

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO TURBULENTA DE GÁS
NATURAL EM CÂMARA CILÍNDRICA**

por

Cristiano Vitorino da Silva

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Março de 2005.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO TURBULENTA DE GÁS NATURAL EM CÂMARA CILÍNDRICA

por

Cristiano Vitorino da Silva

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Horácio A. Vielmo

Co-Orientador: Prof. Ph.D. Francis H. R. França

Aprovada por:

Prof. Ph.D. Amir A. M. Oliveira Jr. (POSMEC/UFSC)

Prof. Dr. Argimiro R. Secchi (PPGEQ/UFRGS)

Prof. Dr. Paulo S. Schneider (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Flávio José Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 11 de Março de 2005.

Dedico este trabalho

à minha noiva **Elisa Mariel Schwan**,

aos meus pais **Hélio V. da Silva** e **Nedi A. da Silva**,

às minhas irmãs **Vanessa V. da Silva** e **Cristina V. da Silva**,

que são a luz e a alegria da minha vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos amigos e orientadores Horácio A. Vielmo e Francis H. R. França pela oportunidade de realização deste trabalho e pela forma tranqüila e segura de suas devidas orientações.

A todos os colegas que de forma direta ou indireta contribuíram na execução deste trabalho.

Agradeço também ao Prof. Sandi I. S. de Sousa pelo incentivo e confiança depositados em minha pessoa durante o curso de graduação e de mestrado.

Ao CNPq pelo suporte financeiro, e ao PROMEC representado em seu corpo docente e funcionários.

À minha noiva Elisa M. Schwan cuja distância física não a impediu de estar sempre comigo.

Aos meus pais, Hélio e Nedi, e às minhas irmãs Vanessa e Cristina, sem os quais nada teria sentido.

RESUMO

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA COMBUSTÃO TURBULENTA DE GÁS NATURAL EM CÂMARA CILÍNDRICA

O presente trabalho apresenta uma modelagem detalhada de processos de combustão turbulentos para um jato concêntrico de combustível e ar. A modelagem é fundamentada nas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. A turbulência é resolvida pela utilização do modelo $k-\epsilon$ padrão. Dois modelos de reações químicas são apresentados. O modelo SCRS – *Simple Chemically-Reacting Systems*, que assume taxas instantâneas de reações químicas. Também é abordado o modelo E-A – *Eddy Breakup - Arrhenius*, que assume taxas finitas de reações químicas. A radiação térmica, fenômeno de grande importância devido às altas temperaturas alcançadas em processos de combustão, é modelada através do Método das Zonas. O modelo da soma ponderada de gases cinzas – WSGGM, é usado para determinar o espectro de emissão e absorção dos gases no processo. Para a solução destas equações diferenciais, juntamente com os modelos de turbulência, de reações químicas e radiação térmica, faz-se o uso do Método dos Volumes Finitos.

Para validar a modelagem apresentada resolve-se o processo de combustão em uma câmara cilíndrica. A câmara de combustão usada é a mesma abordada no *First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, organizado pela ERCORTAC - *European Research Community On Flow Turbulence And Combustion*, em outubro de 1994, que apresenta dados experimentais de temperatura e concentração das espécies químicas para várias posições de interesse no interior da câmara. Utiliza-se o gás natural como combustível e o ar atmosférico como oxidante. O processo de combustão sem pré-mistura é resolvido para a condição de excesso de combustível de 5 % para ambos os modelos, onde o gás natural é injetado por um duto circular central, e o ar atmosférico por um orifício anular externo à esse duto, no mesmo plano. Uma reação química não estagiada é assumida para o modelo SCRS. Para o modelo E-A duas situações são resolvidas: combustão não estagiada, com uma etapa global de reação química; e reação química estagiada, com duas etapas globais. Os resultados obtidos com o modelo SCRS para a distribuição de

temperaturas, em termos de tendências gerais, são razoáveis. Já as concentrações de espécies químicas não apresentam dados satisfatórios para este modelo. Para o modelo E-A os resultados apresentam boa concordância com os dados experimentais, principalmente para a situação em que o processo de combustão é assumido em duas etapas globais.

É analisado em detalhe o papel desempenhado pela transferência de calor por radiação, com meio participante. Para melhor verificar as trocas de calor, assume-se uma câmara de combustão cilíndrica com paredes d'água. A injeção do combustível e do oxidante é feita através de um queimador central, semelhante ao usado para validar a modelagem, porém com dois orifícios concêntricos para injeção de combustível. Nesta situação o efeito do turbilhonamento (*swirl*), assumido como 20 % da velocidade axial de entrada, sobre a injeção de ar é computado através da condição contorno da equação de conservação da quantidade de movimento angular. Nesta fase apenas o modelo E-A, com duas etapas globais de reações químicas, é considerado, já que o mesmo apresenta os melhores resultados. O processo de combustão é simulado com e sem a presença da radiação térmica. Verifica-se que a presença da radiação térmica homogeneiza a temperatura dos gases no interior da câmara. Com isso verifica-se também alterações nas taxas de reações químicas, modificando a magnitude das frações das espécies químicas. Quando a radiação térmica é considerada efeitos de extinção local da chama são verificados nas regiões de temperaturas mais altas, diminuindo o consumo de oxigênio e aumentando a produção de monóxido de carbono, caracterizando assim uma combustão incompleta. Em algumas situações tem-se uma variação de temperatura de até 500 K, a montante da chama. A radiação térmica também aumenta a taxa de transferência de calor dos gases quentes para as paredes da câmara, e desta para o seu exterior.

Com os resultados obtidos a partir desta modelagem é possível determinar o perfil da zona de combustão, a distribuição de concentrações de espécies químicas, o campo de velocidades e as taxas de transferência de calor para as paredes da câmara de combustão, total, por convecção superficial e por radiação. Estes resultados são de extrema importância para prever a performance de câmaras de combustão, assim como auxiliar na sua otimização.

ABSTRACT

NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT COMBUSTION OF NATURAL GAS IN CYLINDRICAL CHAMBER

This work presents a detailed model of turbulent combustion processes for a concentric jet of fuel and air. The model is based on the mass, momentum, energy and chemical species conservation equations. The turbulent is solved by the $k-\epsilon$ standard model. Two chemical reaction models are considered. The SCRS (Simple Chemically-Reacting Systems) model, which assumes instantaneous rates of chemical reactions. The E-A (Eddy Breakup-Arrhenius) model, which considers finite rates of chemical reactions. The thermal radiation, a mechanism that plays an important role due to the high temperatures that are achieved in combustion processes, is modeled by means of the Zonal Method. The Weighted-Sum-of-Gray-Gases-Model is employed to describe the wavelength dependence of the gas radiative properties. The Control Volumes method is selected to solve the differential governing equations, together with the turbulence models, chemical reactions and thermal radiation.

For the proposed model validation, the combustion process in a cylindrical chamber is solved. The combustion chamber is the same one considered in the First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces, as organized by ERCORTAC - European Research Community on Flow Turbulence and Combustion, held in October 1994, which presents the experimental data for temperature and concentrations of the chemical species at various positions in the interior of the chamber. Natural gas and atmospheric air are employed as the fuel and the oxidant. The combustion process without pre-mixture is solved for the condition of 5 % fuel excess for both models, in which the natural gas is injected through a centered circular tube, while air is injected by an annular duct that is external to the fuel tube, both in the same plane. A non-staged chemical reaction is assumed for the SCRS model. For the E-A model, two situations are resolved: non-staged combustion, with a single global step chemical reaction; and staged combustion, involving two global steps. The results obtained from the SCRS model for the temperature distribution, in general trends, are reasonable. As for the concentrations of the chemical species, the SCRS model does not present good results. For the E-A model, the results presents a

better match to the experimental data, especially for the situation in which the combustion process is assumed in two steps.

