

7

Conclusões e Recomendações

Neste trabalho, estudou-se a influência que exercem o emprego de diversos modelos de propriedades radiantes dos produtos da combustão e da fuligem sobre o transporte da energia radiante e a termoquímica do escoamento. Este estudo paramétrico exaustivo constitui a principal contribuição original do trabalho. Para isto, foram consideradas situações que permitem verificar e avaliar a capacidade preditiva destes modelos quando utilizado em sistemas térmicos homogêneos e não homogêneos. Em particular, foram estudados processos de combustão turbulenta não pré-misturada de combustíveis líquidos e gasosos.

No caso do estudo dos modelos de propriedades radiantes, empregou-se um sistema de radiação 1-D composto de duas placas planas paralelas e infinitas. Em seguida, a configuração do queimador de Endrud (2000) foi utilizada para estudar estes modelos em uma situação de combustão turbulenta não pré-misturada. Finalmente, utilizou-se o queimador pressurizado de Nakamura *et al.* (2011) para descrever a combustão de “spray”. As conclusões mais relevantes derivadas deste trabalho e as recomendações para trabalhos futuros são detalhadas abaixo.

7.1

Conclusões

Verificou-se, no sistema de radiação entre placas planas o funcionamento, (i) das rotinas desenvolvidas na UDF (*User Define Functions*) para a descrição das propriedades radiantes de gases produtos da combustão e da fuligem, empregando-se os modelos WSGGM(Mossi) e Rayleigh e (ii) da interface desenvolvida em UDF para acoplar o programa Radcal ao software FluentTM (Modelo Radcal). Esta implementação original amplia o leque de modelos disponíveis neste software.

As propriedades radiantes do CO_2 e H_2O (i.e., coeficiente de absorção global, radiação incidente, divergente de fluxo de calor radiante, etc.) obtidas com o modelo WSGGM(Mossi) exibem uma boa concordância com aquelas calculadas pelo modelo WSGGM(Smith). Isto indica que os coeficientes polinomiais destes modelos na situação de $p_{H_2O}/p_{CO_2} \approx 1$ não influem significati-

vamente nos resultados.

Não obstante, o modelo Radcal prediz resultados de divergente do fluxo de calor radiante até 10% menores do que os obtidos com os modelos WSGGM(Mossi) e WSGGM(Smith). Ainda assim, o modelo Radcal é adequado pois apresenta, para um comprimento médio do feixe de $L_m = 1,5L$ a melhor concordância com os resultados do modelo LBL-HITEMP. Os modelos WSGGM(Mossi) e WSGGM(Smith) conduzem, para $L_m = 1,8L$, a resultados que são concordantes com aqueles do modelo LBL-HITEMP. Ambos valores de L_m são típicos da radiação de gases entre placas planas.

Foi evidenciado, para os modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal, um comportamento crescente da radiação incidente, do coeficiente de absorção e do valor absoluto do divergente do fluxo de calor radiante, quando o comprimento médio do feixe, L_m , é reduzido. Também foi corroborada a redução do coeficiente de absorção global da mistura dos gases produtos da combustão, a , quando a temperatura é incrementada.

No caso em que o modelo Radcal foi usado para resolver as propriedades radiantes dos gases produtos de combustão, evidenciou-se que o coeficiente de absorção/emissão médio efetivo, a_E , usado para acoplar o Radcal com o FluentTM na abordagem de modelo de gás cinza (GGM), é aquele que melhor descreve o comportamento radiante dos gases. Isto ocorre pois este coeficiente é resultado da intensidade de radiação global, que é determinada pelo Radcal através da integração sobre todo o espectro de comprimento de onda da intensidade de radiação espectral.

Quando a abordagem de modelo de banda larga-cinza (GWB) foi empregada no acoplamento entre o Radcal e o FluentTM, evidenciou-se, apenas neste caso, que o coeficiente de absorção/emissão médio efetivo é o que leva à melhor aproximação o divergente do fluxo de calor radiante. Não obstante, o resultado foi ligeiramente discrepante em relação ao modelo de gás cinza (GGM) a medida que o número de divisões do espectro de comprimento de onda, N_b , é aumentado. Um resultado análogo foi obtido por Demarco *et al.* (2011) com o modelo banda larga-cinza (GWB). As causas deste comportamento não foram elucidadas, pois a intensidade de radiação espectral depende de uma maneira complexa da temperatura e das espécies químicas do meio participante.

Os modelos de propriedades radiantes da fuligem [Sazhin, Rayleigh, Radcal] também foram comparados com resultados obtidos com modelos para propriedades radiantes dos gases de combustão [WSGGM(Smith) e Radcal], obtendo-se, desta forma, os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Assim, evidenciaram-se, para estes modelos, resultados de divergente do fluxo de calor radiante muito similares. No

que diz respeito à radiação incidente e ao coeficiente de absorção global, $a = a_g + a_{soot}$, os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal apresentam resultados muito similares, enquanto que o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh subestima ligeiramente estas propriedades.

