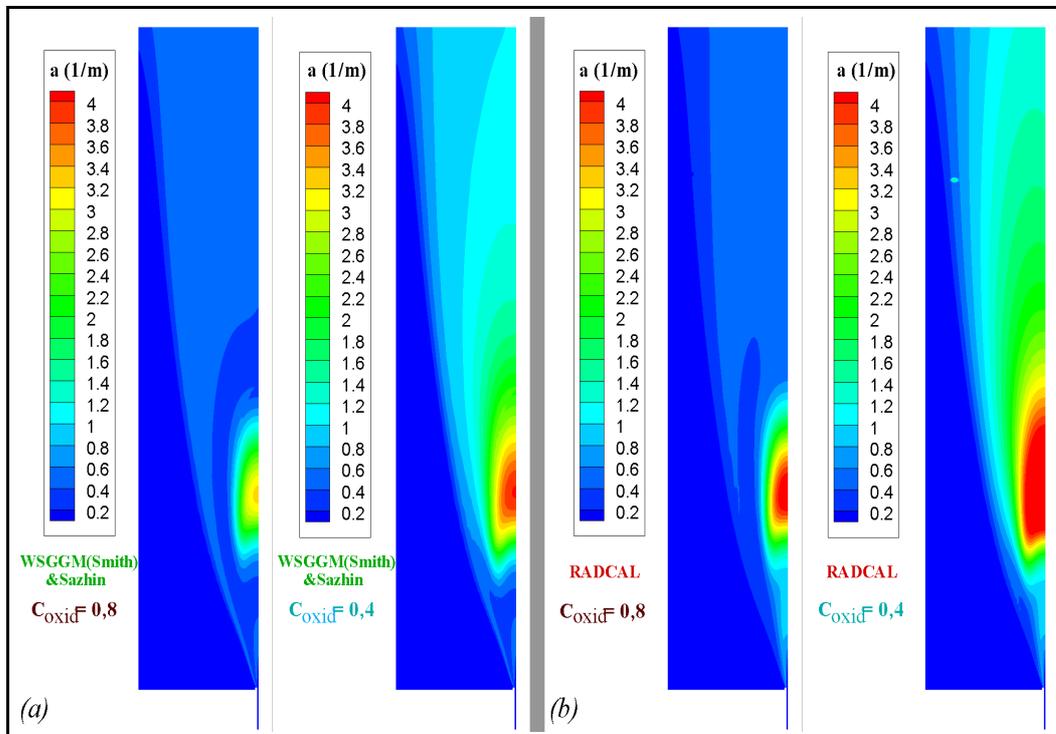


Figura 5.32: Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de coeficiente de absorção global obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin e (b) Radcal.