The role of the thermal radiation from the participating medium in the heat transfer is analyzed in detail. For a better verification of the heat transfers, it is assumed a cylindrical combustion chamber having water walls. The injection of fuel and oxidant is carried out by a centered burner, which is similar to the one used for the model verification, but having two concentric orifices for the fuel injection. In this situation, the swirl effect (set as 20 % of the inlet axial velocity) on the air injection is computed by the boundary condition of the angular momentum conservation equation. In this step, only the E-A model, with two global chemical reaction steps, is considered, since it presents the better results. The combustion process is simulated with and without the presence of the thermal radiation. It is verified that the thermal reaction homogenizes the temperature of the gases in the interior of the chamber. As a consequence, it is also verified changes in the chemical reactions rate, altering the magnitude of the chemical species fractions. When the thermal radiation is considered, local extinction of the flame are verified in the regions of highest temperatures, reducing the consumption of oxygen and increasing the production of carbon monoxide, which characterizes an incomplete combustion reaction. In some situation, a variation of 500 K in the temperature is observed for positions upwind the flame. The thermal radiation also increases the rate of heat transfer from the hot gases to the chamber walls, and from the chamber walls to the outside.

From the results obtained from this model, it is possible to determine the profile of the combustion zone, the chemical species concentration distributions, the velocity profile and the rates of heat transfer for the walls of combustion chamber, overall, for surface convection and for radiation. These results are of extreme importance to predict the performance and lead to the optimization of combustion chambers.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão da Literatura	3
1.2	Objetivos	16
1.3	Escopo da Tese	18
2	MODELAGEM MATEMÁTICA DA COMBUSTÃO TURBULENTA DE COMBUSTÍVEIS GASOSOS EM CÂMARAS CILÍNDRICAS	20
2.1	Equação de Conservação	21
2.2	Equações do Movimento	23
2.2.1	Conservação de Massa	23
2.2.2	Conservação de Quantidade de Movimento Linear	24
2.3	Modelo de Reações Químicas Com Taxas Finitas Generalizadas de Arrhenius-Magnussen	28
2.3.1	Conservação de Espécies Químicas - Modelo Arrhenius-Magnussen	29
2.3.2	Conservação de Energia - Modelo Arrhenius-Magnussen	38
2.4	Modelo de Reações Químicas Simplificadas - SCRS	40
2.4.1	Conservação de Espécies Químicas - Modelo SCRS	40
2.4.2	Conservação de Energia - Modelo SCRS	43
2.5	Turbulência: Equações de Transporte	45
2.5.1	Conceito de Viscosidade Turbulenta	49
2.5.2	Modelo k - ϵ	51
2.5.3	Funções de Parede	53
2.6	Modelamento em Coordenadas Cilíndricas Axissimétricas	57
2.7	Considerações Finais Sobre o Modelo	61

3	MODELAGEM DA TRANSFÊRENCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO	63
3.1	Radiação em Superfícies	63
3.1.1	Intensidade de Radiação	64
3.1.2	Corpo Negro	66
3.1.3	Superfícies Reais	67
3.2	Radiação em Meios Participantes	70
3.2.1	Mecanismos Físicos de Absorção e Emissão	70
3.2.2	Coeficiente de Extinção $K(\lambda, T, p)$	72
3.2.3	Emissão de Energia Radiante em Meio Participante	75
3.2.4	Equação de Transferência Radiante	76
3.2.5	Transferência de Energia Radiante no Interior de Cavidades	78
3.2.6	Análise da Formulação de Cálculo	81
3.3	Modelos de Gases Participantes	82
3.3.1	Gás Cinza	82
3.3.2	Bandas de Absorção	83
3.3.3	Soma Ponderada de Gases Cinzas - WSGGM	83
3.4	Métodos de Solução de Problemas de Radiação em Meios Participantes	86
3.4.1	Aproximações $P-N$	87
3.4.2	Método de Monte Carlo	87
3.4.3	DTRM - <i>Discrete Transfer Radiation Model</i>	87
3.4.4	Método das Zonas	89
3.5	Modelo da Soma Ponderada de Gases Cinzas Aplicado ao Método das Zonas .	89
3.5.1	Troca de Energia Radiante Gás-Superfície	89
3.5.2	Troca de Energia Radiante Superfície-Superfície	92
3.5.3	Troca de Energia Radiante Gás-Gás	94
3.5.4	Troca de Energia Radiante Superfície-Gás	96
3.6	Balanco Global de Energia Radiante	98
3.7	Áreas de Troca Direta Para Cavidades Cilíndricas	99
4	MÉTODO NUMÉRICO	108
4.1	O Esquema Numérico	108
4.2	Detalhes da Implementação da Modelagem	112

4.2.1	Implementação do Modelo de Radiação Térmica	115
4.3	Teste de Independência de Malha	118
5	VALIDAÇÃO DA MODELAGEM MATEMÁTICA.....	120
5.1	O Problema Abordado	120
5.2	Condições de Contorno.....	123
5.3	Propriedades Termofísicas	125
5.4	Método Numérico	127
5.5	Resultados	130
6	ANÁLISE DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO NO PROCESSO DE COMBUSTÃO NUMA CÂMARA CILÍNDRICA	145
6.1	Observações Gerais	146
6.2	O Problema.....	147
6.3	Resultados e Discussões	151
7	CONCLUSÕES FINAIS E PROPOSTAS PARA CONTINUAÇÃO DO TRABALHO.....	165
7.1	Conclusões.....	165
7.2	Propostas para Continuação do Trabalho	169
ANEXOS		171
A	PROCESSOS DE COMBUSTÃO	171
A.1	Princípios da Combustão	172
A.2	Reações de Combustão	173
A.3	Cálculos Práticos de Combustão	174
A.3.1	Quantidade Teórica de Ar Seco Necessária à Combustão	174
A.3.2	Quantidade Real de Ar Seco Necessária à Combustão	177
A.3.3	Quantidade Teórica de Gás Produzido na Combustão	178
A.3.4	Quantidade Real de Gás Produzido na Combustão	179
A.4	Implementação de um Modelo de Câmara de Combustão no IPSEpro-MDK ..	180

B Propriedades Termodinâmicas	183
B.1 Substâncias Puras	183
B.2 Misturas de Substâncias	187
B.2.1 Análise de Mistura Para o Gás Natural	191
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	195