Uma proposta original deste trabalho consistiu na definição de um coeficiente de absorção, baseado na média geométrica dos coeficientes globais de Planck e Patch. Porém, isto não levou à melhoria de predição das propriedades radiantes.

Finalmente, foi considerado ainda, no sistema de placa plana, a influência do espalhamento sobre as propriedades radiantes da fuligem. Para isto, empregou-se apenas o modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh. Para concentrações apreciáveis de fuligem (valores típicos da combustão turbulenta de hidrocarbonetos líquidos) foi demonstrado que o espalhamento leva a variações de até 10% das propriedades de radiação incidente e do divergente do fluxo de calor radiante. Para concentrações moderadas ou baixas de fuligem (típico da combustão turbulenta de hidrocarbonetos gasosos), o espalhamento não é um fenômeno importante, pois a radiação incidente e o divergente do fluxo de calor radiante praticamente não são alterados pela fuligem.

No que diz respeito ao queimador de Endrud (2000), foram estudados, por comparação com os dados experimentais de Wang *et al.* (2002), Wang (2004) e Wang *et al.* (2005), os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal. Assim, evidenciou-se que os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal são aqueles que melhor aproximam os experimentos de Wang *et al.* (2005) no que tange ao fluxo de calor radiante na parede do queimador, $q_{r,P}$, enquanto que o modelo Radcal é o que melhor prevê os resultados experimentais de fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* .

Foi também desenvolvida, para os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh e Radcal, uma análise dos principais parâmetros termoquímicos e de radiação. Os três modelos levam a campos de temperatura e de frações mássicas de espécies majoritárias (como o CO_2) que são semelhantes entre si. O modelo WSGGM(Smith)&Rayleigh é aquele com o qual foram obtidos campos de maior concentração de fuligem e de radiação incidente. O Radcal é o único modelo que permite a correta previsão dos campos de coeficiente de absorção, $a = a_g + a_{soot}$, os quais são maiores do que os oriundos dos modelos WSGGM(Smith)&Sazhin, WSGGM(Smith)&Rayleigh. Como consequência uma melhor predição da fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* resulta.

Além disso, foi realizado um estudo de sensibilidade à variação da temperatura da parede do queimador sobre os parâmetros termoquímicos e

de radiação. Para isto, empregou-se o modelo WSGGM(Smith)&Sazhin, que foi utilizado na simulação a temperaturas de parede, T_p , de 300, 400 e 700 K. Os resultados das simulações, quando comparadas com aqueles obtidos por Wang *et al.* (2002) e Wang (2004), mostraram que a temperatura de 700 K conduz a uma melhor previsão da taxa de transferência de calor por radiação, $\dot{Q}_{r,P}$. Não obstante, as temperaturas de parede de 300 ou 400 K são aquelas que melhor representaram o desenvolvimento ao longo do queimador do fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$. Cabe ressaltar que os campos de frações mássicas das espécies químicas majoritárias, da fração volumétrica de fuligem e do coeficiente de absorção não foram alterados pela variação da temperatura da parede do queimador. O valor da radiação incidente foi incrementada com o aumento da temperatura da parede.

No que diz respeito à utilização dos modelos WSGGM(Smith), WSGGM(Mossi) e Radcal para descrever as propriedades radiantes dos gases produtos da combustão, foi evidenciada uma boa semelhança entre os modelos WSGGM(Mossi) e Radcal, referente ao campo de coeficiente de absorção, $a = a_g$. Contudo, o modelo WSGGM(Mossi) apresentou regiões onde os valores de a foram ligeiramente maiores do que os previstos pelo Radcal, que conduziu a um ligeiro incremento no fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$, na parede do queimador.

Também foi estudada, para o queimador de Endrud (2000), a influência que exerce a variação do parâmetro de escalonamento da oxidação, C_{oxid} , do modelo de Moss-Brookes, sobre o fluxo de calor radiante na parede do queimador, $q_{r,P}$, e sobre a fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* . Para isto, os modelos WSGGM(Smith)&Sazhin e Radcal foram utilizados. Os resultados demonstraram, para ambos modelos, que uma redução de 50% de C_{oxid} leva a aumentos significativos do fluxo de calor radiante, $q_{r,P}$ e da fração volumétrica equivalente da fuligem, F_V^* . Embora a redução de C_{oxid} favoreça a previsão de F_V^* , obtido por Wang *et al.* (2005), ocorre uma superestimação de $q_{r,P}$ de até 90%. Cabe ressaltar que a redução de C_{oxid} levou, também, ao aumento da taxa de formação da fuligem devido à diminuição da taxa de oxidação, resultando em valores demasiadamente grandes de F_V^* na saída do queimador de Endrud (2000).

