

Referências Bibliográficas

- [Al-Oamri] AL-OMARI, S. B.. **Modelling soot processes in a methane-fueled turbulent diffusion flames operating under atmospheric pressure**. International Journal of Dynamic of Fluids, 3:31–44, 2007. 3.2.3
- [Baclic] BACLIC, B. S.. **Least square correction for radiation mean beam length**. Int. Comm. Heat Mass Transfer, 14:353–355, 1987. 4.2.4, 4.3
- [Baillie *et al.*] BAILLIE, S.; CAULFIELD, M.; COOK, D. K. ; DOCHERTY, P.. **A phenomenological model for predicting the thermal loading to a cylindrical vessel impacted by high pressure natural gas jet fires**. Transactions of the Institution of Chemical Engineers: Part B: Process Safety and Environmental Protection, 76:3–13, 1998. (document), 2.2, 2.17
- [Barlow and Dreizler] BARLOW, R.; DREIZLER, A.. **Sandia /tud piloted ch4/air jet flames**. International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames, 2003. 2.2
- [Baukal Jr. *et al.*] JR, C. E. B.; GERSTHTEIN, V. Y. ; LI, X.. **Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion**. CRC Press, 1 edition, 2001. 1.1
- [Baukal] BAUKAL, C. E.. **Industrial Burners Handbook**. CRC Press, 1 edition, 2004. 1.1
- [Bidi *et al.*] BIDI, M.; HOSSEINI, R. ; NOBARI, M. R. H.. **Numerical analysis of methane-air combustion considering radiation effect**. Energy Conversion and Management, 49:3634–3647, 2008. (document), 2.2, 2.21, 2.2, 2.22, 3.2.4, 3.2.5
- [Borghi e Champion] BORGHI, R.; CHAMPION, M.. **Modélisation et Théorie des Flammes**. Editions TECHNIP, 1 edition, 2000. 6.3.1
- [Boutoub *et al.*] BOUTOUB, A.; BENTICHA ; SASSI, M.. **Non-gray radiation analysis in participating media with the finite volume method**. Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences, 30:183–192, 2006. 3.2.5

- [Bradley *et al.*] BRADLEY, D.; GASKELL, P. H. ; LAU, A. K. C.. **A mixedness-reactedness flamelet model for a turbulent diffusion flames**. 19th Symposium International on Combustion, 24:685–692, 1990. 2.2
- [Bray e Peters] BRAY, K. N. C.; PETERS, N.. **Turbulent Reacting Flows – Laminar flamelets in turbulent flames**. Academic Press, 1 edition, 1994. 3.2.2
- [Brookes e Moss] BROOKES, S. J.; MOSS, J. B.. **Predictions of soot and thermal radiation properties in confined jet diffusion flames**. Combustion and Flame, 116:486–503, 1999. (document), 2.2, 2.2, 3.2.3, 3.2.3, 3.2.3, 3.2.3, 5.1.2, 5.1.2, 5.9, 5.2.4, 6.2, 6.3.2
- [Chandrasekhar] CHANDRASEKHAR, S.. **Radiative Transfer**. Dover, 1 edition, 1960. 3.2.4
- [Chang e Charalampopoulos] CHANG, H.; CHARALAMPOPOULOS, T. T.. **Determination of the wavelength dependence of refractive indices of flame soot**. Proceedings of the Royal Society London, 430:577–591, 1990. (document), 3.7, 3.2.6, 4.2.4, 4.3, D.1
- [Coelho] COELHO, P. J.. **Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows**. Progress in Energy and Combustion Science, 2007. 3.2.4
- [Colson *et al.*] COLSON, G.; PEETERS, F. ; RUYCK, J. D.. **Experimental in-flame study of a 15 mw dual fuel gas/oil burner**. Fuel, 78:1253–1261, 1999. (document), 2.1, 2.1, 2.3, 2.4
- [Cumber e Fairweather] CUMBER, P. S.; FAIRWEATHER, M.. **Evaluation of flame emission models combined with the discrete transfer method for combustion system simulation**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 48:5221–5239, 2005. (document), 2.16, 2.2
- [Curran *et al.*] CURRAN, H. J.; JAWEERA, T. M.; PITZ, W. P. ; WESTBROOK, C. K.. **A detailed modeling study of propane oxidation**. Western States Section of the Combustion Institute: Spring Meeting, 2004. A.1
- [Dalzell and Sarofim] DALZELL, W. H.; SAROFIM, A. F.. **Optical constants of soot and their applications to heat flux calculations**. Journal of Heat Transfer, 91:100–104, 1969. (document), 3.7, 3.2.6, 5.2.1
- [Degroux *et al.*] DEGROUX, P.; MERCIER, X. ; THOMSON, K. A.. **Study of the formation of soot precursor and soot particles in flame using**

- optical diagnostics.** 34th International Symposium on Combustion, 34, 212. 5.2.1
- [Demarco *et al.*] DEMARCO, R.; CONSALVI, J. L.; FUENTES, A. ; MELIS, S..
Assesment of radiative property models in non-gray sooting media. International Journal of Thermal Sciences, 50:1672–1684, 2011. 4.2.4, 7.1
- [Duwel *et al.*] DUWEL, I.; GE, W.; KRONEMAYER, H.; DIBBLE, R.; GUTHEIL, E.; SCHULZ, C. ; WOLFRUM, J..
Experimental an numerical characterization of a turbulent spray flame. Proceedings of the Combustion Institute, p. 2247–2255, 2007. 6.3.1
- [Edwards e Balakrishnan] EDWARDS, D. K.; BALAKRISHNAN, A..
Thermal radiation by combustion gases. International Journal of Heat and Mass Transfer, 16:25–40, 1973. 2.2
- [Endrud] ENDRUD, N. E..
Soot, radiation and polutant emissions in oxigen-enriched turbulent jet flames. Master Thesis, The Pensilvania State University, 2000. (document), 1.3, 1.4, 2.2, 2.18, 2.20, 5, 5.1, 5.1.1, 5.1, 5.1.2, 5.2, 5.1.3, 5.2.2, 5.2.2, 5.5, 5.14, 5.15, 5.18, 5.2.5, 5.7, 5.24, 5.2.5, 5.2.6, 5.2.6, 7, 7.1, A.2
- [Fairweather *et al.*] FAIRWEATHER, M.; JONES, W. P. ; LINDSTEDT, R. P..
Predictions of radiative heat transfer from a turbulent reacting jet in a cross-wind. Combustion and Flame, 82:45–63, 1992. 2.2
- [Fisher e Moss] FISHER, B. A.; MOSS, J. B..
The influence of pressure soot production and radiation in turbulent kerosine spray flames. Combustion Science and Technology, 138:43–61, 1998. (document), 2.1, 2.1, 2.2
- [Fleck *et. al.*] FLECK, B. A.; MATOVIC, M. D.; GRANDMAISON, E. W. ; SOBIESIAK, S..
Modelling of the near field of a multi-jet burner. IFRF Combustion Journal, 200306:1–15, 2003. (document), 2.3, 2.27
- [Fox] FOX, R. O..
Computational Models for Turbulent Reacting Flows. Cambirdge, 2 edition, 2003. 1.1
- [Glassman e Yetter] GLASSMAN, I.; YETTER, R. A..
Thermal Radiation Heat Transfer. Elsevier Academic Press, 4 edition, 2008. 3.2.3, 6.3.1, 6.3.1

- [Grosshandler] GROSSHANDLER, W. L.. **Radiative Heat Transfer in Non-homogeneous Gases: A Simplified Approach**. PhD thesis, Department of Mechanical Engineering, University of California, Berkeley, 1976. 4.1
- [Grosshandler] GROSSHANDLER, W. L.. **Radiative heat transfer in non-homogeneous gases**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 23:1447–1459, 1980. 2.2
- [Grosshandler e Nguyen] GROSSHANDLER, W. L.; NGUYEN, H.. **Application of the total transmittance nonhomogeneous radiation model of methane combustion**. Journal of Heat Transfer, 107:445 – 450, 1985. 4.1
- [Grosshandler] GROSSHANDLER, W. L.. **Radcal: A narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment**. Technical report, National Institute of Standards and Technology, 1993. (document), 1.4, 2.2, 3.2.5, 4.1, 4.1, 4.1, 4.2, 4.2.4, 5.1.2, B.1.1, B.1, B.2, B.2, B.3
- [Hall] HALL, R. J.. **Physical and Chemical Aspects of Combustion**. Gordon and Breach, 1 edition, 1997. 2.2, 2.2, 3.2.3
- [Haworth] HAWORTH, D. C.. **Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows**. Progress in Energy and Combustion Science, 36(2):168–259, 2010. 3.2.2
- [Hottel e Sarofim] HOTTEL, H. C.; SAROFIM, A. F.. **Radiative Transfer**. McGraw Hill, 1 edition, 1967. 3.2.5, 4.2.4, 5.1.2
- [Hughes *et al.*] HUGHES, K. J.; TURANYI, T.; CLAGUE, A. R. ; PILLING, M. J.. **Testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane**. International Journal of Chemical Kinetics, 33(9):513–538, 2001. A.2
- [Jamaluddin e Smith] JAMALUDDIN, S.; SMITH, P. J.. **Predicting radiative transfer in rectangular enclosures using the ordinate discrete transfer**. Combustion, Science and Technology, 59:321–340, 1988. (document), 3.2.4, 3.1
- [Jeans] JEANS, J. H.. **The equations of radiative transfer of energy**. Monthly Notices Royal Astronomical Society, 78:28–36, 1917. 3.2.4
- [Kent e Bastin] KENT, J. H.; BASTIN, S. J.. **Parametric effects on sooting in turbulent acetylene diffusion flames**. Combustion and Flame, 56):29–42, 1984. 5.2.1

- [Khan e Greeves] KHAN, I. M.; GREEVES, G.. **A method for calculating the formation and combustion of soot in diesel engines.** N. H. Afgan and J. M. Beer, editors, *Heat Transfer in Flames*, Chapter 25, 1974. 3.2.3, 3.2.3
- [Köhler *et al.*] KÖHLER, M.; GEIGLE, K. P.; MEIER, W.; AD K. A. THOMSON, B. M. C. ; SMALLWOOD, G. J.. **Sooting turbulent jet flame: Characterization and quantitative soot measurements.** *Applied Physics B - Lasers and Optics*, 104:409–425, 2011. (document), 2.1, 2.1, 2.5, 2.6
- [Konnov] KONNOV, A.. **Remaining uncertainties in the kinetic mechanism of hydrogen combustion.** *Combustion and Flame*, 152(4):507–528, 2008. A.2
- [Koylu and Faeth] KOYLU, U. O.; FAETH, G. M.. **Optical properties of overfire soot in buoyant turbulent diffusion flames at long residence times.** *ASME Journal of Heat Transfer*, 116:152–159, 1994. (document), 3.2
- [Kuo] KUO, K. Y.. **Principles of Combustion.** John Wiley and Sons, 1 edition, 1986. 3.3.3
- [Lallemant *et al.*] LALLEMANT, N.; SAYRET, A. ; WEBER, R.. **Evaluation of emissivity correlations for $h_2O - CO_2 - n_2$ /air mixtures and coupling with solution methods of the radiative transfer equation.** *Progress on Energy and Combustion Science*, 22:543–574, 1996. 3.2.4, 4.1.1, 4.1.2
- [Law] LAW, C. K.. **Combustion Physics.** Cambridge University Press, 1 edition, 2006. (document), 3.1, A.1
- [Lee *et al.*] LEE, K. B.; THRING, M. W. ; BEER, J. M.. **Procurar.** *Combustion and Flame*, 6:137–145, 1962. 3.2.3
- [Lee e Tien] LEE, S. C.; TIEN, C. L.. **Optical constants of soot in hydrocarbons flames.** *Eighteenth Symposium (International) of Combustion*, 18:1159–, 1980. (document), 3.7
- [Li *et al.*] LI, J.. **An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion.** *International Journal Chemical Kinetics*, 36(10):566–575, 2004. A.2

- [Liu *et al.*] LIU, F.; GULDER, O. L. ; SMALLWOOD, G. J.. **Non-grey gas radiative transfer analyses using the statistical narrow-band model.** International Journal of Heat Transfer, 41:2227 – 2236, 1998. 3.2.5
- [Lockwood e Shah] LOCKWOOD, F. C.; SHAH, N. C.. **A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures.** Eighteenth Symposium (International) on Combustion, 18(1):1405–1414, 1981. 3.2.4
- [Magnussen e Hjertager] MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H.. **On the mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis of soot formation and combustion.** 16 Symposium International on Combustion, 17:719–727, 1976. 2.2, 2.2, 3.2.3, 3.2.3
- [Mahmud e Sangha] MAHMUD, T.; S. K. SANGHA. **Prediction of a turbulent non-premixed natural gas flame in a semi-industrial scale furnace using radiative flamelet combustion model.** Flow Turbulent Combustion, 84:1–23, 2010. (document), 2.2, 2.23, 2.24
- [Masri *et al.*] MASRI, A. R.; DIBBLE, R. W. ; BARLOW, R. S.. **The structure of turbulent nonpremixed flames revealed by raman-rayleigh-lif measurements.** Progress on Energy and Combustion Sciences, 22:307–362, 1996. 5.2.2
- [Michelfelder e Lowes] MICHELFELDER, S.; LOWES, T. W.. **M2-trials at ijmuiden ifrf.** International Flame Research Foundation, Report No F36/a/4, 1974. (document), 2.2, 2.2, 2.24
- [Modest] MODEST, M.. **Radiative Heat Transfer.** Academic Press, 2 edition, 2003. (document), 3.2.4, 3.2.4, 3.2.4, 3.2.4, 3.5, 3.2.6, 3.2.6, 4.1.1
- [Moss *et al.*] MOSS, J. B.; PERERA, S. A. L.; STEWART, C. D. ; MAKIDA, M.. **Radiation heat transfer in gas turbine combustors.** Proceedings of 16th International Symposium on Airbreathing Engines, 17, 2003. 3.2.3
- [Mossi] MOSSI, A.. **Modelagem da radiação térmica em chamas laminares da combustão de metano e ar.** Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011. (document), 1.4, 3.2.5, 4, 4.2, 4.2.1, 4.2.4, 4.2.4, 4.6, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 4.3, 5, 5.2.6, 5.25, 5.26, 5.27, 5.28, 5.29, C.1