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

A	Espécie química [$kmol/m^3$]
A	Área [m^2]
a	Constante das equações de estado $[-]$
A'	Área superficial da câmara de combustão [m^2]
A_0	Constante das equações de estado $[-]$
a_0	Constante das equações de estado $[-]$
a_i	Coefficiente de absorção do gás i [m^{-1}]
A_k	Fator pré-exponencial na reação k [$(m^3/s)/kmol$]
a_L	Coefficiente do ponto L $[-]$
a_N	Coefficiente do ponto N $[-]$
a_O	Coefficiente do ponto O $[-]$
a_P	Coefficiente do ponto P $[-]$
a_S	Coefficiente do ponto S $[-]$
a_λ	Coefficientes de absorção espectral [m^{-1}]
A_{ant}	Área transversal do volume imediatamente anterior ao volume de saída da câmara [m^2]
A_{entra}	Área transversal do volume de entrada da câmara [m^2]
$a_{i,\lambda}$	Coefficiente de absorção espectral do gás i [$1/m$]
A_{sai}	Área transversal do volume de saída da câmara [m^2]
ADD	Coefficiente para correção da velocidade na saída da câmara de combustão $[-]$
$\overline{B_\Phi}$	Componente média das forças de campo [m/s^2]
$\overline{B_r}$	Componente média das forças de campo na direção radial [m/s^2]
$\overline{B_x}$	Componente média das forças de campo na direção axial [m/s^2]
$\overline{B_\theta}$	Componente média das forças de campo no sentido angular [m/s^2]
B	Espécie química [$kmol/m^3$]

B	Radiosidade total hemisférica [W/m^2]
b	Constante das equações de estado $[-]$
b	Termo fonte $[-]$
B_0	Constante das equações de estado $[-]$
b_0	Constante das equações de estado $[-]$
B_Φ	Componente das forças de campo [m/s^2]
B_r	Componente das forças de campo na direção radial [m/s^2]
B_x	Componente das forças de campo na direção axial [m/s^2]
B_θ	Componente das forças de campo no sentido angular [m/s^2]
B_j	Radiosidade total hemisférica da superfície A_j [W/m^2]
B_k	Radiosidade total hemisférica da superfície A_k [W/m^2]
c_{p,CH_4}	Calor específico do metano [kJ/kgK]
c_{p,CO_2}	Calor específico do dióxido de carbono [kJ/kgK]
$c_{p,comb}$	Calor específico do combustível [kJ/kgK]
$c_{p,Fe}$	Calor específico do material das paredes (Aço) [kJ/kgK]
c_{p,H_2O}	Calor específico do vapor d'água [kJ/kgK]
c_{p,N_2}	Calor específico do nitrogênio [kJ/kgK]
c_{p,O_2}	Calor específico do oxigênio [kJ/kgK]
C	Carbono [$kmol/kg$]
C	Espécie química [$kmol/m^3$]
c	Constante das equações de estado $[-]$
c^*	Constante das equações de estado $[-]$
C_0	Constante das equações de estado $[-]$
C_α	Concentração molar para cada espécie reagente α [$kmol/m^3$]
C_nH_n	Combustível genérico [$kmol/kg$]
c_p	Calor específico da mistura [$kJ/kg K$]
$C_{1,\epsilon}$	Constante na equação de ϵ $[-]$

$C_{2,\epsilon}$	Constante na equação de ϵ $[-]$
C_μ	Constante na equação de μ_t $[-]$
$C_{a,i}(T, T_e)$	Coeficientes de ponderação para o gás i , dependentes das temperaturas do gás, T , e da fonte emissora, T_e $[-]$
$C_{e,0}$	Coeficiente de ponderação para a região do espectro onde o coeficiente de absorção é zero $[-]$
$c_{e,i,1}$	Coeficientes da função polinomial para $j=1$ $[-]$
$c_{e,i,2}$	Coeficientes da função polinomial para $j=2$ $[K^{-1}]$
$c_{e,i,3}$	Coeficientes da função polinomial para $j=3$ $[K^{-2}]$
$c_{e,i,4}$	Coeficientes da função polinomial para $j=4$ $[K^{-3}]$
$c_{e,i,j}$	Coeficientes da função polinomial $[K^{j-1}]$
$C_{e,i}(T)$	Coeficientes de ponderação para o gás i , função apenas da temperatura $[-]$
$c_{p,\alpha}$	Calor específico do componente α na mistura $[kJ/kg K]$
$c_{p,g}$	Calor específico dos gases de combustão $[kJ/kg K]$
CH_4	Metano $[kmol/kg]$
CO	Monóxido de carbono $[kmol/kg]$
CO_2	Dióxido de carbono $[kmol/kg]$
$comb$	Combustível $[-]$
D	Difusividade mássica da mistura $[m^2/s]$
D	Espécie química $[kmol/m^3]$
d	Diâmetro $[m]$
$d\beta$	Variação do ângulo de zênite $[^\circ]$
$d\cap$	Variação no hemisféreo $[\pi rad]$
$d\gamma$	Variação do ângulo azimutal $[^\circ]$
$d\lambda$	Variação do comprimento de onda $[\mu m]$
$d\omega$	Variação do ângulo sólido $[sr]$
$d\omega_{\mathcal{V}}$	Variação do ângulo sólido entre $\mathcal{V}$ e dA $[sr]$

$d\omega_{\gamma-k}$	Ângulo sólido entre o volume de gás participante γ e a superfície k [sr]
$d\omega_k$	Ângulo sólido em relação a superfície k [sr]
d^*	Constante das equações de estado [—]
d^2Q	Taxa de energia radiante total, por unidade de $d\omega$, que parte de dA [W/sr]
d^2Q_λ	Taxa de energia espectral hemisférica que abandona dA [W/ μm]
$d^2Q_{\lambda,b}$	Taxa de energia espectral hemisférica emitida pela superfície negra [W/ μm]
$d^2Q_{\lambda,i,j-k}$	Taxa de energia espectral hemisférica que chega em A_k [W/ μm]
$d^2Q_{\lambda,k}$	Taxa de energia espectral hemisférica que deixa a superfície k [W/ μm]
d^3Q_λ	Taxa de energia radiante espectral que parte de dA por unidade de $d\omega$ [W/sr μm]
$d^3Q_{\lambda,e}$	Taxa de energia espectral hemisférica emitida pelo volume dV [W/ μm]
$d^3Q_{\lambda,i,a}$	Taxa de energia espectral hemisférica absorvida pelo volume dV [W/ μm]
$d^3Q_{\lambda,j-k}$	Taxa de energia espectral hemisférica que deixa dA_j e chega em dA_k [W/ μm]
$d^3Q_{\lambda,i,j-k}$	Taxa de energia espectral hemisférica que chega em dA_k [W/ μm]
$d^4Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma}$	Taxa de energia espectral hemisférica proveniente de dV_{γ^*} que atinge dV_γ [W/ μm]
$d^4Q_{\lambda,\gamma-k}$	Taxa de energia espectral hemisférica proveniente de dV_γ que atinge dA_k [W/ μm]
$d^4Q_{\lambda,a,j-\gamma}$	Taxa de energia espectral hemisférica proveniente do elemento de área dA_j que é absorvida pelo elemento de volume dV_γ [W/ μm]
$d^4Q_{\lambda,e}$	Energia espectral contida em $d\omega$ emitida pelo volume dV [W/sr μm]
$d^5Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma}$	Taxa de energia espectral hemisférica emitida pelo volume V_{γ^*} que é absorvida pelo volume V_γ [W/ μm]
$D_{r,n}$	Coeficientes [—]
$D_{r,s}$	Coeficientes [—]
$D_{x,l}$	Coeficientes [—]
$D_{x,o}$	Coeficientes [—]
Da	Número de Damköler [τ_t/τ_{ch}]
dA	Elemento diferencial de área [m^2]
dA_j	Área infinitesimal da superfície j [m^2]