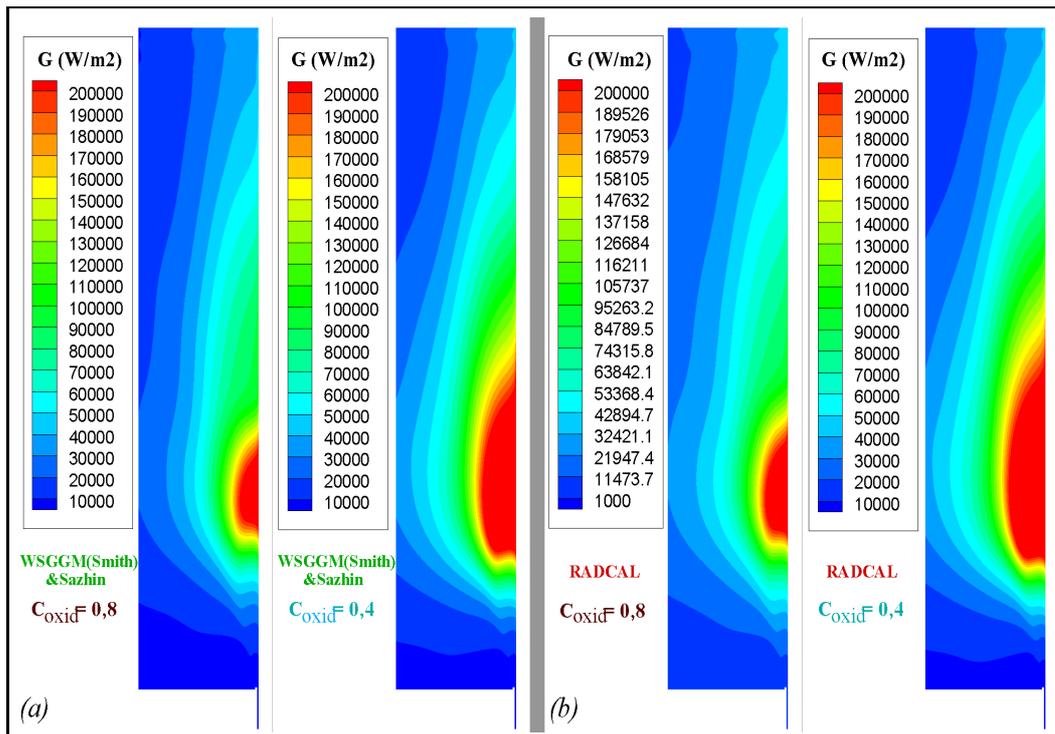


Figura 5.33: Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de radiação incidente obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, e, (b) Radcal.

WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal para valores de C_{oxid} iguais a 0,8 e 0,4. Note-se, para ambos modelos, que uma redução de C_{oxid} acarreta um incremento na radiação incidente, G , sendo que o valor máximo é incrementado em aproximadamente 30%, tal como poderia ser esperado. De fato, G é ligado ao coeficiente de absorção global, que por sua vez é diretamente proporcional à concentração da fuligem, cujos valores aumentam com a redução de C_{oxid} .

A Figura 5.34 apresenta os campos de temperatura obtidos com os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal para os dois valores de C_{oxid} empregados. Para ambos modelos, obtém-se uma maior uniformidade no campo de temperatura quando o valor de C_{oxid} é reduzido para 0,4, o que resulta em uma redução de apenas 3% a temperatura máxima, T_{max} . Ademais, esta uniformidade vem acompanhada da redução em extensão da região de temperatura acima de 1.600 K, consequência de um maior fluxo de calor radiante do meio para a parede do queimador.

A Figura 5.35 mostra que, embora a temperatura do meio tenha sido reduzida quando da redução de C_{oxid} , a fração mássica do dióxido de carbono, Y_{CO_2} , é pouco afetada. Todas as espécies químicas majoritárias apresentam o mesmo comportamento. Isto evidencia, mais uma vez, a pouca influência que exercem a radiação e a formação da fuligem sobre as propriedades químicas do