Finalmente, foram simulados, empregando-se os modelos mais sofisticados disponíveis no software FluentTM, o processo de combustão turbulenta de um “spray”. Os dados experimentais do queimador de Nakamura *et al.* (2011), obtidos a 0, 1 e 0, 3 MPa, foram utilizados para efeito de comparação. Assim, a visualização de envelope de chama e das gotículas de querosene simulados apresentam, para ambas pressões, uma razoável representatividade quando com-

paradas com as imagens de Nakamura *et al.* (2011). Os perfis de temperatura calculados na região de desenvolvimento da combustão, se encontram próximos ao limite das (elevadas) incertezas experimentais associadas ao método de duas cores.

Além disso, a simulação estima uma formação antecipada de fuligem, sendo esta mais acentuada no caso de 0,1 MPa. Isto leva a um deslocamento do valor máximo da radiação incidente para a região mais a montante. Cabe ressaltar que a fuligem e a radiação incidente que foram calculados para 0,3 MPa, superestimam em até 150% os dados experimentais. Acredita-se que esta superestimação deve-se à adoção do expoente $m = 1$ no modelo de Moss-Brookes que, não pode ser alterado no FluentTM.

No que diz respeito ao transporte e à vaporização/ebulição de gotículas de querosene, a evolução do diâmetro médio e da distribuição de tamanho de gota, obtidos da simulação numérica, são completamente discrepantes em relação aos resultados experimentais. Acredita-se que a origem desta grande discrepância é a condição de contorno de gotículas monodispersas de n-heptano, de diâmetro médio demasiadamente pequeno. A adoção de um “spray” polidisperso com distribuição de diâmetro similar ao encontrado no experimento, poderia mitigar esta forte discrepância.

7.2

Recomendações para Trabalhos Futuros

Tal como foi enfatizado nos capítulos anteriores, diversas dificuldades e desafios, no que diz respeito à modelagem e simulação da radiação térmica e sua interação com a fuligem, foram encontradas ao longo do presente trabalho. Estes são colocadas de maneira generalizada como motivação para trabalhos futuros:

- Estudo teórico, numérico e experimental de modelos mais sofisticados para previsão da formação/consumo fuligem, que incluam, além do acetileno e da hidroxila, precursores e agentes oxidantes tais como cadeias de hidrocarbonetos poliaromáticos e oxigênio, respectivamente. O forte impacto que a fuligem pode exercer na redistribuição da energia no escoamento requer este cuidado.
- Estudos experimentais que envolvam a medição simultânea das chamas turbulentas de espécies químicas precursoras e da fuligem. Isto pode ser feito combinando-se as técnicas de Incandescência induzida por Laser [do inglês *Laser Induced Incandescence, LII*] e a Fluorescência Induzida por Laser Plano (do inglês *Planar Laser Incandescence, PLIF*).

- Desenvolvimento de mecanismos cinéticos do tipo “esqueleto” abrangentes e compreensivos capazes de prever corretamente a formação/consumo de espécies de precursores da fuligem. Uma possibilidade é o emprego de combustíveis e modelos “surrogate” de hidrocarbonetos líquidos.
- Estudo aplicado de modelos de propriedades radiantes mais sofisticados, tais como *Full Spectrum k-Distribution (FSK)*, *Statistical Narrow Band (SNB)* e *Correlated-k Method (CK)*, de forma a obter uma melhor previsão do transporte de energia por radiação térmica em sistemas de combustão.
- Determinação da influência que exerce o espalhamento Rayleigh sobre a transferência de energia por radiação em uma situação de combustão turbulenta em queimadores de porte laboratorial e industrial.
- Aplicação do acoplamento Radcal/FuentTM em problemas de combustão turbulenta em queimadores de porte industrial.
- Estudo numérico da influência que exerce, sobre as propriedades aerotermoquímicas de um escoamento reativo, o emprego de distribuições monodispersa e polidispersa de gotículas de combustível com vários diâmetros médio de gota (arimético, Sauter, etc.), bem como descrição mais realistas das propriedades físicas da interface líquido/vapor.
- Implementação de rotinas que permitam resolver a equação de transferência radiante semi-cinza (sg-RTE) e, desta forma, representar o transporte de energia radiante através dos coeficientes médios, de emissão de Planck, a_E , e, de absorção incidente, a_I .
- Implementação, no código Radcal, de rotinas que permitam estimar o calcular o espalhamento Rayleigh.
- Identificação das causas que levam à uma maior discrepância, nos resultados do transporte radiante, quando o número de bandas, N_b , na abordagem de banda larga cinza (GWB), é aumentado.
- Levantamento bibliográfico visando a criação de uma base de dados dos valores de comprimento médio do feixe, L_m , determinados em função da geometria do domínio computacional e das propriedades termoquímicas do meio participante.