dA_k	Área infinitesimal da superfície k [m^2]
dA_n	Superfície diferencial projetada no espaço a partir de dA [m^2]
$dA_{\mathcal{V}}$	Elemento ifinitesimal de área transversal do volume $\mathcal{V}$ [m^2]
$dB_{\lambda,j}$	Radiosidade espectral hemisférica da superfície A_j [$W/m^2\mu m$]
$dB_{\lambda,k}$	Radiosidade espectral hemisférica da superfície A_k [$W/m^2\mu m$]
dB_{λ}	Radiosidade espectral hemisférica [$W/m^2\mu m$]
Dc	Diâmetro da câmara de combustão [m]
$dG_{\lambda,\gamma-k}$	Irradiação espectral proveniente de $\mathcal{V}_{\gamma}$ que atinge A_k [$W/m^2\mu m$]
$dG_{\lambda,j-k}$	Irradiação espectral hemisférica que parte da superfície j e atinge a superfície k [$W/m^2\mu m$]
$dG_{\lambda,k}$	Irradiação espectral hemisférica da superfície k [$W/m^2\mu m$]
dG_{λ}	Irradiação espectral hemisférica [$W/m^2\mu m$]
di_{λ}	Variação da intensidade de radiação espectral emitida pelo volume $d\mathcal{V}$ [$W/m^2\mu m$]
dQ	Taxa total de energia hemisférica que abandona o elemento de área dA [W]
dQ_{λ}	Taxa de energia espectral hemisférica trocada pela superfície de área A [$W/\mu m$]
$dQ_{\lambda,i,a}$	Taxa de energia espectral hemisférica absorvida pela superfície de área A [$W/\mu m$]
$dQ_{\lambda,i}$	Taxa de energia espectral hemisférica incidente na superfície de área dA [$W/\mu m$]
$dQ_{\lambda,\gamma-k}$	Taxa de energia espectral hemisférica proveniente de $\mathcal{V}_{\gamma}$ que atinge A_k [$W/\mu m$]
$dQ_{\lambda,b}$	Taxa de energia espectral hemisférica emitida pelo corpo negro à temperatura da superfície de área A [$W/\mu m$]
$dQ_{\lambda,e}$	Taxa de energia espectral hemisférica emitida pela superfície de área A [$W/\mu m$]
$dQ_{\lambda,i,r}$	Taxa de energia espectral hemisférica refletida [$W/\mu m$]
dq_{λ}	Fluxo de energia espectral hemisférica perdida por $d\mathcal{V}$ [$W/m^3\mu m$]
dQ_b	Taxa de energia total hemisférica emitida por uma superfície negra dA [W]
dS	Camada ifinitesimal de espessura dS [m]
$d\mathcal{V}$	Elemento ifinitesimal de volume [m^3]
$d\mathcal{V}_{\gamma^*}$	Volume infinitesimal de gás participante γ^* [m^3]

$d\mathcal{V}_\gamma$	Volume infinitesimal de gás participante γ [m^3]
e	Espessura da parede de aço da câmara de combustão [m]
e	Rugosidade relativa [$\mu m/m$]
e_b	Poder emissivo total hemisférico de corpo negro [W/m^2]
E_k	Energia de ativação na reação k [$J/kmol$]
$e_{\gamma,b}$	Poder emissivo total hemisférico de corpo negro do volume de gás γ [W/m^2]
$e_{\lambda,b}$	Poder emissivo espectral hemisférico de corpo negro [$W/m^2\mu m$]
$e_{\lambda,b,k}$	Poder emissivo espectral hemisférico de corpo negro da superfície k [$W/m^2\mu m$]
$\dot{F}_\Phi$	Termo de fonte da equação de Φ [kg/s^2m^2]
$\overline{\dot{F}_\Phi}$	Termo de fonte médio da equação de $\overline{\Phi}$ [kg/s^2m^2]
$\overline{f_\alpha}$	Fração mássica média da α -ésima espécie química [kg_α/kg]
$\overline{f_{fx}}$	Fração mássica média da mistura (variável auxiliar) [kg_{fx}/kg]
f	Fator da equação dos gases reais [$-$]
f_C	Fração mássica de carbono [kg_C/kg_{comb}]
f_p	Fração mássica do produto p [kg_p/kg]
f_S	Fração mássica de enxofre [kg_S/kg_{comb}]
f_α	Fração mássica do componente α na mistura [kg_α/kg]
$f_{C_2H_2}$	Fração mássica de acetileno [$kg_{C_2H_2}/kg_{comb}$]
$f_{C_2H_4}$	Fração mássica de etileno [$kg_{C_2H_4}/kg_{comb}$]
$f_{C_2H_6}$	Fração mássica de etano [$kg_{C_2H_6}/kg_{comb}$]
$f_{C_3H_8}$	Fração mássica de propano [$kg_{C_3H_8}/kg_{comb}$]
$f_{C_4H_{10}}$	Fração mássica de butano [$kg_{C_4H_{10}}/kg_{comb}$]
f_{CH_4}	Fração mássica de metano [kg_{CH_4}/kg_{comb}]
f_{comb}	Fração mássica do combustível na mistura [kg_{comb}/kg]
f_{CO}	Fração mássica de monóxido de carbono [kg_{CO}/kg_{comb}]
f_{fx}	Fração mássica de mistura (variável auxiliar) [kg_{fx}/kg]
f_{H_2S}	Fração mássica de sulfato de hidrogênio [kg_{H_2S}/kg_{comb}]

f_{H_2}	Fração mássica de hidrogênio [kg_{H_2}/kg_{comb}]
$f_{in,ar}$	Composição do ar na entrada [kg_{Ar}/kg]
$f_{in,comb}$	Composição do combustível na entrada [kg_{comb}/kg]
f_{j^*}	Fração mássica do reagente j que fornece o menor valor para $R_{\alpha,k}$ [kg_{j^*}/kg]
f_{N_2}	Fração mássica de nitrogênio [kg_{N_2}/kg_{comb}]
f_{O_2}	Fração mássica de oxigênio [kg_{O_2}/kg_{comb}]
f_{ox}	Fração mássica do oxigênio na mistura [kg_{ox}/kg]
f_{prod}	Fração mássica dos produtos da combustão [$kg_{produtos}/kg$]
$F_{r,n}$	Coefficientes $[-]$
$F_{r,s}$	Coefficientes $[-]$
$F_{x,l}$	Coefficientes $[-]$
$F_{x,o}$	Coefficientes $[-]$
$fg_{i,j}$	Fatores de correção para zonas de gás [%]
fs_j	Fatores de correção zonas de superfície [%]
fx	Variável auxiliar para a determinação das espécies químicas $[-]$
$(\overline{g_\gamma s_k})_i$	Área de troca direta entre o volume de gás $\mathcal{V}_\gamma$ e a superfície k [m^2]
$(\overline{g_{\gamma^*} g_\gamma})_i$	Área de troca direta entre o volume de gás $\mathcal{V}_{\gamma^*}$ e o volume de gás $\mathcal{V}_\gamma$ [m^2]
$\dot{G}^\alpha$	Consumo ou produção do componente α na mistura [$kg/s\ m^3$]
$\dot{G}^{comb}$	Consumo de combustível na mistura [$kg/s\ m^3$]
$\dot{G}^{ox}$	Consumo de oxigênio na mistura [$kg/s\ m^3$]
$g_\gamma \vec{s}_k$	Área de fluxo direcionado entre o volume de gás $\mathcal{V}_\gamma$ e a superfície k [W/m^2]
$g_{\gamma^*} \vec{g}_\gamma$	Área de fluxo direcionado entre os volumes de gás $\mathcal{V}_{\gamma^*}$ e $\mathcal{V}_\gamma$ [W/m^2]
G	Função de Gibbs [kJ]
G	Irradiação total hemisférica que incide sobre a área A [W/m^2]
G_k	Irradiação total hemisférica que atinge a superfície k levando em conta todas as outras N superfícies [W/m^2]
$G_{\gamma-k}$	Irradiação total hemisférica proveniente de $\mathcal{V}_\gamma$ que atinge A_k [W/m^2]