- [Nakamura *et al.*] NAKAMURA, M.; HWANG, S.; NAKAO, Y.; NISHIOKA, D.; HAYASHI, J. ; AKAMATSU, F.. **Measurement of spray characteristics of coaxial jet spray flames under high pressure**. 3rd IASME/WSEAS Int. Conf. on Energy and Environment, 1:51–54, 2008. (document), 2.1, 2.1, 2.4, 6, 6.3, 6.3.3, 6.3.3, 6.3.3, 6.17, 6.18
- [Nakamura *et al.*] NAKAMURA, M.; NISHIOKA, D.; HAYASHI, J. ; AKAMATSU, F.. **Soot formation, spray characteristics, and structure of jet spray flames**. Combustion and Flame, 158:1615–1623, 2011. (document), 1.3, 1.4, 2.1, 2.7, 2.8, 2.1, 2.9, 2.1, 2.4, 6, 6.1, 6.1, 6.2, 6.2, 6.2, 6.3, 6.3.1, 6.3.1, 6.3, 6.3.1, 6.4, 6.5, 6.6, 6.3.1, 6.7, 6.3.1, 6.8, 6.3.2, 6.11, 6.3.2, 6.3.2, 6.3.2, 6.12, 6.13, 6.3.3, 6.3.3, 6.14, 6.16, 7, 7.1, A.2, E
- [Nieckele *et. al.*] NIECKELE, A. O.; NACCACHE, M. F. ; GOMES, M. S. P.. **Combustion performance of an aluminium melting furnace operating with natural gas and liquid fuel**. Applied Thermal Engineering, 31:841–851, 2011. (document), 2.2, 2.25
- [Nooren *et al.*] NOOREN, P. A.; WOUTERS, H. A.; PEETERS, T. W. J.; ROEKAERTS, D.; MAAS, U. ; SCHMIDT, D.. **Monte carlo pdf modeling of a turbulent natural-gas diffusion flame**. Combustion Theory and Modeling, 1:79–96, 1997. 3.3.1
- [O Conaire *et al.*] OCONAIRE, M.; CURRAN, H. J.; SIMMIE, J. M.; PITZ, W. J. ; WESTBROOK, C. K.. **A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation**. International Journal Chemical Kinetics, 35(11):603–622, 2004. A.2
- [Olfe] OLFE, D. B.. **Beam mean calculation for radiation from non-transparent gases**. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 1:169–176, 1961. 4.2.4, 4.3
- [Ozisick] OSIZIK, M. N.. **Radiative Transfer and Interactions with Combustion and Convection**. Wiley Interscience Publication, 1 edition, 1973. 3.2.5
- [Patch] PATCH, R. W.. **Effective absorption coefficient for radiant energy transport in non-gray non scattering gases**. Journal of Quantum Spectroscopy Radiative Transfer, 7:611–637, 1967. 4.1.1
- [Patel *et al.*] PATEL, A.; REITZ, S. K. R.. **Development and validation of a reduced reaction mechanism for hcci engine simulations**. SAE Technical Paper, 2004-01-0558, 2004. 6, E

- [Peters] PETERS, N.. **Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion**. Progress in Energy and Combustion Science, 10:319–339, 1984. 3.2.2, 3.2.2
- [Peters] PETERS, N.. **Turbulen Combustion**. Cambridge University Press, 1 edition, 2000. 3.2.2
- [Poinot e Veynante] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.. **Theoretical and Numerical Combustion**. Edwards, 2 edition, 2005. 3.2.2, 3.2.2
- [Poirier et al.] POIRIER, D.; GRANDMAISON, E. W.; MATOVIC, M. D.; BARNES, K. R. ; NELSON, B. D.. **High temperature oxidation of steel in an oxygen-enriched low nox furnace environment**. IFRF Combustion Journal, 200602:1–27, 2006. (document), 2.26
- [Ranz e Marshal] RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R.. **Evaporation from drops, part. i**. Chemical Engineering Progress, 48:141 – 146, 1952. 3.3.3
- [Sabel'nikov et al.] SABEL'NIKOV, V. A.; DESHAIES, B. ; DA SILVA, L. F. F.. **Revisited flamelet model for nonpremixed combustion in supersonic turbulent flows**. Combustion and Flame, 114:577–584, 1998. 3.2.2
- [Sacomano] SACOMANO, F.. **Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de turbulência k- ϵ** . Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2011. 3.3.4
- [Sarkar e Balakrishnan] SARKAR, S.; BALAKRISHNAN, L.. **Application to a reynolds-stress turbulence model for the compressible shear layer**. Technical report, NASA CR 182002, 1990. 3.2.1
- [Sarlej et al.] SARLEJ, M.; PETR, P. ; STEHLIK, P.. **Low-nox burner design evaluation by cfd**. 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE17, p. 1–6, 2007. (document), 2.2, 2.13, 2.14
- [Sazhin] SAZHIN, S. S.. **An approximation for the absorption coefficient of soot in a radiating gas**. Manuscript - Fluent Europe, 1994. 2.2, 3.2.6, 3.2.6, 3.2.6, 4, 4.2, 4.2.4, 4.3, 5, 5.1.2, 5.2.1, 5.2.3, 5.2.4, 5.2.4, 5.2.6, 6.2
- [Sazhin] SAZHIN, S. S.. **Advanced models od fuel droplet heating and evaporation**. Progress in Energy and Combustion Science, 32:162–214, 2006. (document), E, E, E, E.2

- [Shafieeee e Topal] SHAFIEEEE, S.; TOPAL, E.. **When will fossil fuel reserves be diminished?** *Energy Policy*, 37:181–189, 2009. 1.1
- [Shih *et al.*] SHIH, T. H.; LIOU, W. W.; SHABBIR, A.; YANG, Z. ; ZHU, J.. **A new $k - \varepsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows.** *Computer Fluids*, 24(3):227–238, 1995. 3.2.1
- [Siegel e Howel] SIEGEL, R.; HOWELL, J. R.. **Thermal Radiation Heat Transfer.** Hemisphere Publishing Corporation, 3 edition, 1992. 3.2.4, 3.2.4
- [Siegel] SIEGEL, R.; HOWELL, J. R.. **Thermal Radiation Heat Transfer.** Editorial Reverté S.A., 4 edition, 2002. (document), 3.2.6, 3.6
- [Smith *et al.*] SMITH, T. F.; SHEN, Z. F. ; FRIEDMAN, J. N.. **Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model.** *Journal of Heat Transfer*, p. 102–608, 1982. (document), 3.2.5, 3.2, 3.2.5, 3.2.6, 4, 4.2, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 5, 5.2.1, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.5, 5.2.6, 5.25, 5.26, 5.27, 5.28, 5.29, 6.2
- [Smith *et al.*] SMITH, G. P.; GOLDEN, D. M.; FRENKLACH, M.; MORIARTY, N. W.; EITENEER, B.; GOLDBERG, M.; BOWMAN, C. T.; HANSON, R. K.; SONG, S.; GARDINER, W. C. ; LISSIANKI, V. V. Z.. **Gri-mech 3.0.** Technical report, Gas Research Institute, 1999. 2.2, 5.1.2, A.2
- [Smith e Webster] SMITH, J. D.; WEBSTER, T.. **Using cdf to solve challenges of ultra low nox burner in retrofit in refinery process heaters.** *Petroleum Technology Quarterly*, 2002. 1.1
- [Smyth *et al.*] SMYTH, K. C.; MILLER, J. H.; DORFMAN, R. C.; MALLARD, W. G. ; SANTORO, R. J.. **Soot inception in a methane/air diffusion flame as characterized by detailed species profiles.** *Combustion and Flame*, 62:157–181, 1985. 3.2.3
- [Smyth e Shaddix] SMYTH, K. C.; SHADDIX, C. R.. **The elusive history of $m = 1.57 - 0.56i$ for the refractive index of soot.** *Combustion and Flame*, p. 314–320, 1996. 5.2.1
- [Soufiani e Taine] SOUFIANI, A.; TAINE, J.. **High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for h_2o , co_2 and co , and k-correlated model for h_2o and co_2 .** *International Journal of Heat Mass Transfer*, 40(4):987–991, 1997. 3.2.5
- [Spangelo] SPANGELO, O.. **Experimental and Theoretical Studies of a Low NOx Swirl Burner.** PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology, 2004. (document), 1.1, 2.2, 2.10, 2.11, 2.2, 2.12

- [Syed *et al.*] SYED, J. K.; STEWRT, C. D. ; MOSS, J. B.. **Modelling soot formation and thermal radiation in buoyant turbulent diffusion flames**. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, 23:1523–1541, 1990. 3.2.3
- [Talbot *et al.*] TALBOT, L.. **Thermophoresis of particles in a heated boundary layer**. Journal of Fluid Mechanics, 101:737–758, 1980. 3.3.1, 3.3.1
- [Tesner *et al.*] TESNER, P. A.; SNERIGOVA, T. D. ; KNORRE, V. G.. **Kinetics of dispersed carbon formation**. Combustion and Flame, 17:253–260, 1971. 3.2.3, 3.2.3
- [Tien e Wang] TIEN, C. L.; WANG, L. S.. **On the calculation of beam mean for a radiating gas**. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 5:543–546, 1964. 4.2.4
- [Truelove] FOR FLAME RADIATION, A. M. G. G. M.. **J. s. truelove**. Technical report, AERE-R8494, UKAEA, Harwell, 1973. 2.2
- [Turns] TURNS, S.. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**. McGraw Hill, 1 edition, 2000. 3.2.3
- [Venkata] VENKATA, V.. **Advanced Flamelet Modelling of Turbulent Nonpremixed and Partially Premixed Combustion**. PhD thesis, Loughborough University, 2008. 3.2.2
- [Versteeg e Malalasekera] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W.. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method**. Pearson Prentice Hall, 2 edition, 2007. 1.1, 1.2, A.1
- [Viskanta] VISKANTA, R.. **Concerning the definitions of the mean absorption coefficient**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 7:1047–1049, 1964. 3.2.4
- [Wang *et al.*] WANG, L.; ENDRUD, N. E.; TURNS, S. R.; D'AGOSTINI, M. D. ; SLAVEJKOV, A. G.. **A study of the influence of oxygen index on soot, radiation, and emission characteristics of turbulent jet flames**. Combustion Science and Technology, 174(8):45–72, 2002. (document), 1.4, 2.2, 2.20, 2.4, 5, 5.1.2, 5.2.4, 5.3, 5.4, 5.6, 5.2.5, 7.1
- [Wang] WANG, L.. **Detailed Chemistry, Soot, and Radiation Calculations in Turbulent Reacting Flows**. PhD thesis, PhD Thesis, The

- Pensilvania State University, 2004. 1.1, 1.4, 2.2, 2.2, 2.4, 5, 5.1.2, 5.2.2, 5.2.2, 7.1
- [Wang *et al.*] WANG, L.; HARWORTH, D. C.; TURNS, S. R. ; MODEST, M. F.. **Interactions among soot, thermal radiation, and nox emissions in oxygen-enriches turbulent nonpremixed flames: A computational fluids dynamics modeling study.** Combustion and Flame, 141:170–179, 2005. (document), 1.4, 2.2, 2.2, 2.2, 2.19, 2.20, 2.4, 5, 5.1, 5, 5.1, 5.1.2, 5.2.1, 5.2.1, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.2, 5.6, 5.7, 5.2.2, 5.2.4, 5.24, 5.2.5, 5.2.5, 5.2.6, 5.2.6, 5.30, 5.2.7, 5.2.7, 7.1
- [Warnatz *et. al.*] WARNATZ, J.; MAAS, U. ; DIBBLE, R. W.. **Combustion, Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation.** Springer-Verlag, 2 edition, 1999. 2.2
- [Weihong e Wlodzimierz] WEIHONG, Y.; WLODZIMIERZ, B.. **Cfd as applied to high temperature air combustion in industrial furnaces.** IFRF Combustion Journal, 1:1–21, 2006. (document), 2.3, 2.28, 2.29
- [Wen *et al.*] WEN, Z.; YUN, S.; THOMSON, M. J. ; LIGHTSTONE, M. F.. **Modeling soot formation in turbulent kerosene / air jet difussion flames.** Combustion and Flame, 135:323–340, 2003. (document), 2.2, 2.15, 3.2.3, 3.2.3, 5.1.2
- [Williamham *et al.*] WILLIAMHAM, C. B.; TAYLOR, W. J.; PIGNOCCO, J. M. ; ROSSINI, F. D.. **Vapor pressures and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons.** J. Res. Natl. Bur. Stand. (U.S.), 35:219–244, 1945. (document), E, E.1, E, E.2
- [Wu e Fricker] WU, H. L.; FRICKER, N.. **The characteristics of swirl-stabilized natural gas flames, part 2: The behaviour of swirling jet flames in a narrow cylindrical furnace.** Journal of the Institute of Fuel, 49:144–151, 1976. (document), 2.16, 2.2
- [Yeoh e Yuen] YEOH, G. H.; YUEN, K. K.. **Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering - Theory, Modelling and Practice.** Academic Press, 1 edition, 2009. 3.2.1, 3.2.4, 3.2.5
- [Young *et al.*] YOUNG, K. J.; STEWARD, C. D. ; MOSS, J. B.. **Soot formation in turbulen nonpremixed kerosine-air flames burning at**

elevated pressure. Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion, 49:609–617, 1994. 2.1, 2.2

[van de Hulst] VAN DE HULST, H. C.. **Light Scattering by Small Particles**. Dover Publications, 1 edition, 1981. 3.2.6

A

Cinética Química das Reações de Combustão

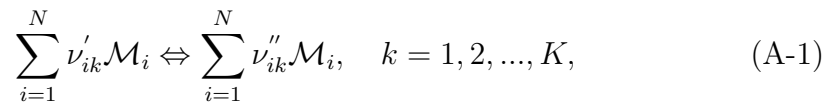
A.1

Estado da Arte

A combustão de hidrocarbonetos com o ar envolve um número considerável de etapas (iniciação, propagação, transferência de cadeia e terminação) com a presença de espécies intermediários (também chamados de radicais) antes da formação final de produtos (Law, 2006). A cinética química - ou mecanismo - das reações de combustão determina o tempo que um sistema leva para atingir o estado final de equilíbrio (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Idealmente, um mecanismo de cinética química deve ser capaz de descrever a oxidação do combustível em uma ampla faixa de condições de operação (temperatura, pressão, riqueza, etc.) e para uma ampla gama de sistemas simples, tais como reatores de fluxo contínuo, tubos de choque, chamas de difusão, chamas pré-misturadas, etc. (Curran *et al.*, 2004).