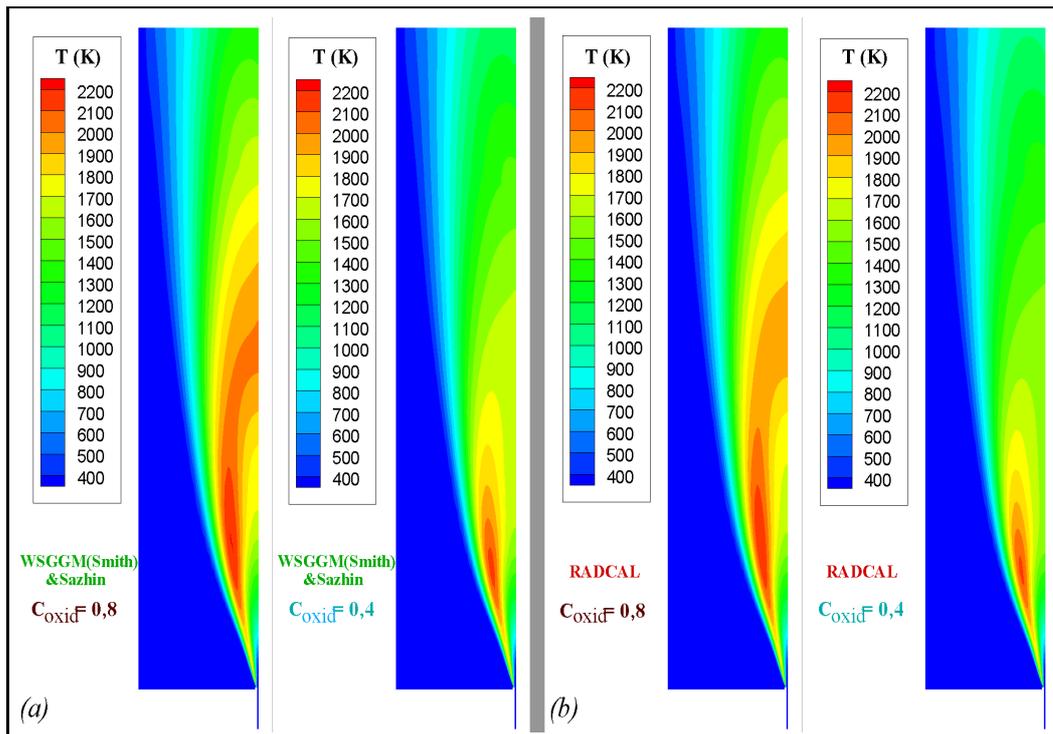


Figura 5.34: Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de temperatura obtidos com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, e, (b) Radcal.

escoamento.

Finalmente, a Figura 5.36 apresenta o fluxo de calor radiante ao longo da parede do queimador, $q_{r,P}$, e a fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , quando são empregados os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal para parâmetros de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , iguais a 0,8 e 0,4. Note-se, da Figura 5.32a, que esta redução de 50% de C_{oxid} conduz a um aumento médio de $q_{r,P}$ de aproximadamente 60% para os modelos de Moss Brookes e WSGGM(Smith)&Sazhin. Quando os modelos Radcal e Moss-Brookes são utilizados, esta redução de C_{oxid} acarreta a um incremento de aproximadamente 65% no fluxo de calor radiante ao longo da parede do queimador. Fica evidente que estes incrementos levam a superestimação dos resultados experimentais de Wang *et al.* (2005).

A Figura 5.36b mostra, para os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal, que a adoção de $C_{oxid} = 0,4$ leva a valores de fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* , maiores do que os obtidos com $C_{oxid} = 0,8$. Em particular percebe-se que, para ambos modelos, um incremento dos valores máximos de F_V^* de aproximadamente 70% com a redução de C_{oxid} para 0,4. Além disso, percebe-se que, para $C_{oxid} = 0,4$, o acoplamento do modelo Moss Brookes com o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin leva a valores de F_V^* que