G_{j-k}	Irradiação total hemisférica que deixa A_j e chega em A_k [W/m^2]
$\bar{h}$	Entalpia total média da mistura [kJ/kg]
H	Entalpia [kJ/kg]
h	Entalpia total da mistura [kJ/kg]
$h_{CH_4}^0$	Entalpia de formação do combustível [J/kg]
$h_{CO_2}^0$	Entalpia de formação do dióxido de carbono [J/kg]
h_{CO}^0	Entalpia de formação do monóxido de carbono [J/kg]
$h_{H_2O}^0$	Entalpia de formação do vapor d'água [J/kg]
$h_{N_2}^0$	Entalpia de formação do nitrogênio [J/kg]
$h_{O_2}^0$	Entalpia de formação do oxigênio [J/kg]
H^{comb}	Entalpia de combustão [kJ/kg]
H_2O	Água [$kmol/kg$]
H_2	Hidrogênio [$kmol/kg$]
h_α^0	Entalpia de formação da espécie α [J/kg]
h_α	Entalpia de cada espécie α [kJ/kg]
h_{inf}	Coefficiente de transferência de calor [W/m^2K]
$\vec{i}$	Vetor unitário na direção axial [—]
I	Regiões do espectro onde o coeficiente de absorção é considerado constante [—]
i	Intensidade de radiação total por unidade de ângulo sólido $d\omega$ [W/m^2sr]
$i_{\lambda,b}$	Intensidade de radiação espectral hemisférica do corpo negro [$W/m^2\mu m$]
$i_{\lambda,e}$	Intensidade de radiação espectral hemisférica [$W/m^2\mu m$]
$i_{\lambda,j-k}$	Intensidade de radiação espectral hemisférica do par de superfícies $j-k$ [$W/m^2\mu m$]
$i_{\lambda,j}$	Intensidade de radiação espectral hemisférica da superfícies j [$W/m^2\mu m$]
$i_{\lambda,k}$	Intensidade de radiação espectral hemisférica da superfícies k [$W/m^2\mu m$]
i_λ	Intensidade de radiação espectral por unidade de ângulo sólido $d\omega$ [$W/m^2sr\mu m$]
$i_\lambda(0)$	Intensidade de radiação espectral na extremidade inicial da trajetória [$W/m^2\mu m$]
$i_\lambda(S)$	Intensidade de radiação espectral na extremidade final da trajetória [$W/m^2\mu m$]

$\vec{J}$	Fluxo difusivo da variável ϕ $[-]$
$\vec{j}$	Vetor unitário na direção radial $[-]$
$\overline{J_r}$	Fluxo radial médio da variável genérica $[-]$
$\overline{J_x}$	Fluxo axial médio da variável genérica $[-]$
$\overline{J}$	Fluxo total médio da variável genérica $[-]$
$\vec{k}$	Vetor unitário no sentido angular $[-]$
K	Coefficiente total de extinção $[m^{-1}]$
K_λ	Coefficiente espectral de extinção $[m^{-1}]$
k	Energia cinética turbulenta $[m^2/s^2]$
k_λ^*	Espessura óptica espectral hemisférica em cada ponto da trajetória entre dA_j e dA_k $[m^{-1}]$
K_1	Constante empírica $[-]$
K_2	Constante empírica $[-]$
k_λ	Espessura óptica espectral ou opacidade espectral $[m^{-1}]$
$k_{bimolec}$	Coefficiente de taxa de reação química bi-molecular $[m^3/skmol]$
L	Comprimento da câmara de combustão $[m]$
L	Variável de integração $[-]$
L'	Escala de comprimento $[m]$
Le	Número de Lewis $[Sc/Pr]$
Le_t	Número de Lewis turbulento $[Sc_t/Pr_t]$
L	Interface entre os volumes P e L , ou ponto à direita do volume central P $[-]$
$\dot{m}_{comb}$	Descarga de combustível $[kg_{comb}/s]$
$\overline{MM}$	Massa molecular da mistura $[kg/kmol]$
$\overline{MM}_\alpha$	Massa molecular da α -ésima espécie química da mistura $[kg/kmol]$
$\overline{MM}_p$	Massa molecular do produto p $[kg/kmol]$
$\overline{MM}_{CH_4}$	Massa molecular do metano $[kg/kmol]$
$\overline{MM}_{CO_2}$	Massa molecular do dióxido de carbono $[kg/kmol]$

$\overline{MM}_{comb}$	Massa molecular do combustível [$kg/kmol$]
$\overline{MM}_{H_2O}$	Massa molecular do vapor d'água [$kg/kmol$]
$\overline{MM}_{j^*}$	Massa molecular do reagente j que fornece o menor valor para $R_{\alpha,k}$ [$kg/kmol$]
$\overline{MM}_{N_2}$	Massa molecular do nitrogênio [$kg/kmol$]
$\overline{MM}_{O_2}$	Massa molecular do oxigênio [$kg/kmol$]
m	Massa total da mistura [kg]
m_μ	Massa reduzida [kg]
m_α	Massa do componente α na mistura [kg]
m_{Ar}^r	Massa real de ar [kg_{Ar}/kg_{comb}]
m_{Ar}^t	Massa teórica de ar [kg_{Ar}/kg_{comb}]
m_{gas}^r	Massa real de gás seco por massa de combustível queimado [kg_{gas}/kg_{comb}]
m_{gas}^t	Massa teórica de gás seco por massa de combustível queimado [kg_{gas}/kg_{comb}]
$m_{O_2}^t$	Massa teórica de oxigênio [kg_{O_2}/kg_{comb}]
$\frac{n_A}{V}$	Número de moléculas da espécie A [$1/m^3$]
$\frac{n_B}{V}$	Número de moléculas da espécie B [$1/m^3$]
$\frac{n}{V}$	Número de moléculas de uma determinada espécie química [$1/m^3$]
$\vec{n}$	Componente normal externa à superfície $[-]$
n	Número total de moles na mistura [$kmol/kg$]
n	Índice de refração do meio $[-]$
N_2	Nitrogênio [$kmol/kg$]
n_α	Número de moles do componente α [$kmol/kg$]
n_A	Número de moles do componente A [$kmol/kg$]
n_B	Número de moles do componente B [$kmol/kg$]
Nu	Número de Nusselt [$h_{inf}L/\kappa$]
$\mathcal{N}_{AV}$	Número de Avogadro [$6,022 \times 10^{26} \text{ molecules}/kmol$]
N	Interface entre os volumes P e N , ou ponto acima do volume central P , ou ainda, número de superfícies de uma cavidade $[-]$