As taxas de consumo dos reagentes e formação dos produtos de combustão aparecem no termo fonte da equação de transporte das espécies químicas que participam em uma reação de combustão. Considera-se apenas a k -ésima reação elementar reversível descrita por



onde ν'_{ik} e ν''_{ik} são os coeficientes estequiométricos das espécies químicas, $\mathcal{M}_i$. A taxa de progresso da k -ésima reação elementar pode ser escrita como o produto dos coeficientes de todas as N espécies químicas participantes na k -ésima reação elementar,

$$\dot{q}_k = k_k^f \prod_{i=1}^N [\mathcal{M}_i]^{\nu'_{ik}} - k_k^b \prod_{i=1}^N [\mathcal{M}_i]^{\nu''_{ik}}, \quad (\text{A-2})$$

onde k_k^f e k_k^b representam respectivamente os coeficientes direito e reverso da velocidade da k -ésima reação e $[\mathcal{M}_i]$ é a concentração da espécie $\mathcal{M}_i$,

$$[\mathcal{M}_i] \equiv [X_i] = \frac{\rho_i Y_i}{MW}, \quad (\text{A-3})$$

onde $\overline{MW}$ é o peso molecular da mistura. O coeficiente da velocidade direto da k -ésima reação é expresso pela lei de Arrhenius,

$$k_k^f = A_k T_k^{m_k} \exp\left(-\frac{E_{Ak}}{RT}\right), \quad (\text{A-4})$$

onde R é a constante universal dos gases (8,3143 kJ/mol-K), A_k , m_k e E_{Ak} são, para cada reação elementar, o fator pré-exponencial de Arrhenius, o expoente da temperatura e a energia de ativação. O coeficiente reverso da k -ésima reação é obtido a partir da constante de equilíbrio, K_{Ck} , definida como,

$$K_{Ck} = \frac{k_k^f}{k_k^b} = \prod_{i=1}^N [\mathcal{M}_i]^{(\nu''_{ik} - \nu'_{ik})}. \quad (\text{A-5})$$

A conversão da i -ésima espécie química na k -ésima reação elementar, $\dot{q}_{ik} = d[\mathcal{M}_{ik}]/dt$, é definida como,

$$\dot{q}_{ik} = \frac{d[\mathcal{M}_{ik}]}{dt} = (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) \dot{q}_k = (\nu''_{ik} - \nu'_{ik}) \left[k_k^f \prod_{i=1}^N [\mathcal{M}_i]^{\nu'_{ik}} - k_k^b \prod_{i=1}^N [\mathcal{M}_i]^{\nu''_{ik}} \right], \quad (\text{A-6})$$

logo, a taxa de produção química da i -ésima espécie, $\dot{\omega}_i$, é escrita como,

$$\dot{\omega}_i = \overline{MW}_i \sum_{k=1}^K \dot{q}_{ik}, \quad (\text{A-7})$$

onde W_i é o peso molecular da i -ésima espécie química.

A.2

Mecanismos de Cinética Química Detalhada

Atualmente, existem mecanismos detalhados de cinética química razoavelmente confiáveis que estão disponíveis para combustíveis simples tais como o hidrogênio [Li *et al.*, (2004); O Conaire *et al.*, (2004); Konnov (2008), etc.] e metano [GRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, 1999); Leeds 1.5, (Hughes *et al.*, 2001); San Diego 20111122, etc.], cuja faixa de validade é bem estabelecida. Trabalhos recentes permitem, descrever os processos da combustão com ar de hidrocarbonetos envolvendo até quatro átomos de carbono tais propano, butano, metanol e etanol. No entanto, a faixa de validade é tão mais restrita quanto maior a complexidade da estrutura química-molecular do combustível.

São objetos de desenvolvimentos recentes mecanismos detalhados de cinética para a modelagem da combustão de hidrocarbonetos representativos a combustíveis líquidos, como gasolina, querosene e Diesel. Estes mecanismos

envolvem um número considerável de espécies químicas e reações elementares, o que dificulta a tarefa de empregá-los em uma simulação numérica.

O aparecimento de computadores com grande capacidade de processamento e armazenamento de dados, e a derivação de algoritmos numéricos acurados para a resolução de equações cinéticas simultâneas contribuíram decisivamente para o desenvolvimento de mecanismos, os quais requerem de valores de propriedades termoquímicas fundamentais para poderem ser utilizados, tais como, a energia de ativação, coeficiente de frequência de colisão, etc.

Espera-se que em um futuro próximo, os mecanismos de cinética química da oxidação dos principais hidrocarbonetos de interesse industrial, permitam prever, com uma boa exatidão, os diferentes fenômenos aeroterموquímicos relacionados à combustão.

A seguir, listam-se dois mecanismos de cinética química detalhada que foram empregados nas simulações de combustão turbulenta nos queimadores de Endrud (2000) e Nakamura *et al.* (2011)

A.2.1

Mecanismo GRI-Mech 3.0

O Mecanismo GRI-Mech 3.0, que possui 325 reações químicas elementais e 53 espécies químicas, foi utilizado para gerar a biblioteca de elementos de chama que é utilizada para a simulação da combustão turbulenta do propano com o oxigênio enriquecido com ar.

```
! GRI-Mech Version 3.0 7/30/99 CHEMKIN-II format
! See README30 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;
! WorldWideWeb home page http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ or
! through http://www.gri.org, under 'Basic Research',
! for additional information, contacts, and disclaimer
ELEMENTS
O H C N AR
END
SPECIES
H2      H      O      O2      OH      H2O      HO2      H2O2
C       CH      CH2      CH2(S)  CH3      CH4      CO      CO2
HCO      CH2O      CH2OH      CH3O      CH3OH      C2H      C2H2      C2H3
C2H4      C2H5      C2H6      HCCO      CH2CO      HCCOH      N      NH
NH2      NH3      NNH      NO      NO2      N2O      HNO      CN
HCN      H2CN      HCCN      HCNO      HOCN      HNC      NCO      N2
AR      C3H7      C3H8      CH2CHO      CH3CHO
END
!THERMO
! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file
!END
REACTIONS
2O+M<=>O2+M      1.200E+17      -1.000      .00
H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/
O+H+M<=>OH+M      5.000E+17      -1.000      .00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+H2<=>H+OH      3.870E+04      2.700      6260.00
O+HO2<=>OH+O2      2.000E+13      .000      .00
O+H2O2<=>OH+HO2      9.630E+06      2.000      4000.00
O+CH<=>H+CO      5.700E+13      .000      .00
O+CH2<=>H+HCO      8.000E+13      .000      .00
O+CH2(S)<=>H2+CO      1.500E+13      .000      .00
O+CH2(S)<=>H+HCO      1.500E+13      .000      .00
O+CH3<=>H+CH2O      5.060E+13      .000      .00
O+CH4<=>OH+CH3      1.020E+09      1.500      8600.00
```

O+CO(+M)<=>CO2(+M)	1.800E+10	.000	2385.00
LOW/ 6.020E+14	.000	3000.00/	
H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/ AR/ .50/			
O+HCO<=>OH+CO	3.000E+13	.000	.00
O+HCO<=>H+CO2	3.000E+13	.000	.00
O+CH2O<=>OH+HCO	3.900E+13	.000	3540.00
O+CH2OH<=>OH+CH2O	1.000E+13	.000	.00
O+CH3O<=>OH+CH2O	1.000E+13	.000	.00
O+CH3OH<=>OH+CH2OH	3.880E+05	2.500	3100.00
O+CH3OH<=>OH+CH3O	1.300E+05	2.500	5000.00
O+C2H<=>CH+CO	5.000E+13	.000	.00
O+C2H2<=>H+HCCO	1.350E+07	2.000	1900.00
O+C2H2<=>OH+C2H	4.600E+19	-1.410	28950.00
O+C2H2<=>CO+CH2	6.940E+06	2.000	1900.00
O+C2H3<=>H+CH2CO	3.000E+13	.000	.00
O+C2H4<=>CH3+HCO	1.250E+07	1.830	220.00
O+C2H5<=>CH3+CH2O	2.240E+13	.000	.00
O+C2H6<=>OH+C2H5	8.980E+07	1.920	5690.00
O+HCCO<=>H+2CO	1.000E+14	.000	.00
O+CH2CO<=>OH+HCCO	1.000E+13	.000	8000.00
O+CH2CO<=>CH2+CO2	1.750E+12	.000	1350.00
O2+CO<=>O+CO2	2.500E+12	.000	47800.00
O2+CH2O<=>HO2+HCO	1.000E+14	.000	40000.00
H+O2+M<=>HO2+M	2.800E+18	-.860	.00
O2/ .00/ H2O/ .00/ CO/ .75/ CO2/1.50/ C2H6/1.50/ N2/ .00/ AR/ .00/			
H+2O2<=>HO2+O2	2.080E+19	-1.240	.00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O	11.26E+18	-.760	.00
H+O2+N2<=>HO2+N2	2.600E+19	-1.240	.00
H+O2+AR<=>HO2+AR	7.000E+17	-.800	.00
H+O2<=>O+OH	2.650E+16	-.6707	17041.00
2H+M<=>H2+M	1.000E+18	-1.000	.00
H2/ .00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO2/ .00/ C2H6/3.00/ AR/ .63/			
2H+H2<=>2H2	9.000E+16	-.600	.00
2H+H2O<=>H2+H2O	6.000E+19	-1.250	.00
2H+CO2<=>H2+CO2	5.500E+20	-2.000	.00
H+OH+M<=>H2O+M	2.200E+22	-2.000	.00
H2/ .73/ H2O/3.65/ CH4/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .38/			
H+HO2<=>O+H2O	3.970E+12	.000	671.00
H+HO2<=>O2+H2	4.480E+13	.000	1068.00
H+HO2<=>2OH	0.840E+14	.000	635.00
H+H2O2<=>HO2+H2	1.210E+07	2.000	5200.00
H+H2O2<=>OH+H2O	1.000E+13	.000	3600.00
H+CH<=>C+H2	1.650E+14	.000	.00
H+CH2(+M)<=>CH3(+M)	6.000E+14	.000	.00
LOW / 1.040E+26	-2.760	1600.00/	
TROE/ .5620	91.00	5836.00	8552.00/
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH2(S)<=>CH+H2	3.000E+13	.000	.00
H+CH3(+M)<=>CH4(+M)	13.90E+15	-.534	536.00
LOW / 2.620E+33	-4.760	2440.00/	
TROE/ .7830	74.00	2941.00	6964.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/3.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH4<=>CH3+H2	6.600E+08	1.620	10840.00
H+HCO(+M)<=>CH2O(+M)	1.090E+12	.480	-260.00
LOW / 2.470E+24	-2.570	425.00/	
TROE/ .7824	271.00	2755.00	6570.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+HCO<=>H2+CO	7.340E+13	.000	.00
H+CH2O(+M)<=>CH2OH(+M)	5.400E+11	.454	3600.00
LOW / 1.270E+32	-4.820	6530.00/	
TROE/ .7187	103.00	1291.00	4160.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)	5.400E+11	.454	2600.00
LOW / 2.200E+30	-4.800	5560.00/	
TROE/ .7580	94.00	1555.00	4200.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2O<=>HCO+H2	5.740E+07	1.900	2742.00
H+CH2OH(+M)<=>CH3OH(+M)	1.055E+12	.500	86.00
LOW / 4.360E+31	-4.650	5080.00/	
TROE/ .600	100.00	90000.0	10000.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2OH<=>H2+CH2O	2.000E+13	.000	.00
H+CH2OH<=>OH+CH3	1.650E+11	.650	-284.00
H+CH2OH<=>CH2(S)+H2O	3.280E+13	-.090	610.00
H+CH3O(+M)<=>CH3OH(+M)	2.430E+12	.515	50.00
LOW / 4.660E+41	-7.440	14080.0/	
TROE/ .700	100.00	90000.0	10000.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH3O<=>H+CH2OH	4.150E+07	1.630	1924.00
H+CH3O<=>H2+CH2O	2.000E+13	.000	.00
H+CH3O<=>OH+CH3	1.500E+12	.500	-110.00