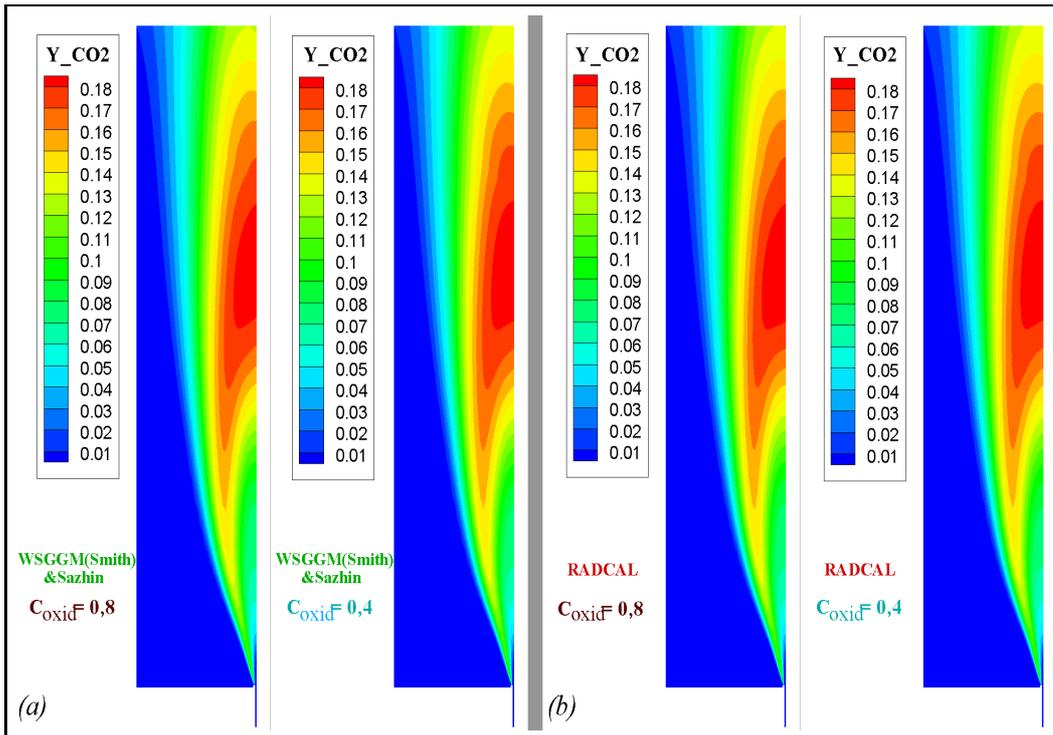


Figura 5.35: Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. Campos de fração mássica do dióxido de carbono obtidos da simulação com os modelos (a) WSGGM(Smith)&Sazhin, e, (b) Radcal.

são comparáveis com aqueles obtidos dos experimentos de Wang *et al.* (2005), porém, esta redução de C_{oxid} não reproduz corretamente as taxas de formação nem de oxidação da fuligem.

Um comportamento análogo nas taxas de formação e oxidação da fuligem é evidenciado para o caso em que o modelo Radcal é empregado, não obstante, a adoção de $C_{oxid} = 0,4$ leva a uma superestimação de aproximadamente 25% do valor máximo de F_V^* , quando comparado com o máximo obtido por Wang *et al.* (2005) em seu experimento.

Desta forma, fica evidente que a adoção de C_{oxid} para 0,4 não permite reproduzir corretamente o fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, nem a fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* . Acredita-se que um estudo paramétrico dos valores de C_γ e C_{oxid} poderia conduzir a uma melhor aproximação dos valores experimentais de $q_{r,P}$ e F_V^* .

Entretanto, mais do que este estudo de otimização, parece ser indispensável (i) utilizar um modelo de cinética química da combustão do propano que contemple a formação de C_6H_6 , importante precursor de fuligem e (ii) Utilizar modelo de formação de fuligem mais abrangente do que o de três etapas de Moss-Brookes. Modelos de cinética química que contemplam a formação

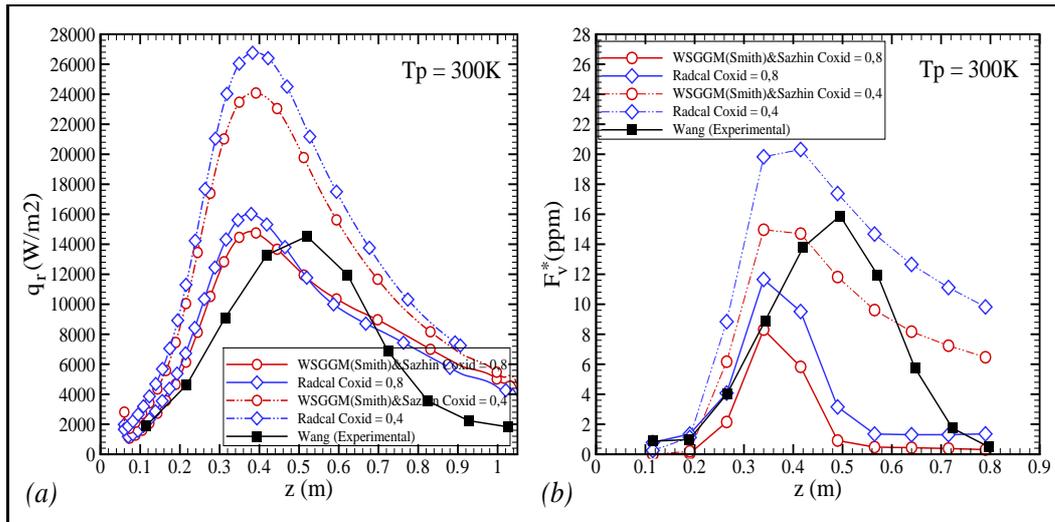


Figura 5.36: Influência do parâmetro de escalonamento de oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes. (a) Fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, e (b) fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* .

de C_6H_6 existem, entretanto, o grande número de espécies químicas envolvidas não permitem, ainda, seu uso com o FluentTM, devido às limitações deste software.