O_2	Oxigênio [$kmol/kg$]
O_{cAr}	Orifício por onde é injetado o ar [mm]
O_{cex}	Orifício externo por onde é injetado o combustível [mm]
O_{cin}	Orifício interno por onde é injetado o combustível [mm]
ox	Oxigênio $[-]$
O	Interface entre os volumes P e O , ou ponto à esquerda do volume central P $[-]$
Pr	Número de Prandtl $[-]$
Pr_t	Número de Prandtl turbulento $[-]$
P	Ponto central sobre o volume de controle $[-]$
p	Pressão [Pa]
p^*	Pressão modificada [Pa]
p_c	Pressão crítica [Pa]
P_k	Produção ou dissipação de energia cinética turbulenta [$kg/m\ s^3$]
p_r	Pressão reduzida $[-]$
p_{CO_2}	Pressão parcial do CO_2 [atm]
p_{H_2O}	Pressão parcial do H_2O [atm]
p_T	Pressão total [atm]
PCI	Poder calorífico inferior do combustível [W/kg]
Pr	Número de Prandtl [$c_p\mu/\kappa$]
Pr_t	Número de Prandtl turbulento $[-]$
$\mathcal{P}$	Probabilidade $[-]$
Q	Taxa de energia total hemisférica trocada pela superfície de área A [W]
Q_R	Quantidade de calor irradiada [W]
Q_r	Taxa de energia total hemisférica refletida pela superfície de área A [W]
$Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma}$	Taxa de energia espectral hemisférica emitida por $\mathcal{V}_{\gamma^*}$ e absorvida por $\mathcal{V}_{\gamma}$ [W]
$Q_{a,\gamma}$	Taxa de energia total hemisférica absorvida por $\mathcal{V}_{\gamma}$ [W]
$Q_{a,j-\gamma}$	Taxa de energia total hemisférica proveniente de dA_j e absorvida por $d\mathcal{V}_{\gamma}$ [W]

Q_{adv}	Fluxo de calor por advecção das paredes da câmara de combustão para seu exterior $[W/m^2]$
Q_a	Taxa de energia total hemisférica absorvida pela superfície de área A $[W]$
Q_b	Taxa de energia total hemisférica emitida pelo corpo negro à temperatura da superfície de área A $[W]$
Q_{conv}	Fluxo de calor por convecção entre os gases quentes e as paredes da câmara de combustão $[W/m^2]$
$Q_{e,\gamma}$	Taxa de energia total hemisférica emitida por $\mathcal{V}_\gamma$ $[W]$
Q_e	Taxa de energia total hemisférica emitida pela superfície de área A $[W]$
Q_i	Taxa de energia total hemisférica que incide na superfície de área A $[W]$
Q_{j-k}	Taxa de energia total hemisférica que deixa A_j e chega em A_k $[W]$
$q_{R,\gamma}$	Fluxo de energia radiante total hemisférica perdida por $\mathcal{V}_\gamma$ $[W/m^3]$
$q_{R,k}$	Fluxo de energia radiante total hemisférica perdida pela superfície k $[W/m^2]$
Q_{rad}	Fluxo de calor por radiação entre os gases quentes e as paredes da câmara de combustão $[W/m^2]$
$\overline{R}$	Constante universal dos gases $[8314,5 \text{ kJ/kmol K}]$
$\overline{R_{CH_4}}$	Taxa de reação química do metano $[kg/m^3s]$
$\overline{R_{CO_2}}$	Taxa de reação química do dióxido de carbono $[kg/m^3s]$
$\overline{R_{CO}}$	Taxa de reação química do monóxido de carbono $[kg/m^3s]$
$\overline{R_{H_2O}}$	Taxa de reação química do vapor d'água $[kg/m^3s]$
$\overline{R_{O_2}}$	Taxa de reação química do oxigênio $[kg/m^3s]$
$\overline{rw}$	Velocidade angular média $[m/s]$
R	Constante dos gases ideais $[J/kgK]$
R	Raio $[m]$
r	Coordenada radial $[m]$
R'_α	Constante dos gases ideais do componente α da mistura $[kJ/kgK]$
R_j	Raio do volume de gás j , ou superfície j $[m]$

R_k	Raio do volume de gás k , ou superfície k [m]
$R_{\alpha,k}$	Taxa de formação ou destruição da espécie α em todas as reações k [kg/s m ³]
R_α	Taxa de formação ou destruição da espécie α [kg/s m ³]
R_{bico}	Raio do bico injetor que abastece a câmara combustão [cm]
R_{bocal}	Raio do bocal de saída da câmara de combustão [cm]
r_{CO_2}	Razão mássica de dióxido de carbono [kg _{CO₂} /kg _{comb}]
R_{comb}	Taxa de destruição de combustível na reação química de combustão [kg/s m ³]
R_{dif_u}	Raio do queimador que abastece a câmara combustão [m]
r_{H_2O}	Razão mássica de vapor d'água [kg _{H₂O} /kg _{comb}]
R_{min}	Raio mínimo [m]
r_{N_2}	Razão mássica de nitrogênio [kg _{N₂} /kg _{comb}]
R_{ox}	Taxa de destruição de oxigênio na reação química de combustão [kg/s m ³]
R_{prod}	Taxa de formação de gases produtos na reação química de combustão [kg/s m ³]
r_{SO_2}	Razão mássica de dióxido de enxofre [kg _{SO₂} /kg _{comb}]
R_c	Raio da câmara de combustão [cm]
Re	Número de Reynolds [$\rho v d / \mu$]
$(\overline{s_j g_\gamma})_i$	Área de troca direta entre a superfície j e o volume de gás $\mathcal{V}_\gamma$ [m ²]
$(\overline{s_j s_k})_i$	Área de troca direta entre a superfície j e a superfície k [m ²]
$\dot{S}^\theta$	Termo fonte matemático da equação de conservação de rw [kg/m ² s ²]
$\dot{S}^h$	Termo fonte matemático da equação de conservação de h [kW/m ³]
$\dot{S}^v$	Termo fonte matemático da equação de conservação de v [kg/m ² s ²]
$\dot{S}^\alpha$	Termo fonte matemático da equação de conservação de f_α [kg/s m ³]
$\dot{S}^{fx}$	Termo fonte matemático da equação de conservação de f_{fx} [kg/s m ³]
$\dot{S}^u$	Termo fonte matemático da equação de conservação de u [kg/m ² s ²]
$s_j \vec{g}_\gamma$	Área de fluxo direcionado entre a superfície j e o volume de gás $\mathcal{V}_\gamma$ [W/m ²]
$s_j \vec{s}_k$	Área de fluxo direcionado entre a superfície j e a superfície k [W/m ²]
$\overline{\dot{S}^\epsilon}$	Termo fonte médio da equação de conservação de ϵ [m ² /s ³]