H+CH3O<=>CH2(S)+H2O	2.620E+14	-.230	1070.00
H+CH3OH<=>CH2OH+H2	1.700E+07	2.100	4870.00
H+CH3OH<=>CH3O+H2	4.200E+06	2.100	4870.00
H+C2H(+M)<=>C2H2(+M)	1.000E+17	-1.000	.00
LOW / 3.750E+33 -4.800 1900.00/			
TROE/ .6464 132.00 1315.00 5566.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H2(+M)<=>C2H3(+M)	5.600E+12	.000	2400.00
LOW / 3.800E+40 -7.270 7220.00/			
TROE/ .7507 98.50 1302.00 4167.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H3(+M)<=>C2H4(+M)	6.080E+12	.270	280.00
LOW / 1.400E+30 -3.860 3320.00/			
TROE/ .7820 207.50 2663.00 6095.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H3<=>H2+C2H2	3.000E+13	.000	.00
H+C2H4(+M)<=>C2H5(+M)	0.540E+12	.454	1820.00
LOW / 0.600E+42 -7.620 6970.00/			
TROE/ .9753 210.00 984.00 4374.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H4<=>C2H3+H2	1.325E+06	2.530	12240.00
H+C2H5(+M)<=>C2H6(+M)	5.210E+17	-.990	1580.00
LOW / 1.990E+41 -7.080 6685.00/			
TROE/ .8422 125.00 2219.00 6882.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H5<=>H2+C2H4	2.000E+12	.000	.00
H+C2H6<=>C2H5+H2	1.150E+08	1.900	7530.00
H+HCCO<=>CH2(S)+CO	1.000E+14	.000	.00
H+CH2CO<=>HCCO+H2	5.000E+13	.000	8000.00
H+CH2CO<=>CH3+CO	1.130E+13	.000	3428.00
H+HCCOH<=>H+CH2CO	1.000E+13	.000	.00
H2+CO(+M)<=>CH2O(+M)	4.300E+07	1.500	79600.00
LOW / 5.070E+27 -3.420 84350.00/			
TROE/ .9320 197.00 1540.00 10300.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
OH+H2<=>H+H2O	2.160E+08	1.510	3430.00
2OH(+M)<=>H2O2(+M)	7.400E+13	-.370	.00
LOW / 2.300E+18 -.900 -1700.00/			
TROE/ .7346 94.00 1756.00 5182.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2OH<=>O+H2O	3.570E+04	2.400	-2110.00
OH+HO2<=>O2+H2O	1.450E+13	.000	-500.00
DUPLICATE			
OH+H2O2<=>HO2+H2O	2.000E+12	.000	427.00
DUPLICATE			
OH+H2O2<=>HO2+H2O	1.700E+18	.000	29410.00
DUPLICATE			
OH+C<=>H+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH<=>H+HCO	3.000E+13	.000	.00
OH+CH2<=>H+CH2O	2.000E+13	.000	.00
OH+CH2<=>CH+H2O	1.130E+07	2.000	3000.00
OH+CH2(S)<=>H+CH2O	3.000E+13	.000	.00
OH+CH3(+M)<=>CH3OH(+M)	2.790E+18	-1.430	1330.00
LOW / 4.000E+36 -5.920 3140.00/			
TROE/ .4120 195.0 5900.00 6394.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
OH+CH3<=>CH2+H2O	5.600E+07	1.600	5420.00
OH+CH3<=>CH2(S)+H2O	6.440E+17	-1.340	1417.00
OH+CH4<=>CH3+H2O	1.000E+08	1.600	3120.00
OH+CO<=>H+CO2	4.760E+07	1.228	70.00
OH+HCO<=>H2O+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH2O<=>HCO+H2O	3.430E+09	1.180	-447.00
OH+CH2OH<=>H2O+CH2O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH3O<=>H2O+CH2O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH3OH<=>CH2OH+H2O	1.440E+06	2.000	-840.00
OH+CH3OH<=>CH3O+H2O	6.300E+06	2.000	1500.00
OH+C2H<=>H+HCCO	2.000E+13	.000	.00
OH+C2H2<=>H+CH2CO	2.180E-04	4.500	-1000.00
OH+C2H2<=>H+HCCOH	5.040E+05	2.300	13500.00
OH+C2H2<=>C2H+H2O	3.370E+07	2.000	14000.00
OH+C2H2<=>CH3+CO	4.830E-04	4.000	-2000.00
OH+C2H3<=>H2O+C2H2	5.000E+12	.000	.00
OH+C2H4<=>C2H3+H2O	3.600E+06	2.000	2500.00
OH+C2H6<=>C2H5+H2O	3.540E+06	2.120	870.00
OH+CH2CO<=>HCCO+H2O	7.500E+12	.000	2000.00
2HO2<=>O2+H2O2	1.300E+11	.000	-1630.00
DUPLICATE			
2HO2<=>O2+H2O2	4.200E+14	.000	12000.00
DUPLICATE			
HO2+CH2<=>OH+CH2O	2.000E+13	.000	.00
HO2+CH3<=>O2+CH4	1.000E+12	.000	.00

HO2+CH3<=>OH+CH3O	3.780E+13	.000	.00
HO2+CO<=>OH+CO2	1.500E+14	.000	23600.00
HO2+CH2O<=>HCO+H2O2	5.600E+06	2.000	12000.00
C+O2<=>O+CO	5.800E+13	.000	576.00
C+CH2<=>H+C2H	5.000E+13	.000	.00
C+CH3<=>H+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH+O2<=>O+HCO	6.710E+13	.000	.00
CH+H2<=>H+CH2	1.080E+14	.000	3110.00
CH+H2O<=>H+CH2O	5.710E+12	.000	-755.00
CH+CH2<=>H+C2H2	4.000E+13	.000	.00
CH+CH3<=>H+C2H3	3.000E+13	.000	.00
CH+CH4<=>H+C2H4	6.000E+13	.000	.00
CH+CO(+M)<=>HCCO(+M)	5.000E+13	.000	.00
LOW / 2.690E+28 -3.740 1936.00/			
TROE/ .5757 237.00 1652.00 5069.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH+CO2<=>HCO+CO	1.900E+14	.000	15792.00
CH+CH2O<=>H+CH2CO	9.460E+13	.000	-515.00
CH+HCCO<=>CO+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH2+O2<=>OH+H+CO	5.000E+12	.000	1500.00
CH2+H2<=>H+CH3	5.000E+05	2.000	7230.00
2CH2<=>H2+C2H2	1.600E+15	.000	11944.00
CH2+CH3<=>H+C2H4	4.000E+13	.000	.00
CH2+CH4<=>2CH3	2.460E+06	2.000	8270.00
CH2+CO(+M)<=>CH2CO(+M)	8.100E+11	.500	4510.00
LOW / 2.690E+33 -5.110 7095.00/			
TROE/ .5907 275.00 1226.00 5185.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+HCCO<=>C2H3+CO	3.000E+13	.000	.00
CH2(S)+N2<=>CH2+N2	1.500E+13	.000	600.00
CH2(S)+AR<=>CH2+AR	9.000E+12	.000	600.00
CH2(S)+O2<=>H+OH+CO	2.800E+13	.000	.00
CH2(S)+O2<=>CO+H2O	1.200E+13	.000	.00
CH2(S)+H2<=>CH3+H	7.000E+13	.000	.00
CH2(S)+H2O(+M)<=>CH3OH(+M)	4.820E+17	-1.160	1145.00
LOW / 1.880E+38 -6.360 5040.00/			
TROE/ .6027 208.00 3922.00 10180.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
CH2(S)+H2O<=>CH2+H2O	3.000E+13	.000	.00
CH2(S)+CH3<=>H+C2H4	1.200E+13	.000	-570.00
CH2(S)+CH4<=>2CH3	1.600E+13	.000	-570.00
CH2(S)+CO<=>CH2+CO	9.000E+12	.000	.00
CH2(S)+CO2<=>CH2+CO2	7.000E+12	.000	.00
CH2(S)+CO2<=>CO+CH2O	1.400E+13	.000	.00
CH2(S)+C2H6<=>CH3+C2H5	4.000E+13	.000	-550.00
CH3+O2<=>O+CH3O	3.560E+13	.000	30480.00
CH3+O2<=>OH+CH2O	2.310E+12	.000	20315.00
CH3+H2O2<=>HO2+CH4	2.450E+04	2.470	5180.00
2CH3(+M)<=>C2H6(+M)	6.770E+16	-1.180	654.00
LOW / 3.400E+41 -7.030 2762.00/			
TROE/ .6190 73.20 1180.00 9999.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2CH3<=>H+C2H5	6.840E+12	.100	10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO	2.648E+13	.000	.00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.320E+03	2.810	5860.00
CH3+CH3OH<=>CH2OH+CH4	3.000E+07	1.500	9940.00
CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	1.000E+07	1.500	9940.00
CH3+C2H4<=>C2H3+CH4	2.270E+05	2.000	9200.00
CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	6.140E+06	1.740	10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O	1.500E+18	-1.000	17000.00
HCO+M<=>H+CO+M	1.870E+17	-1.000	17000.00
H2/2.00/ H2O/.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
HCO+O2<=>HO2+CO	13.45E+12	.000	400.00
CH2OH+O2<=>HO2+CH2O	1.800E+13	.000	900.00
CH3O+O2<=>HO2+CH2O	4.280E-13	7.600	-3530.00
C2H+O2<=>HCO+CO	1.000E+13	.000	-755.00
C2H+H2<=>H+C2H2	5.680E+10	0.900	1993.00
C2H3+O2<=>HCO+CH2O	4.580E+16	-1.390	1015.00
C2H4(+M)<=>H2+C2H2(+M)	8.000E+12	.440	86770.00
LOW / 1.580E+51 -9.300 97800.00/			
TROE/ .7345 180.00 1035.00 5417.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
C2H5+O2<=>HO2+C2H4	8.400E+11	.000	3875.00
HCCO+O2<=>OH+2CO	3.200E+12	.000	854.00
2HCCO<=>2CO+C2H2	1.000E+13	.000	.00
N+N<=>N2+O	2.700E+13	.000	355.00
N+O2<=>NO+O	9.000E+09	1.000	6500.00
N+OH<=>NO+H	3.360E+13	.000	385.00
N2O+O<=>N2+O2	1.400E+12	.000	10810.00
N2O+O<=>2NO	2.900E+13	.000	23150.00
N2O+H<=>N2+OH	3.870E+14	.000	18880.00

N2O+OH<=>N2+HO2	2.000E+12	.000	21060.00
N2O(+M)<=>N2+O(+M)	7.910E+10	.000	56020.00
LOW / 6.370E+14 .000 56640.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .625/			
HO2+NO<=>NO2+OH	2.110E+12	.000	-480.00
NO+O+M<=>NO2+M	1.060E+20	-1.410	.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NO2+O<=>NO+O2	3.900E+12	.000	-240.00
NO2+H<=>NO+OH	1.320E+14	.000	360.00
NH+O<=>NO+H	4.000E+13	.000	.00
NH+H<=>N+H2	3.200E+13	.000	330.00
NH+OH<=>HNO+H	2.000E+13	.000	.00
NH+OH<=>N+H2O	2.000E+09	1.200	.00
NH+O2<=>HNO+O	4.610E+05	2.000	6500.00
NH+O2<=>NO+OH	1.280E+06	1.500	100.00
NH+N<=>N2+H	1.500E+13	.000	.00
NH+H2O<=>HNO+H2	2.000E+13	.000	13850.00
NH+NO<=>N2+OH	2.160E+13	-.230	.00
NH+NO<=>N2O+H	3.650E+14	-.450	.00
NH2+O<=>OH+NH	3.000E+12	.000	.00
NH2+O<=>H+HNO	3.900E+13	.000	.00
NH2+H<=>NH+H2	4.000E+13	.000	3650.00
NH2+OH<=>NH+H2O	9.000E+07	1.500	-460.00
NNH<=>N2+H	3.300E+08	.000	.00
NNH+M<=>N2+H+M	1.300E+14	-.110	4980.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NNH+O2<=>HO2+N2	5.000E+12	.000	.00
NNH+O<=>OH+N2	2.500E+13	.000	.00
NNH+O<=>NH+NO	7.000E+13	.000	.00
NNH+H<=>H2+N2	5.000E+13	.000	.00
NNH+OH<=>H2O+N2	2.000E+13	.000	.00
NNH+CH3<=>CH4+N2	2.500E+13	.000	.00
H+NO+M<=>HNO+M	4.480E+19	-1.320	740.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HNO+O<=>NO+OH	2.500E+13	.000	.00
HNO+H<=>H2+NO	9.000E+11	.720	660.00
HNO+OH<=>NO+H2O	1.300E+07	1.900	-950.00
HNO+O2<=>HO2+NO	1.000E+13	.000	13000.00
CN+O<=>CO+N	7.700E+13	.000	.00
CN+OH<=>NCO+H	4.000E+13	.000	.00
CN+H2O<=>HCN+OH	8.000E+12	.000	7460.00
CN+O2<=>NCO+O	6.140E+12	.000	-440.00
CN+H2<=>HCN+H	2.950E+05	2.450	2240.00
NCO+O<=>NO+CO	2.350E+13	.000	.00
NCO+H<=>NH+CO	5.400E+13	.000	.00
NCO+OH<=>NO+H+CO	0.250E+13	.000	.00
NCO+N<=>N2+CO	2.000E+13	.000	.00
NCO+O2<=>NO+CO2	2.000E+12	.000	20000.00
NCO+M<=>N+CO+M	3.100E+14	.000	54050.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NCO+NO<=>N2O+CO	1.900E+17	-1.520	740.00
NCO+NO<=>N2+CO2	3.800E+18	-2.000	800.00
HCN+M<=>H+CN+M	1.040E+29	-3.300	126600.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCN+O<=>NCO+H	2.030E+04	2.640	4980.00
HCN+O<=>NH+CO	5.070E+03	2.640	4980.00
HCN+O<=>CN+OH	3.910E+09	1.580	26600.00
HCN+OH<=>HOCN+H	1.100E+06	2.030	13370.00
HCN+OH<=>HNCO+H	4.400E+03	2.260	6400.00
HCN+OH<=>NH2+CO	1.600E+02	2.560	9000.00
H+HCN(+M)<=>H2CN(+M)	3.300E+13	.000	.00
LOW / 1.400E+26 -3.400 1900.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H2CN+N<=>N2+CH2	6.000E+13	.000	400.00
C+N2<=>CN+N	6.300E+13	.000	46020.00
CH+N2<=>HCN+N	3.120E+09	0.880	20130.00
CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)	3.100E+12	.150	.00
LOW / 1.300E+25 -3.160 740.00/			
TROE/ .6670 235.00 2117.00 4536.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ 1.0/			
CH2+N2<=>HCN+NH	1.000E+13	.000	74000.00
CH2(S)+N2<=>NH+HCN	1.000E+11	.000	65000.00
C+NO<=>CN+O	1.900E+13	.000	.00
C+NO<=>CO+N	2.900E+13	.000	.00
CH+NO<=>HCN+O	4.100E+13	.000	.00
CH+NO<=>H+NCO	1.620E+13	.000	.00
CH+NO<=>N+HCO	2.460E+13	.000	.00
CH2+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00
CH2+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH2(S)+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00