$\overline{\dot{S}^h}$	Termo fonte médio da equação de conservação de $\bar{h}$ [kW/m^3]
$\overline{\dot{S}^k}$	Termo fonte médio da equação de conservação de k [m^2/s^2]
$\overline{\dot{S}^\alpha}$	Termo fonte médio da equação de conservação $\overline{f_\alpha}$ [$kg/s\,m^3$]
$\overline{\dot{S}^\theta}$	Termo fonte matemático médio da equação de conservação de $\overline{r\bar{w}}$ [kg/m^2s^2]
$\overline{\dot{S}^u}$	Termo fonte matemático médio da equação de conservação de $\bar{u}$ [kg/m^2s^2]
$\overline{\dot{S}^v}$	Termo fonte matemático médio da equação de conservação de $\bar{v}$ [kg/m^2s^2]
$\overline{S_{rad}}$	Termo fonte médio da equação de $\bar{h}$ devido à radiação térmica [W/m^3]
$\overline{S_{rea}}$	Termo fonte médio da equação de $\bar{h}$ devido às reações químicas [W/m^3]
S	Entropia [kJ/kg]
S	Enxofre [$kmol/kg$]
S	Trajectoria percorrida pela radiação [m]
s	Relação mássica de oxigênio e combustível [kg_{ox}/kg_{comb}]
S^*	Trajectoria percorrida pela radiação [m]
S^ϕ	Termo fonte da variável ϕ [$-$]
$S_{\gamma-k}$	Trajectoria percorrida pela radiação do volume γ até a superfície k [m]
$S_{\gamma^*-\gamma}$	Trajectoria percorrida pela radiação entre os volumes de gás dV_{γ^*} e dV_γ [m]
S_{j-k}	trajectoria percorrida pela radiação da superfície j até a superfície k [m]
S_{rad}	Termo fonte da equação de conservação de h devido à radiação térmica [W/m^3]
S_{rea}	Termo fonte da equação de conservação de h devido às reações químicas [W/m^3]
Sc	Número de Schmidt [ν/D]
Sc_t	Número de Schmidt turbulento [$-$]
sf	Fator estéro ou <i>steric factor</i> [$-$]
SO_2	Dióxido de enxofre [$kmol/kg$]
SO_3	Trióxido de enxofre [$kmol/kg$]
S	Interface entre os volumes P e S , ou ponto abaixo do volume central P [$-$]
$\bar{T}$	Temperatura média [K]
$\bar{T}_p$	Temperatura da parede de aço da câmara de combustão [K]

$\overline{T}_{bulk}$	Temperatura da mistura $[K]$
T	Temperatura $[K]$
t	Tempo $[s]$
t_0	Tempo inicial $[s]$
T_c	Temperatura crítica $[K]$
T_g	Temperatura média dos gases de combustão $[K]$
T_j	Temperatura da superfície de área A_j $[K]$
T_r	Temperatura reduzida $[-]$
T_s	Temperatura média da superfície da câmara de combustão $[K]$
T_{γ^*}	Temperatura do volume de gás participante $\mathcal{V}_{\gamma}^*$ $[K]$
T_{γ}	Temperatura do volume de gás participante $\mathcal{V}_{\gamma}$ $[K]$
T_e	Temperatura da fonte emissora, T_e $[K]$
$T_{in,ar}$	Temperatura do ar na entrada $[K]$
$T_{in,comb}$	Temperatura do combustível na entrada $[K]$
T_{inf}	Temperatura da água que circunda a câmara de combustão $[K]$
T_{in}	Temperatura de entrada do ar e do combustível na câmara de combustão $[K]$
$T_{ref,\alpha}$	Temperatura de referência para a espécie α $[K]$
T_{ref}	Temperatura de referência $[K]$
$\dot{U}^u$	Termo fonte da equação de velocidade axial $[kg/s^2m^2]$
$\overline{u}_{\infty}$	Velocidade média do escoamento não perturbado, próximo à parede $[m/s]$
$\overline{U}$	Velocidade média $[m/s]$
$\overline{u}$	Velocidade axial média $[m/s]$
$\overline{u}_{ant}$	Velocidade axial na região imediatamente anterior à saída da câmara $[m/s]$
$\overline{u}_{entra}$	Velocidade na entrada da câmara $[m/s]$
$\overline{u}_{sai}$	Velocidade axial na saída da câmara $[m/s]$
U	Velocidade $[m/s]$
u	Velocidade escalar na direção axial $[m/s]$

U'	Flutuação da velocidade $[m/s]$
u^*	Velocidade de referência $[m/s]$
u^+	Velocidade característica adimensional $[-]$
u_l	Velocidade axial na interface l $[m/s]$
u_o	Velocidade axial na interface o $[m/s]$
$u_{in,ar}$	Velocidade do ar na entrada $[m/s]$
$u_{in,comb}$	Velocidade do combustível na entrada $[m/s]$
$\mathcal{V}$	Volume $[m^3]$
$\dot{V}^v$	Termo fonte da equação de velocidade radial $[kg/s^2m^2]$
$\vec{V}$	Vetor velocidade $[m/s]$
$\bar{\mathcal{V}}_A$	Volume molar parcial do componente A da mistura $[m^3/kmol]$
$\overline{v}_A^T$	Velocidade média da molécula A em função da temperatura $[m/s]$
$\overline{v}_B^T$	Velocidade média da molécula B em função da temperatura $[m/s]$
$\overline{v}^T$	Velocidade média em função da temperatura da α -ésima molécula $[m/s]$
$\bar{V}$	Velocidade média $[m/s]$
$\bar{v}$	Velocidade radial média $[m/s]$
V	Velociade $[m/s]$
v	Velocidade escalar na direção radial $[m/s]$
V'	Flutuação da velocidade $[m/s]$
v_n	Velocidade radial na interface n $[m/s]$
v_s	Velocidade radial na interface s $[m/s]$
$\mathcal{V}_{comp}$	Volume total dos componentes $[m^3]$
$\mathcal{V}_{mist}$	Volume total da mistura $[m^3]$
$\mathcal{V}_{\gamma^*}$	Volume de gás participante γ^* $[m^3]$
$\mathcal{V}_{\gamma}$	Volume de gás participante γ $[m^3]$
$\dot{W}^w$	Termo fonte da equação de velocidade angular $[kg/s^2m^2]$
w	Velocidade escalar no sentido angular $[m/s]$

x	Coordenada axial $[m]$
x_l	Comprimento característico $[m]$
y	Direção ou distância normal a uma superfície plana $[m]$
y^+	Dimensão característica adimensional $[-]$
y_α	Fração molar do componente α $[\%]$
Y_p	Distância do centro do volume até a parede $[m]$
$\bar{Z}_A$	Propriedade molar parcial do componente A da mistura $[-/kmol]$
$\bar{Z}_B$	Propriedade molar parcial do componente B da mistura $[-/kmol]$
Z	Propriedade extensiva $[-]$
z	Fator de compressibilidade $[-]$
Z_α	Propriedade extensiva do componente α da mistura $[-]$
Z_{mist}	Propriedade extensiva total da mistura $[-]$
Z_c	Número de colisões experimentado por uma molécula de uma determinada espécie química $[1/s]$
Zc^r	Número de colisões experimentado por uma molécula de gás real $[1/s]$
Zc_{AB}^r	Número de colisões experimentado por uma molécula de gás real $[1/s\ m^3]$

Letras Gregas

α	Absortividade ou absorptância total hemisférica $[-]$
α	Difusividade térmica dos gases $[m^2/s]$
$\alpha_g(S)$	Absortância direcional total do gás $[-]$
α_s	Absortividade da superfície da câmara de combustão $[-]$
$\alpha_{\lambda,k}$	Absortividade espectral hemisférica da superfície k $[-]$
α_λ	Absortividade ou absorptância espectral hemisférica $[-]$
β	Ângulo de zênite $[^\circ]$
β_k	Expoente de temperatura na reação k $[-]$
β_j	Ângulo de zênite da superfície j $[^\circ]$
β_k	Ângulo de zênite da superfície k $[^\circ]$