CH2(S)+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2(S)+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH3+NO<=>HCN+H2O	9.600E+13	.000	28800.00
CH3+NO<=>H2CN+OH	1.000E+12	.000	21750.00
HCNN+O<=>CO+H+N2	2.200E+13	.000	.00
HCNN+O<=>HCN+NO	2.000E+12	.000	.00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+H<=>CH2+N2	1.000E+14	.000	.00
HNCO+O<=>NH+CO2	9.800E+07	1.410	8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO	1.500E+08	1.570	44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH	2.200E+06	2.110	11400.00
HNCO+H<=>NH2+CO	2.250E+07	1.700	3800.00
HNCO+H<=>H2+NCO	1.050E+05	2.500	13300.00
HNCO+OH<=>NCO+H2O	3.300E+07	1.500	3600.00
HNCO+OH<=>NH2+CO2	3.300E+06	1.500	3600.00
HNCO+M<=>NH+CO+M	1.180E+16	.000	84720.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCNO+H<=>H+HNCO	2.100E+15	-.690	2850.00
HCNO+H<=>OH+HCN	2.700E+11	.180	2120.00
HCNO+H<=>NH2+CO	1.700E+14	-.750	2890.00
HOCN+H<=>H+HNCO	2.000E+07	2.000	2000.00
HCCO+NO<=>HCNO+CO	0.900E+13	.000	.00
CH3+N<=>H2CN+H	6.100E+14	-.310	290.00
CH3+N<=>HCN+H2	3.700E+12	.150	-90.00
NH3+H<=>NH2+H2	5.400E+05	2.400	9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O	5.000E+07	1.600	955.00
NH3+O<=>NH2+OH	9.400E+06	1.940	6460.00
NH+CO2<=>HNO+CO	1.000E+13	.000	14350.00
CN+NO2<=>NCO+NO	6.160E+15	-0.752	345.00
NCO+NO2<=>N2O+CO2	3.250E+12	.000	-705.00
N+CO2<=>NO+CO	3.000E+12	.000	11300.00
O+CH3=>H+H2+CO	3.370E+13	.000	.00
O+C2H4<=>H+CH2CHO	6.700E+06	1.830	220.00
O+C2H5<=>H+CH3CHO	1.096E+14	.000	.00
OH+HO2<=>O2+H2O	0.500E+16	.000	17330.00
DUPLICATE			
OH+CH3=>H2+CH2O	8.000E+09	.500	-1755.00
CH+H2(+M)<=>CH3(+M)	1.970E+12	.430	-370.00
LOW/ 4.820E+25 -2.80 590.0 /			
TROE/ .578 122.0 2535.0 9365.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+O2=>2H+CO2	5.800E+12	.000	1500.00
CH2+O2<=>O+CH2O	2.400E+12	.000	1500.00
CH2+CH2=>2H+C2H2	2.000E+14	.000	10989.00
CH2(S)+H2O=>H2+CH2O	6.820E+10	.250	-935.00
C2H3+O2<=>O+CH2CHO	3.030E+11	.290	11.00
C2H3+O2<=>HO2+C2H2	1.337E+06	1.610	-384.00
O+CH3CHO<=>OH+CH2CHO	2.920E+12	.000	1808.00
O+CH3CHO=>OH+CH3+CO	2.920E+12	.000	1808.00
O2+CH3CHO=>HO2+CH3+CO	3.010E+13	.000	39150.00
H+CH3CHO<=>CH2CHO+H2	2.050E+09	1.160	2405.00
H+CH3CHO=>CH3+H2+CO	2.050E+09	1.160	2405.00
OH+CH3CHO=>CH3+H2O+CO	2.343E+10	0.730	-1113.00
HO2+CH3CHO=>CH3+H2O2+CO	3.010E+12	.000	11923.00
CH3+CH3CHO=>CH3+CH4+CO	2.720E+06	1.770	5920.00
H+CH2CO(+M)<=>CH2CHO(+M)	4.865E+11	0.422	-1755.00
LOW/ 1.012E+42 -7.63 3854.0 /			
TROE/ 0.465 201.0 1773.0 5333.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+CH2CHO=>H+CH2+CO2	1.500E+14	.000	.00
O2+CH2CHO=>OH+CO+CH2O	1.810E+10	.000	.00
O2+CH2CHO=>OH+2HCO	2.350E+10	.000	.00
H+CH2CHO<=>CH3+HCO	2.200E+13	.000	.00
H+CH2CHO<=>CH2CO+H2	1.100E+13	.000	.00
OH+CH2CHO<=>H2O+CH2CO	1.200E+13	.000	.00
OH+CH2CHO<=>HCO+CH2OH	3.010E+13	.000	.00
CH3+C2H5(+M)<=>C3H8(+M)	.9430E+13	.000	.00
LOW/ 2.710E+74 -16.82 13065.0 /			
TROE/ .1527 291.0 2742.0 7748.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+C3H8<=>OH+C3H7	1.930E+05	2.680	3716.00
H+C3H8<=>C3H7+H2	1.320E+06	2.540	6756.00
OH+C3H8<=>C3H7+H2O	3.160E+07	1.800	934.00
C3H7+H2O2<=>HO2+C3H8	3.780E+02	2.720	1500.00
CH3+C3H8<=>C3H7+CH4	0.903E+00	3.650	7154.00
CH3+C2H4(+M)<=>C3H7(+M)	2.550E+06	1.600	5700.00
LOW/ 3.00E+63 -14.6 18170. /			
TROE/ .1894 277.0 8748.0 7891.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+C3H7<=>C2H5+CH2O	9.640E+13	.000	.00

```
H+C3H7(+M)<=>C3H8(+M) 3.613E+13 .000 .00
LOW/ 4.420E+61 -13.545 11357.0/
TROE/ .315 369.0 3285.0 6667.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C3H7<=>CH3+C2H5 4.060E+06 2.190 890.00
OH+C3H7<=>C2H5+CH2OH 2.410E+13 .000 .00
HO2+C3H7<=>O2+C3H8 2.550E+10 0.255 -943.00
HO2+C3H7=>OH+C2H5+CH2O 2.410E+13 .000 .00
CH3+C3H7<=>2C2H5 1.927E+13 -0.320 .00
END
```

A.2.2

Mecanismo Wisconsin

O mecanismo de Wisconsin foi o único capaz de gerar a biblioteca de elementos de chama que necessita o FluentTM para a simulação da combustão turbulenta do n-heptano (surrogate do querosene) com o oxigênio. Isto foi possível, devido ao baixo número de reações e espécies químicas deste mecanismo “esqueleto”.

```
elements
h c o n
end

species
nc7h16 o2 n2 co2 h2o co h2 oh h2o2 ho2 h o
ch3o ch2o hco ch2 ch3 ch4 c2h3 c2h4 c2h5 c3h4 c3h5 c3h6 c3h7
c7h15-2 c7h15o2 c7ket12 c5h11co
end

reactions
nc7h16 + h = c7h15-2 + h2 4.380e+07 2.0 4760.0
nc7h16 + oh = c7h15-2 + h2o 9.700e+09 1.3 1690.0
nc7h16 + ho2 = c7h15-2 + h2o2 1.650e+13 0.0 16950.0
nc7h16 + o2 = c7h15-2 + ho2 2.000e+15 0.0 47380.0
c7h15-2 + o2 = c7h15o2 1.560e+12 0.0 0.0
c7h15o2 + o2 = c7ket12 + oh 4.500E+14 0.0 18232.712
c7ket12 = c5h11co + ch2o + oh 9.530e+14 0.0 4.110e+4
c5h11co = c2h4 + c3h7 + co 9.84E+15 0.0 4.02E+04
c7h15-2 = c2h5 + c2h4 + c3h6 7.045E+14 0.0 3.46E+04
c3h7 = c2h4 + ch3 9.600e+13 0.0 30950.0
c3h7 = c3h6 + h 1.250e+14 0.0 36900.0
c3h6 + ch3 = c3h5 + ch4 9.000e+12 0.0 8480.0
c3h5 + o2 = c3h4 + ho2 6.000e+11 0.0 10000.0
c3h4 + oh = c2h3 + ch2o 1.000e+12 0.0 0.0
c3h4 + oh = c2h4 + hco 1.000e+12 0.0 0.0
ch3 + ho2 = ch3o + oh 5.000e+13 0.00 0.
ch3 + oh = ch2 + h2o 7.500e+06 2.00 5000.
ch2 + oh = ch2o + h 2.500e+13 0.00 0.
ch2 + o2 = hco + oh 4.300e+10 0.00 -500.
ch2 + o2 = co2 + h2 6.900e+11 0.00 500.
ch2 + o2 = co + h2o 2.000e+10 0.00 -1000.
ch2 + o2 = ch2o + o 5.000e+13 0.00 9000.
ch2 + o2 = co2 + h + h 1.600e+12 0.00 1000.
ch2 + o2 = co + oh + h 8.600e+10 0.00 -500.
ch3o + co = ch3 + co2 1.570e+14 0.00 11800.
co + oh = co2 + h 8.987e+07 1.38 5232.877
o + oh = o2 + h 4.000e+14 -0.50 0.
h + ho2 = oh + oh 1.700e+14 0.0 875.
oh + oh = o + h2o 6.000e+08 1.30 0.
h + o2 + m = ho2 + m 3.600e+17 -0.72 0.
h2o/21./ co2/5.0/ h2/3.3/ co/2.0/
h2o2 + m = oh + oh + m 1.000e+16 0.00 45500.
h2o/21./ co2/5.0/ h2/3.3/ co/2.0/
h2 + oh = h2o + h 1.170e+09 1.30 3626.
ho2 + ho2 = h2o2 + o2 3.000e+12 0.00 0.
ch2o + oh = hco + h2o 5.563e+10 1.095 -76.517
ch2o + ho2 = hco + h2o2 3.000e+12 0.00 8000.
hco + o2 = ho2 + co 3.300e+13 -0.40 0.
hco + m = h + co + m 1.591E+18 0.95 56712.329
ch3 + ch3o = ch4 + ch2o 4.300e+14 0.00 0.
c2h4 + oh = ch2o + ch3 6.000e+13 0.0 960.
```

```

c2h4 + oh      = c2h3 + h2o      8.020 e+13  0.00  5955.
c2h3 + o2      = ch2o + hco      4.000 e+12  0.00  -250.
c2h3 + hco     = c2h4 + co       6.034 e+13  0.0   0.
c2h5 + o2      = c2h4 + ho2     2.000 e+10  0.0  -2200.
ch4 + o2       = ch3 + ho2      7.900 e+13  0.00  56000.
oh + ho2       = h2o + o2       7.50 E+12   0.0   0.
ch3 + o2       = ch2o + oh      3.80 E+11   0.0   9000.
ch4 + h        = ch3 + h2       6.600 e+08  1.60  10840.
ch4 + oh       = ch3 + h2o     1.600 e+06  2.10  2460.
ch4 + o        = ch3 + oh      1.020 e+09  1.50  8604.
ch4 + ho2      = ch3 + h2o2     9.000 e+11  0.00  18700.
ch4 + ch2      = ch3 + ch3      4.000 e+12  0.00  -570.
c3h6          = c2h3 + ch3      3.150 e+15  0.0  85500.0
end

```

B

Dados de Entrada e Saída do Programa Radcal e Interface em UDF para o Acoplamento Radcal/FluentTM

A seguir, será detalhada a especificação dos parâmetros de entrada no arquivo de entrada RC.dat, de forma que o Radcal calcule a intensidade da radiação espectral e as demais propriedades radiantes espectrais. Da mesma forma, serão descritos os parâmetros de saída e a maneira como o Radcal imprime no arquivo de saída RCOUT.dat, quando um processamento é bem sucedido.

B.1

Parâmetros de Entrada

Os dados de entrada são fornecidos no arquivo RC.dat, o qual possui formato livre. Nele, é permitido, na primeira linha, a entrada de um dado que representa o número de elementos, NPT, (cujo máximo 50), no qual o caminho óptico, s , é dividido.

A segunda linha lista o tamanho do primeiro elemento DD(1) em metros, seguido pela sua temperatura T(1) em Kelvin, e as pressões parciais (em kPa) do dióxido de carbono, PP(1,1), vapor de água, PP(1,2), metano, PP(1,3), monóxido de carbono, PP(1,4), oxigênio, PP(1,5) e nitrogênio, PP(1,6). A última entrada na segunda linha corresponde à fração volumétrica da fuligem no primeiro elemento, W(1). É importante ressaltar que o primeiro elemento é localizado no ponto do espaço em que a intensidade da radiação espectral é desejada, e não na vizinhança do volume computacional.

A terceira linha contém informações análogas à primeira, porém, para o segundo elemento, e assim por diante, para todos os NPT elementos. Finalmente, na linha NPT+2 são fornecidos a temperatura da parede, TWALL, e os números de onda mínimo e máximo (em cm^{-1}), OMMIN e OMMAX. Cabe ressaltar que as propriedades radiantes dos gases e a fuligem para números de onda, ω , menores que 50 cm^{-1} ou maiores que 10000 cm^{-1} são negligenciados.

A Figura B.1 mostra uma representação esquemática da maneira como o software Radcal discretiza o domínio espacial, e como os parâmetros de entrada são localizados, tanto para um sistema não homogêneo, como para o

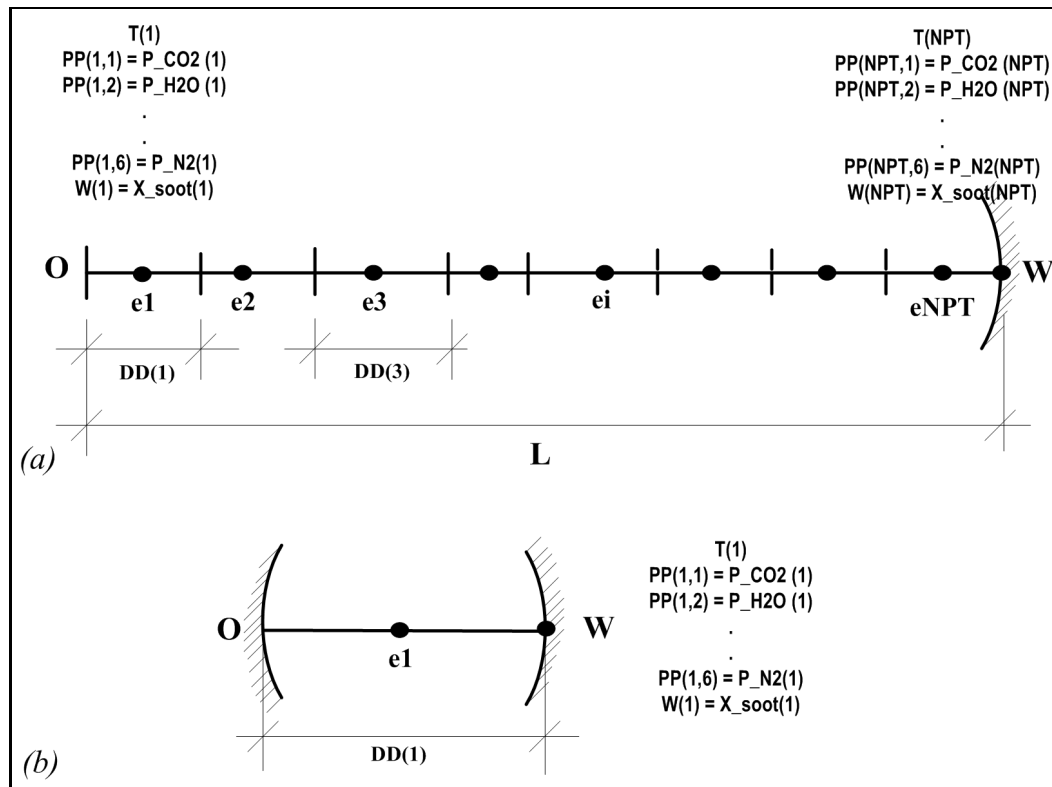


Figura B.1: Discretização considerada pelo programa Radcal para: (a) sistemas não homogêneos e (b) sistemas homogêneos e isotérmicos.

caso de um sistema homogêneo e isotérmico. Para fins de exemplo, apresentam-se dados que são fornecidos ao arquivo RC.dat como parâmetros de entrada necessários para cálculos relativos à radiação espectral, para ambos os tipos de sistemas, homogêneos e não homogêneos.

B.1.1

RC.dat – Arquivo de Entrada do Radcal

A seguir, mostram-se dois exemplos de dados de entrada, os quais descrevem as condições iniciais de problemas típicos que o Radcal é capaz de resolver. Estes dados de entrada foram retirados do relatório técnico 1042 da NIST (Grosshandler, 1993)

Como se pode perceber na Tabela B.1, a primeira linha indica o número de elementos. Neste exemplo, o valor de 1 denota um problema de radiação térmica de uma meio participante homogêneo e isotérmico. Na segunda linha, a primeira coluna é a espessura óptica do elemento, $L = 0,5$ m. Na terceira coluna é colocada a temperatura do meio, 320 K. As colunas seguintes correspondem aos dados de entrada das pressões parciais de dióxido de carbono, vapor de água, monóxido de carbono, oxigênio, nitrogênio iguais a 0,001, 0,001, 0,001, 0,001, 20,20 e 80,80 kPa, respectivamente, e à fração

Tabela B.1: Dados de entrada típicos do arquivo RC.dat para o caso de um sistema isotérmico e homogêneo (Grosshandler, 1993).

1
0.5 320.0 0.001 0.001 0.001 0.001 20.20 80.80 1.0E-8
0.0 400.0 8000.0
0

volumétrica da fuligem, que é de $1,0 \times 10^{-8}$. Na terceira linha, a primeira coluna é a temperatura da parede, 0 K, enquanto que nas segunda e a terceira colunas encontram-se os números de onda, $\omega = \lambda^{-1}$, mínimo e máximo, 400 e 8000 cm^{-1} , respectivamente. Finalmente na quarta linha o valor 0 indica o fim do arquivo.

Tabela B.2: Dados de entrada típicos do arquivo RC.dat para o caso de um sistema não-isotérmico (Grosshandler, 1993).

5
0.30 1770.0 0.1667 0.1667 0.0 0.0 0.0 0.666 0.0
0.10 1637.0 0.1520 0.1520 0.0 0.0 0.0 0.696 0.0
0.10 1438.0 0.1300 0.1300 0.0 0.0 0.0 0.740 0.0
0.10 1158.0 0.0992 0.0992 0.0 0.0 0.0 0.802 0.0
0.05 899.0 0.0705 0.0705 0.0 0.0 0.0 0.857 0.0
0.0 50.0 10000.0
0

O arquivo de entrada mostrado na Tabela B.2 para o caso de um meio não homogêneo e não isotérmico é similar àquele da Tabela B.1 para um meio homogêneo e isotérmico. De forma geral, as linhas apresentadas nas Tabelas B.1 e B.2 correspondem a,

- Linha 1: número de elementos homogêneos.
- Linha 2: comprimento da célula (m), temperatura (K), pressões parciais de CO_2 (kPa), H_2O (kPa), CH_4 (kPa), CO (kPa), O_2 (kPa), N_2 (kPa) e fuligem (kPa).
- Linhas 3 até $n + 1$: similar à linha 2 para o resto dos elementos.
- Linha $n + 2$: temperatura da parede (K), comprimento de onda mínimo (cm^{-1}), comprimento de onda máximo (cm^{-1}).
- Linha $n + 3$: critério de fim do arquivo (igual a 0), ou número de elementos homogêneos para o caso seguinte.

B.2

Parâmetros de Saída

Os resultados do cálculo realizado pelo Radcal podem ser encontrados no arquivo de saída RCOUT.DAT, onde as condições de entrada fornecidas no arquivo RC.dat, são resumidas em forma tabelada, seguido pelo fluxo total de energia radiante, com unidades de $\text{W/m}^2 \text{ sr}$, que incide sobre o centro do elemento 1.

Assim, a intensidade de radiação espectral, (QW(K) para I_λ), e a transmitância (ou transmissividade) espectral, (TTAU(K) para τ_λ) são listadas para cada comprimento de onda (LAMBDA(K) para λ). O número de comprimentos de onda calculados é limitado a 600, e os intervalos de comprimentos de onda variam entre $0,005 \mu\text{m}$ a $1 \mu\text{m}$ e $18,2 \mu\text{m}$ a $200 \mu\text{m}$.

Para o caso especial de caminho óptico uniforme (avaliado sobre o comprimento médio do feixe, L_m), o Radcal, além de calcular a intensidade espectral e a transmissividade espectral em todo o domínio de comprimento de onda prescrito, também calcula o coeficiente médio de absorção incidente, $a_I(L_m)$, o coeficiente médio de emissão de Planck, $a_P(L_m)$, e o coeficiente médio de absorção/emissão efetivo, $a_E(L_m)$. O Anexo B.2.1 mostra resultados típicos calculados pelo Radcal para os dados de entrada colocados no Anexo B.1.1

B.2.1

RCOUT.dat – Arquivo de Saída Criado pelo Radcal Após a Simulação

A Figura B.2 apresenta mediante o arquivo RCOUT.dat, os resultados típicos calculados pelo Radcal, das propriedades radiantes da mistura isotérmica e homogênea descrita pela Tabela B.1.

A transmitância espectral, função do comprimento de onda, é mostrada na Figura B.3, cujos dados foram obtidos daqueles apresentados no arquivo RCOUT.dat da Figura B.1.

Radial Profiles									

Partial Pressures, kPa									
J	dist,m	temp,K	CO2	H2O	CH4	CO	O2	N2	FV
1	.5000	320.	.001	.001	.001	.001	20.200	80.800	.1000E-07
wall		295.							
Total directional radiated energy flux = .136910E+03 Watts/m-2/strad									
Spectral Intensity Distribution, Watts/m-2/μm/strad									

wavelength	intensity	tau	wavelength	intensity	tau				
3.125	.6838E-01	.9887	28.169	.1445E+01	.9984				
3.175	.8059E-01	.9888	28.986	.1329E+01	.9984				
3.200	.8745E-01	.9888	29.412	.1273E+01	.9984				
3.252	.1029E+00	.9889	30.303	.1165E+01	.9983				
3.361	.1417E+00	.9893	32.258	.9646E+00	.9981				
3.419	.1660E+00	.9896	33.333	.8720E+00	.9980				
3.448	.1795E+00	.9897	33.898	.8277E+00	.9979				
3.509	.2098E+00	.9900	35.088	.7430E+00	.9978				
3.540	.2266E+00	.9901	35.714	.7026E+00	.9977				
3.636	.2852E+00	.9904	37.736	.5893E+00	.9974				
3.704	.3318E+00	.9906	39.216	.5204E+00	.9972				
3.738	.3577E+00	.9907	40.000	.4879E+00	.9970				
3.846	.4468E+00	.9909	42.553	.3979E+00	.9967				
3.922	.5170E+00	.9911	44.444	.3442E+00	.9964				
3.960	.5558E+00	.9912	45.455	.3191E+00	.9964				
4.040	.6413E+00	.9914	47.619	.2726E+00	.9962				
4.082	.6884E+00	.9915	48.780	.2511E+00	.9961				
4.167	.7919E+00	.9916	51.282	.2115E+00	.9960				
4.211	.8621E+00	.9809	52.632	.1933E+00	.9960				
4.301	.9969E+00	.9746	55.556	.1601E+00	.9960				
4.348	.1043E+01	.9907	57.143	.1451E+00	.9960				
4.444	.1190E+01	.9922	60.606	.1179E+00	.9961				
4.494	.1271E+01	.9922	62.500	.1057E+00	.9961				
4.598	.1449E+01	.9910	66.667	.8390E-01	.9963				
4.651	.1543E+01	.9920	68.966	.7426E-01	.9964				
4.819	.1861E+01	.9925	76.923	.4997E-01	.9969				
4.878	.1977E+01	.9928	80.000	.4329E-01	.9970				
5.000	.2229E+01	.9930	86.957	.3185E-01	.9975				
The effective absorption coef. is .894161E-02/m									
The Planck-mean absorption coef. is .673106E-02/m									
The wall-incident mean is .632162E-02/m									

Figura B.2: Dados de saída do RCOUT.dat fornecido pela simulação do Radcal para as condições iniciais descrito pela Tabela A.1 (Grosshandler, 1993).

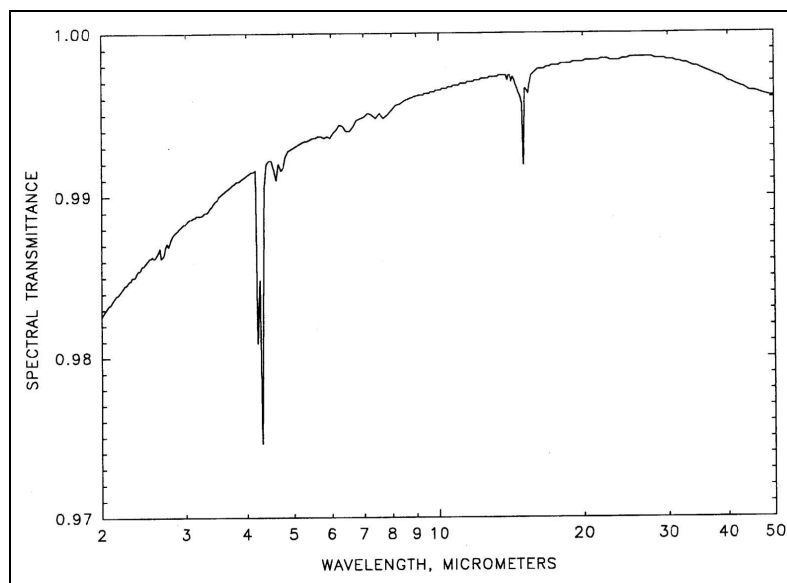


Figura B.3: Transmitância espectral de um sistema de 0,5 m de diâmetro a 1 atm e 320 K, para uma mistura de gases composto por CO_2 , H_2O , CH_4 , CO , e fuligem (Grosshandler, 1993).

B.3

Implementação da Interface em UDF para o Acoplamento entre o Radcal e o FluentTM

A presente rotina corresponde à interface desenvolvida na UDF que permite acoplar o Radcal com o FluentTM.

```

/* ***** */
/*                               Arquivo radcal-fspecies.c                               */
/* Calcula o Coeficiente de Radiação Espectral sobre varias faixas de                   */
/* comprimento de onda, para isto, obtém-se a ajuda do software RADCAL                 */
/* desenvolvido em FORTRAN                                                           */
/* ***** */

#include "udf.h"
#include "pdf_props.h"
#include "materials.h"
#include "sg_mem.h"
#include "mem.h"
#include <math.h>

/* SUBROTINA FORTRAN DO RADCAL */
/* ----- */
extern real __radcalv_MOD_radcal(real *dd, real *rct, real *speciel,
    real *specie2, real *specie3, real *specie4, real *specie5, real *twall,
    real *ommin, real *ommax, real *nom2);

DEFINE_WSGGM_ABS_COEFF(radcalfortran2, c, t, xi, p_t, s, soot_conc, Tcell, nb,
    ab_wsggm, ab_soot)
{
    /* IDENTIFICACAO DOS INDICES DAS ESPECIES */
    /* ----- */
    Material *m = THREAD_MATERIAL(t);

    int i_co2 = mixture_specie_index(m, "co2");
    int i_h2o = mixture_specie_index(m, "h2o");
    int i_n2 = mixture_specie_index(m, "n2");
    int i_o2 = mixture_specie_index(m, "o2");
    int i_co = mixture_specie_index(m, "co");
    int i_c3h8 = mixture_specie_index(m, "c3h8");

    /* frac.mass.ful.(Y-soot)=conc.mass.ful.(M ou soot_conc)/dens.gas(rho_gas) */
    /* frac.vol.ful.(svf) = frac.mass.ful.(Y-soot)*dens.gas(rho_gas)/dens.ful.(rho-soot) */

    /* POR TANTO */
    /* frac.vol.ful.(svf) = conc.mass.ful.(M ou soot_conc)/dens.ful.(rho-soot) */

    /* Converter em fracao volumetrica */
    real svf = soot_conc / (2000); /* Armazena a frac. vol. da ful. a ser usado como dado */

    /* DECLARACAO E LEITURA DAS VARIÁVEIS QUE PRECISA O RADCAL PARA GASES */
    /* ----- */
    real rct = C_T(c, t); /* Temperatura lida desde o fluent para assignar a variável T */
    real y_co2 = Pdf_Yi(c, t, i_co2); /* Fracao máss. dióxido de carbono lida desde fluent */
    real y_h2o = Pdf_Yi(c, t, i_h2o); /* Fracao mássica da água lida desde o fluent */
    real y_n2 = Pdf_Yi(c, t, i_n2); /* Fracao mássica do nitrogênio lida pelo o fluent */
    real y_o2 = Pdf_Yi(c, t, i_o2); /* Fracao mássica do oxigênio lida desde o fluent */
    real y_c3h8 = Pdf_Yi(c, t, i_c3h8); /* Fracao mássica do oxigênio lida desde o fluent */

    /* CALCULO DO PESO MOLECULAR MEDIO */
    /* ----- */
    real PM_medio = pow(y_co2/44 + y_h2o/18 + y_n2/28 + y_o2/16 + y_c3h8/44, -1);

    /* CONVERSAO DOS GASES A FRACAO MOLAR */
    /* ----- */
    real speciel = y_co2*PM_medio/44; /* Armaz. frac. molar CO2 do fluent e assigna ao radcal */

```

```

real specie2 = y_h2o*PM_medio/18; /* Armaz. frac. molar H2O do fluent e assigna ao radcal */
real specie3 = 0.0; /* Armaz. frac. molar n-C7H14 do fluent e assigna para radcal */
real specie4 = 0.0; /* Armaz. frac. molar CO e assigna para o radcal */
real specie5 = svf; /* Armaz. frac. molar da FULIGEM do fluent e assigna Para o radcal */

/* DADOS DE ENTRADA DO NUMEROS DE ONDA E TEMPERATURA DA PAREDE */
/* ----- */
real twall = 500.0; /* temperatura da parede em K */
real dd = 0.1892; /* caminho optico lido pelo radcal. CONFIG. CIL. = 0.946x0.200 */
real ommin; /* corresponde a um comprimento de onda maximo 5 microm */
real ommax; /* corresponde a um comprimento de onda minimo 4 microm */
real nom2;

/* Assignacao das variaves lidos do FLUENT para executar o RADCAL */
/* ----- */
/* [2, 2.62, 2.94, 3.57, 4.17, 4.70, 7.0, 8.62 10 20 40 80 100] */
/* real OMEGAMIN [8] = {1000, 1160, 1420, 2130, 2400, 2800, 3400, 3820}; */
/* real OMEGAMAX [8] = {1160, 1420, 2130, 2400, 2800, 3400, 3820, 10000}; */
/* IMPORTANTE- Condicionar o valor do coeficiente de absorção dos gases igual a ZERO */
/* isto, como resultado que "ab = ab_wsggm + ab_soot" e o RADCAL retorna o valor de ab */
/* o qual será assignado a variavel ab_soot, por tanto ab_wsggm dev de ser zero. */
*ab_wsggm = 0.0;
/* ----- */

switch (nb)
{
    /* Utiliza o RADCAL e calcula em todo o espectro o coef de absorcao media */
    case 0: ommin = 50, ommax = 10000, nom2 = 466.0;
    *ab_soot = _radcalv_MOD_radcal(&dd, &rct, &specie1, &specie2, &specie3,
    &specie4, &specie5, &twall, &ommin, &ommax, &nom2);
}

}

```

C

Coeficiente de Absorção Global Mediante o Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) – Programação em UDF do modelo WSGGM(Mossi)

C.1

Função Definida Pelo Usuário (UDF) para o modelo WSGGM(Mossi)

A presente rotina calcula o coeficiente de absorção global da fuligem seguindo o modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas (WSGGM), levando em consideração os coeficientes polinomiais de Mossi (2011), os quais foram obtidos a partir do banco de dados HITEMP.

```

/* ***** */
/*      Arquivo MOSSLWSGGM.c      */
/*      Calcula o Coeficiente de Radiação utilizado a Soma Ponderada dos      */
/*      Gases Cinzas segundo os dados desenvolvidos por MOSSI (2011)      */
/* ***** */

#include "udf.h"
#include "pdf_props.h"
#include "materials.h"
#include "sg_mem.h"
#include "mem.h"
#include <math.h>

DEFINE_WSGGM_ABS_COEFF(ABS_WSGGM_MOSSI, c, t, xi, p_t, s, soot_conc, Tcell,
nb, ab_wsghgm, ab_soot)
{
    /* IDENTIFICACAO DOS INDICES DAS ESPECIES */
    /* ----- */
    Material *m = THREAD_MATERIAL(t);

    int i_co2 = mixture_specie_index(m, "co2");
    int i_h2o = mixture_specie_index(m, "h2o");
    int i_n2 = mixture_specie_index(m, "n2");
    int i_o2 = mixture_specie_index(m, "o2");
    int i_co = mixture_specie_index(m, "co");
    int i_c3h8 = mixture_specie_index(m, "c3h8");

    /* DECLARACAO E LEITURA DAS VARIAVEIS QUE PRECISA O RADCAL PARA GASES */
    /* ----- */
    real p_sist = 1.0; /* Assumido para o problema de 1 atm */
    real y_co2 = Pdf_Yi(c, t, i_co2); /* Frac. máss. dióxido de carbono lida desde o fluent */
    /*
    real y_h2o = Pdf_Yi(c, t, i_h2o); /* Fracao mássica da agua lida desde o fluent */
    real y_n2 = Pdf_Yi(c, t, i_n2); /* Fracao mássica do nitrogenio lida desde o fluent */
    /*
    real y_o2 = Pdf_Yi(c, t, i_o2); /* Fracao mássica do oxigenio lida desde o fluent */
    real y_c3h8 = Pdf_Yi(c, t, i_c3h8); /* Fracao mássica do oxigenio lida desde o fluent */
    /*

    /* CALCULO DO PESO MOLECULAR MEDIO (MUITO APROXIMADO) */
    /* ----- */
    real PM_medio = pow(y_co2/44 + y_h2o/18 + y_n2/28 + y_o2/16 + y_c3h8/44, -1);

```

```

/* CONVERSAO DOS GASES A PRESSÃO PARCIAL */
/* ----- */
real x_co2 = y_co2*PM_medio/44;
real x_h2o = y_h2o*PM_medio/18;
real p_co2 = x_co2*p_sist;
real p_h2o = x_h2o*p_sist;
real p = p_co2 + p_h2o;

/* CAMINHO OPTICO FORNECIDO (manualmente) */
/* ----- */
real Lm = 0.1892; /* Config cilindrica igual a 0.946x0.200 metros */

int i,j;
double TT[4];
double Ae[3] = {0, 0, 0};
double Epsilon = 0;

/* ===== */
/* DECLARACAO DAS TABELAS WSGGM DE MOSSI */
/* ===== */

/* para p_h2o/p_co2 = 1 */
/* ----- */

double BB1[3][4]={4.0831e-1, 1.1982e-4, -7.3069e-10, -2.24117e-11, 2.7241e-1, -1.4359e-4,
6.4469e-8, -1.5907e-11, 0.8683e-1, 7.4289e-6, -5.3027e-8, 1.5944e-11};
double KAPPA1[3]={0.5023, 9.3261, 1.8109e2};

/* para p_h2o/p_co2 = 2 */
/* ----- */

double BB2[3][4]={3.6586e-1, 1.2215e-4, 0.3844e-7, -3.3917e-11, 2.5820e-1, -0.3474e-4,
-0.3223e-7, 0.6287e-11, 1.2252e-1, -0.5629e-4, -0.1780e-7, 0.9547e-11};
double KAPPA2[3]={0.5240, 9.0553, 1.4199e2};

/* ===== */

/* ===== */
/* CALCULOS PREVIOS */
/* ===== */
p = p_h2o + p_co2;
TT[0] = 1; TT[1] = Tcell; TT[2]=Tcell*Tcell; TT[3]=Tcell*Tcell*Tcell;

/* ===== */
/* CALCULOS DE ab_wsggm */
/* ===== */

if (p_h2o/p_co2 < 1.5) /* Utiliza os dados da primeira tabela */
{
    for(i=0; i<=2; i++)
    {
        for(j=0; j<=3; j++)
        {
            Ae[i] = Ae[i] + BB1[i][j]*TT[j];
        }
        Epsilon = Epsilon + Ae[i]*(1 - exp(-KAPPA1[i]*p*Lm));
    }
}

else /* Utiliza os dados da segunda tabela */
{
    for(i=0; i<=2; i++)
    {
        for(j=0; j<=3; j++)
        {
            Ae[i] = Ae[i] + BB2[i][j]*TT[j];
        }
        Epsilon = Epsilon + Ae[i]*(1 - exp(-KAPPA2[i]*p*Lm));
    }
}

*ab_wsggm = -(1/Lm)*log(1-Epsilon); /* Retorna o valor do coeficiente de absorção */

}

```

D

Coeficiente de Absorção Espectral da Fuligem Segundo a Teoria de Rayleigh – Formulação e Programação em UDF

D.1

Teoria de Absorção/Espalhamento de Rayleigh para o Cálculo das Propriedades Radiantes da Fuligem

Tal como foi apresentado no Capítulo 3, o coeficiente de absorção espectral para a fuligem, segundo a teoria de espalhamento Mie na aproximação Rayleigh, é definido como,

$$a_{soot,\lambda} = \frac{36\pi nq}{(n^2 - q^2 + 2)^2 + 4n^2q^2} \frac{f_V}{\lambda} = C_\lambda \frac{f_V}{\lambda}, \quad (D-1)$$

sendo que,

$$C_\lambda = \frac{36\pi nq}{(n^2 - q^2 + 2)^2 + 4n^2q^2}. \quad (D-2)$$

Estas expressões são válidas quando $d_p \ll \lambda$, o que é o caso para partículas de fuligem. Segundo a Equação (D-2), C_λ representa uma expressão que depende da parte real e imaginária do índice de refração, $m = n + qi$, que por sua vez, depende do comprimento de onda. Chang e Charalampopoulos (1990) caracterizaram a dependência de n e q com o comprimento de onda. A relação funcional empírica de n e q com λ obtida por estes autores é,

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

$$q = 0,5821 + 0,1213 \ln \lambda + 0,2309 \ln^2 \lambda - 0,0100 \ln^3 \lambda, \quad (D-4)$$

cujas aplicações são indicadas nas faixas de comprimentos de onda $\lambda \in [0,4,30] \mu\text{m}$.

D.2

Cálculo do Coeficiente de Absorção Equivalente da Fuligem Através da Teoria de Rayleigh e Aplicando-se a Metodologia de Discretização Valor Médio

Uma vez que o Fluent aceita, para cada faixa de comprimento de onda, apenas um valor constante do coeficiente de absorção, $\bar{a}_{soot,j}$ ($j = 1, 2, \dots, N_b$),

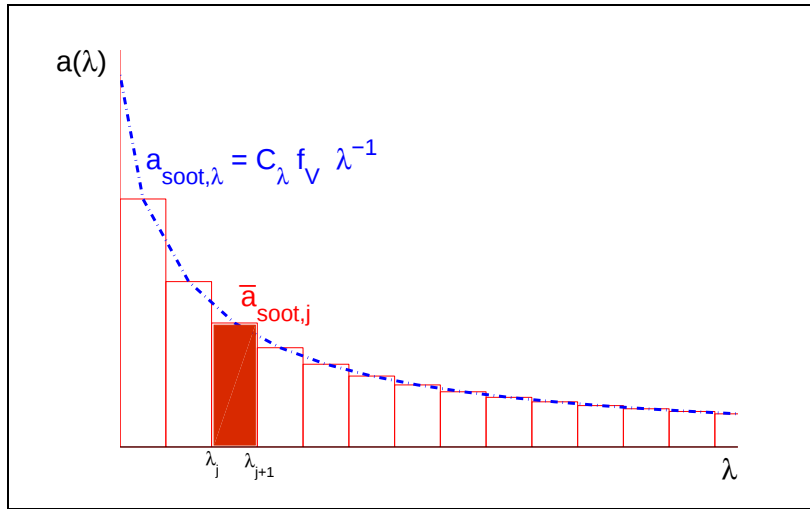


Figura D.1: Curva do coeficiente de absorção espectral da fuligem segundo a teoria de espalhamento Rayleigh e seu equivalente aplicando a abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB).

precisa-se implementar, via UDF, a conversão de $a_{soot,\lambda}$ [Equação (D-1)], em seu análogo discreto. Para isto é aplicada a abordagem de Modelo Banda Larga-Cinza (*Gray Wide Band Model*, GWB), que estabelece, para uma faixa de comprimento de onda delimitada por λ_j e λ_{j+1} , um coeficiente de absorção equivalente, $\bar{a}_{soot,j}$. Aplicando metodologia de discretização de “valor médio”, obtém-se a seguinte expressão,

$$\bar{a}_{soot,j} = \frac{1}{\Delta\lambda_j} \int_{\lambda_j}^{\lambda_{j+1}} \frac{C_\lambda f_V}{\lambda^{-1}} d\lambda = \frac{C_{o,j} f_V}{\lambda_{j+1} - \lambda_j} \int_{\lambda_j}^{\lambda_{j+1}} \lambda^{-1} d\lambda, \quad (D-5)$$

onde $\Delta\lambda_j = \lambda_{j+1} - \lambda_j$. Nota-se que f_V independe do comprimento de onda e que, por conveniência, o valor de C_λ é equivalente a $C_{o,j}$, o que será assumido por simplicidade, como sendo constante para cada faixa cinza. A Figura D.1 ilustra este procedimento de cálculo do coeficiente de absorção equivalente da fuligem, $\bar{a}_{soot,j}$, para cada j -ésima faixa de comprimento de onda.

A resolução da Equação (D-5) fornece o seguinte resultado para o coeficiente de absorção equivalente para a j -ésima faixa “cinza”,

$$\bar{a}_{soot,j} = \frac{C_{o,j} f_V \ln \left(\frac{\lambda_{j+1}}{\lambda_j} \right)}{\lambda_{j+1} - \lambda_j}, \quad (D-6)$$

sendo que,

$$C_{o,j} = C_\lambda(\lambda_j), \quad (D-7)$$

que é resolvido com o emprego das Equações. (D-2), (D-3) e (D-4). Note-se que a Equação (D-6) pode ser reescrita, para cada j -ésima banda “cinza”, como,

Tabela D.1: Discretização “valor médio”. Valores de $C_{o,j}$ e K_j aplicados à UDF para cada faixa de comprimento de onda.

j	$\lambda_j - \lambda_{j+1} (\mu\text{m})$	$C_{o,j}$	K_j
1	1,00 — 2,62	4.13	2456402.11
2	2,62 — 2,94	4.22	1519286.56
3	2,94 — 3.57	4.11	1267099.34
4	3,57 — 4,17	3.86	998742.34
5	4,17 — 4,70	3.60	812539.64
6	4,70 — 7,00	3.38	332004.76
7	7,00 — 8,62	2.58	235380.97
8	8,62 — 10,0	2.19	133574.46
9	10,0 — 20,0	1.93	117079.71
10	20,0 — 40,0	1.02	35189.94
11	40,0 — 70,0	0.52	9747.53
12	70,0 — 100	0.31	9747.53

$$\bar{a}_{soot,j} = K_j f_V, \quad (\text{D-8})$$

onde

$$K_j = \frac{C_{o,j} \ln \left(\frac{\lambda_{j+1}}{\lambda_j} \right)}{\lambda_{j+1} - \lambda_j}, \quad (\text{D-9})$$

é um valor que depende apenas da faixa de comprimento de onda. A Tabela D.1 mostra os valores de $C_{o,j}$ e K_j para 12 faixas de comprimento de onda, as quais foram empregados na implementação da UDF no cálculo do coeficiente de radiação espectral, e, a Figura D.2 mostra a dependência com o comprimento de onda de C_λ e K_j , os quais foram calculados mediante as respectivas Equações (D-2) e (D-9).

D.3 Funções Definidas Pelo Usuário (UDF)

A seguir, são escritas, em linguagem C das UDFs, as implementações realizadas para o cálculo do coeficiente de absorção da fuligem aplicando-se a teoria de absorção/espalhamento de Rayleigh, e empregando-se as discretização “valor médio”.

D.3.1 Implementação do Modelo Raileigh

A seguinte rotina permite calcular o coeficiente de absorção da fuligem segundo a teoria de absorção/espalhamento Rayleigh, aplicando-se a metodolo-

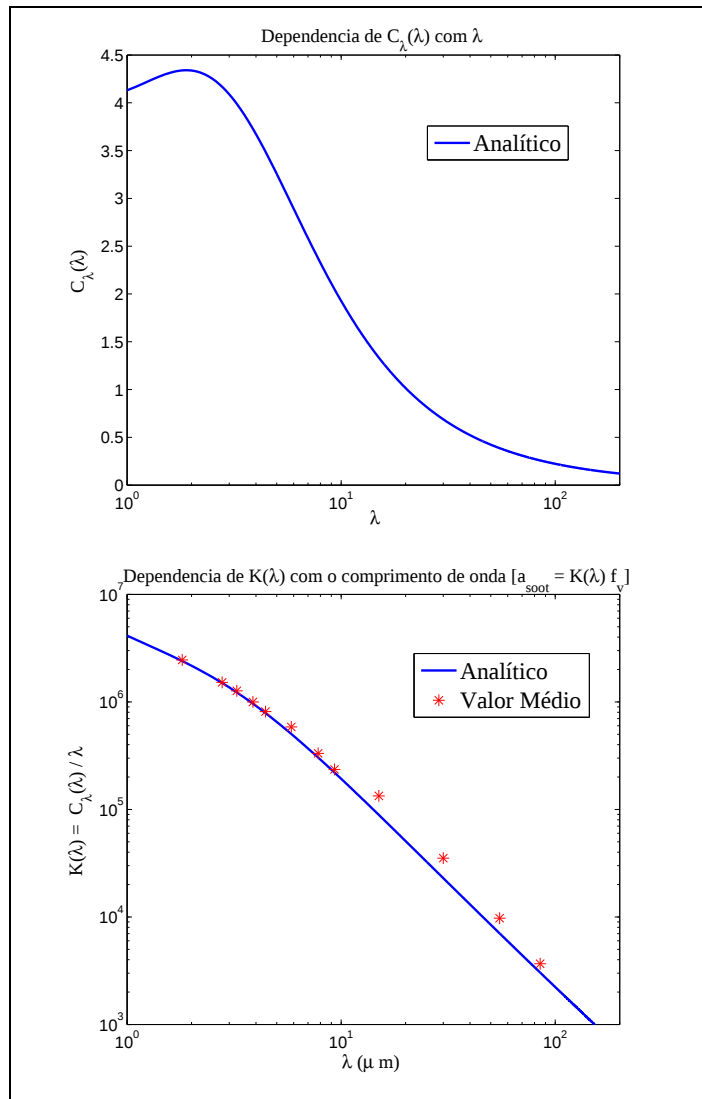


Figura D.2: Comparação entre os valores analíticos e de discretização de $C_\lambda(\lambda)$ e $K(\lambda) = C_\lambda(\lambda)/\lambda$ como função do comprimento de onda.

gia de discretização “Valor Médio”.

```
#include "udf.h"

DEFINE_WSGGM_ABS_COEFF(abs_rayleigh_DISCRETIZADO, c, t, xi, p_t, s, soot_conc, Tcell,
                        nb, ab_wsggm, ab_soot)
{
    /* frac.mass.ful.(Y_soot) = conc.mass.ful.(M ou soot_conc) / dens.gas(rho_gas) */
    /* frac.vol.ful.(svf) = frac.mass.ful.(Y_soot) * dens.gas(rho_gas) / dens.ful.(rho_soot) */
    /* POR TANTO */
    /* frac.vol.ful.(svf) = conc.mass.ful.(M ou soot_conc) / dens.ful.(rho_soot) */

    /* Converter em fracao volumetrica */
    real svf = soot_conc / (2000); /* Armazena a frac. vol. da ful. (svf) */

    switch (nb)
    {
        case 0 :
        {
            *ab_soot = 2456402.11 * svf;
        }
        break;
    }
}
```

```
case 1 :
{
*ab_soot = 1519286.56 * svf;
}
break;

case 2 :
{
*ab_soot = 1267099.34 * svf;
}
break;

case 3 :
{
*ab_soot = 998742.34 * svf;
}
break;

case 4 :
{
*ab_soot = 812539.64 * svf;
}
break;

case 5 :
{
*ab_soot = 584888.16 * svf;
}
break;

case 6 :
{
*ab_soot = 332004.76 * svf;
}
break;

case 7 :
{
*ab_soot = 235380.97 * svf;
}
break;

case 8 :
{
*ab_soot = 133574.46 * svf;
}
break;

case 9 :
{
*ab_soot = 35189.94 * svf;
}
break;

case 10 :
{
*ab_soot = 9747.53 * svf;
}
break;

case 11 :
{
*ab_soot = 3671.16 * svf;
}
break;
}
}
```

E

Levantamento das Curvas de Vaporização para o n-heptano de n-dodecano(querosene)

A seguir apresentam-se as curvas de pressão de saturação do n-heptano e do n-dodecano, componentes representativos do querosene. Cabe ressaltar que o n-dodecano é o principal componente do querosene.

Estas curvas foram obtidos de equações semi-empíricas formuladas por Sazhin (2006) e das constantes fornecidas pelo NIST (*National Institute of Standards and Technology*) para a equação de Antoine,

$$\log_{10} p_s = A - \left(\frac{B}{T + C} \right), \quad (\text{E-1})$$

onde p_s e T são a pressão de saturação (em bar) e a temperatura (em K) da substância, e onde A , B e C são parâmetros empíricos, específicos para cada substância. Assim, o NIST reporta das constantes A , B e C para o n-heptano e o n-dodecano, que foram obtidas do trabalho de Williamham *et al.* (1945), e que são apresentados na Tabela E.1.

Por outra parte, Sazhin (2006) compilou uma série de formulações semi-empíricas de propriedades termodinâmicas do n-Tetradecano, n-heptano, n-dodecano e Diesel, que descrevem a vaporização, ignição e quebra de gotículas destes combustíveis. Para o caso do n-heptano e do n-dodecano foram levantadas Sazhin (2006) as seguintes formulações semi-empíricas,

$$p_s = 10^{4,02677 - 1258,34/(T - 53,85)}, \quad (\text{E-2})$$

$$p_s = 6,894757 \times 10^{-5} \times e^{12,12767 - 3743,84/(T - 93,022)}, \quad (\text{E-3})$$

onde p_s e T são a pressão de saturação e a temperatura expressa em bar e K, respectivamente. Note-se que a Equação (E-2) apresenta, para o n-heptano, a

Tabela E.1: Parâmetros empíricos da Equação de Antoine para o n-heptano e o n-dodecano obtidos do trabalho de Williamham *et al.* (1945).

HIDROCARBONETO	A	B	C
n-heptano	4,02832	1268,636	-56,199
n-dodecano	4,10549	1625,928	-92,839

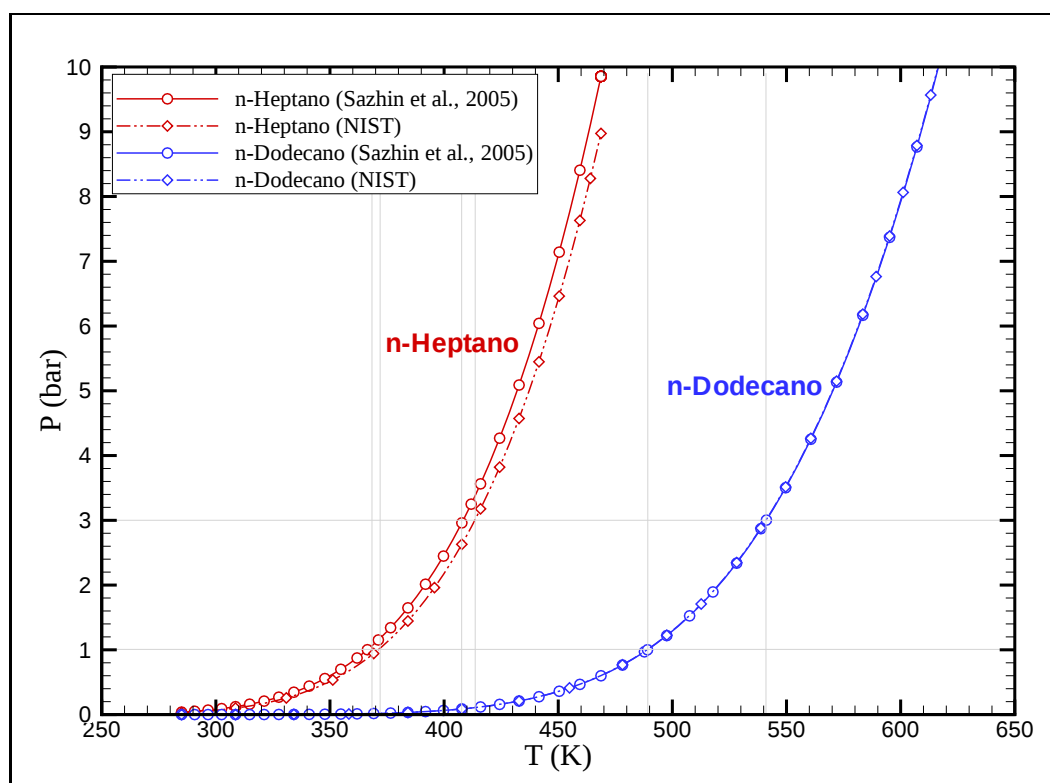


Figura E.1: Curvas de pressão de saturação do n-heptano e do n-dodecano.

solução da equação geral de Antoine [Equação (E-1)], e onde os coeficientes A , B e C , reportados por Sazhin (2006) são muito semelhantes àqueles apresentados por Williamham *et al.* (1945).

A Figura E.1 mostra as curvas de vaporização obtidas das formulações de Sazhin (2006) [Equações (E-2) e (E-3)] e com os dados de A , B e C do NIST (Williamham *et al.*, 1945) usados na Equação de Antoine [Equação (E-1)]. Nela mostra-se que, para o caso do n-dodecano, tanto a equação fornecida por Sazhin (2006) quanto os dados reportados pela NIST (Williamham *et al.*, 1945) levam a uma mesma curva de saturação. Contudo, para o caso do n-heptano, as curvas de saturação da equação de Antoine [Equação (E-1)] apresentam pequenas discrepâncias.

De posse das curvas de pressão de saturação para o n-heptano e o n-dodecano, é possível obter, para qualquer pressão, a temperaturas de ebulição. Além da curva de saturação do combustível empregado, é necessário fornecer ao FluentTM a temperatura de ebulição. Assim, a Tabela E.2 apresenta a temperatura de ebulição do n-heptano e do n-dodecano obtidas para 0, 1 e 0, 3 MPa.

Na simulação do queimador de Nakamura *et al.* (2011), o n-heptano é considerado como representativo das propriedades físicas do querosene. Desta forma, escolheu-se a formulação (E-3) para descrever a curva de saturação do

n-heptano, resultando nas temperaturas de ebulição de 366,4 e 408,4 K para pressões de operação do queimador de 0,1 e 0,3 MPa, respectivamente.

Tabela E.2: Temperaturas de ebulição do n-heptano e do n-dodecano para 0,1 e 0,3 MPa, obtidas das formulações de Sazhin (2006) e dos dados reportados pelo NIST [Williamham *et al.* (1945)].

Pressão (MPa)	n-heptano		n-dodecano	
	Sazhin (2006)	NIST	Sazhin (2006)	NIST
0,1	366,4 K	371,2 K	489,1 K	489,0 K
0,3	408,4 K	413,5 K	541,2 K	541,0 K

Cabe ressaltar que uma vez que não se dispõe de modelo de cinética química de combustão do n-dodecano, também é empregado o modelo cinético de Wisconsin (Patel *et al.*, 2004) para a combustão do n-heptano.