$\cap$	Hemisféreo [πrad]
χ	Coordenada espacial (x , r e θ) $[-]$
Δr_n	Distância entre os pontos P e N [m]
Δr_s	Distância entre os pontos P e S [m]
Δx_l	Distância entre os pontos P e L [m]
Δx_o	Distância entre os pontos P e o [m]
$\Delta \lambda_i$	Intervalo espectral no qual o coeficiente de absorção, a_i , é constante [μm]
Δl	Distância entre a parede e o primeiro volume de controle interno da câmara [m]
Δr	Raio do volume de controle [m]
Δr_N	Distância entre os pontos P e N [m]
Δr_S	Distância entre os pontos P e S [m]
ΔR_j	Espessura radial do volume de gás j [m]
ΔR_k	Espessura radial do volume de gás k [m]
Δx	Largura do volume de controle [m]
Δx_L	Distância entre os pontos P e L [m]
Δx_O	Distância entre os pontos P e O [m]
ΔX_j	Espessura axial do volume de gás j [m]
ΔX_k	Espessura axial do volume de gás k [m]
ΔX_l	Distância entre os volumes de gás, ou de superfície [m]
$\Delta \mathcal{V}_{mist}$	Variação de volume devido a mistura [m^3]
ϵ	Dissipação da energia cinética turbulenta [m^2/s^3]
η	Número de onda ou <i>wave number</i> [cm^{-1}]
$\eta_{\alpha,k}$	Coeficiente estequiométrico da espécie α na reação k $[-]$
$\eta'_{\alpha,k}$	Coeficiente estequiométrico da espécie α nos reagentes da reação k $[-]$
$\eta''_{\alpha,k}$	Coeficiente estequiométrico da espécie α nos produtos da reação k $[-]$
$\eta_{j^*,k}$	Coeficiente estequiométrico do reagente j que fornece o menor valor para $R_{\alpha,k}$ em cada reação k $[-]$

$\eta_{p,k}$	Coeficiente estequiométrico do produto p na reação k [—]
Γ	Coeficiente de difusão da variável ϕ [m^2/s]
γ	Ângulo azimutal [°]
Γ_l	Coeficientes difusivo na interface l [—]
Γ_n	Coeficientes difusivo na interface n [—]
Γ_o	Coeficientes difusivo na interface o [—]
Γ_s	Coeficientes difusivo na interface s [—]
Γ_T	Coeficiente de difusividade térmica [m^2/s]
$\gamma_{\alpha,k}$	Expoente de concentração para cada espécie reagente α na reação k [$kmol/kg$]
Γ_α	Coeficiente de difusão do componente α na mistura [m^2/s]
Γ_{comb}	Coeficiente de difusão do combustível na mistura [m^2/s]
Γ_{ox}	Coeficiente de difusão do oxigênio na mistura [m^2/s]
∞	Infinito [—]
ι	Fator acêntrico da equação de f [—]
κ	Condutividade térmica da mistura [W/mK]
κ_α	Condutividade térmica do componente α na mistura [W/mK]
κ_{Fe}	Condutividade do material das paredes (Aço) [W/mK]
Λ	Constante de proporcionalidade [—]
λ	Comprimento de onda [μm]
λ	Excesso de ar [%]
μ	Viscosidade absoluta [$N\ s/m^2$]
μ_t	Viscosidade turbulenta [$N\ s/m^2$]
$\vec{\nabla}\bar{p}$	Gradiente de pressão média [Pa]
$\vec{\nabla}p$	Gradiente de pressão [Pa]
$\vec{\nabla}q_R$	Taxa de energia total hemisférica perdida por unidade de volume [W/m^3]
$\vec{\nabla}$	Operador vetorial [—]
ν	Viscosidade cinemática [m^2/s]

ω	Ângulo sólido [<i>sr</i>]
$\overline{\Phi}$	Média da variável genérica [—]
$\overline{\Phi'}$	Média das flutuações da variável genérica Φ' [—]
Φ	Variável genérica [—]
ϕ	Variável genérica [—]
Φ'	Flutuação da variável genérica [—]
ϕ_L	Variável genérica no ponto <i>L</i> [—]
ϕ_N	Variável genérica no ponto <i>N</i> [—]
ϕ_O	Variável genérica no ponto <i>O</i> [—]
ϕ_P	Variável genérica no ponto <i>P</i> [—]
ϕ_S	Variável genérica no ponto <i>S</i> [—]
π	Número de pí [3, 1415926]
Π_α	Produtório [—]
Ψ	Constante de ajuste ou variável de integração [—]
ρ	Massa específica da mistura [<i>kg/m</i> ³]
$\overline{\rho u' f'_\alpha}$	Difusividade adicional de f_α devido à turbulência [<i>m</i> ² / <i>s</i>]
$\overline{\rho u' h'}$	Difusividade adicional de h devido à turbulência [<i>m</i> ² / <i>s</i>]
$\overline{\rho u' v'}$	Tensões de Reynolds [<i>Pa</i>]
$\overline{\rho v' f'_\alpha}$	Difusividade adicional de f_α devido à turbulência [<i>m</i> ² / <i>s</i>]
$\overline{\rho v' h'}$	Difusividade adicional de h devido à turbulência [<i>m</i> ² / <i>s</i>]
ρ_α	Massa específica do componente α na mistura [<i>kg/m</i> ³]
ρ_{ant}	Massa específica da mistura na região imediatamente anterior à saída da câmara [<i>kg/m</i> ³]
ρ_{Ar}	Massa específica do ar [<i>kg/m</i> ³]
ρ_{CH_4}	Massa específica do metano [<i>kg/m</i> ³]
ρ_{entra}	Massa específica da mistura na entrada da câmara [<i>kg/m</i> ³]
ρ_{Fe}	Massa específica do material das paredes (Aço) [<i>kg/m</i> ³]

ρ_{GN}	Massa específica do gás natural [kg/m^3]
ρ_{r,CH_4}	Massa específica do metano em relação ao ar [%]
$\rho_{r,GN}$	Massa específica do gás natural em relação ao ar [%]
ρ_{sai}	Massa específica da mistura na saída da câmara [kg/m^3]
σ	Constante de Stefan-Boltzmann [$5,678 \times 10^{-8} W/m^2 K^4$]
$\sigma_{d,AB}$	Diâmetro equivalente das moléculas das espécies A e B [m]
$\sigma_{d,A}$	Diâmetro da molécula da espécie A [m]
$\sigma_{d,B}$	Diâmetro da molécula da espécie B [m]
σ_B	Constante de Boltzman [$1,381 \times 10^{-23} J/K$]
σ_d	Diâmetro molecular de uma determinada espécie química [m]
σ_k	Número de Prandtl turbulento da equação de conservação de k [—]
σ_ϵ	Número de Prandtl turbulento da equação de conservação de ϵ [—]
σ_λ	Coefficientes de espalhamento espectral [m^{-1}]
σ_t	Número de Prandtl turbulento ou de Schmidt turbulento [—]
τ	Tensão total [Pa]
τ	Transmissividade ou transmitância total hemisférica [—]
τ_λ	Transmissividade ou transmitância espectral hemisférica [—]
$\tau_g(S)$	Transmitância total direcional do gás [—]
τ_t	Escala de tempo característico do escoamento [—]
τ_w	Tensão na parede [Pa]
τ_{ch}	Escala de tempo característico das reações químicas [—]
θ	Coordenada angular [$^\circ$]
ϵ	Emissividade ou emitância total hemisférica [—]
ϵ_λ	Emissividade ou emitância espectral hemisférica [—]
$\epsilon_g(S)$	Emitância direcional total do gás [—]
ϵ_g	Emissividade do gás de combustão [—]
ϵ_s	Emissividade da superfície da câmara de combustão [—]

$\varepsilon_{\lambda,k}$	Emissividade espectral hemisférica da superfície k $[-]$
ε_{Fe}	Emissividade do material das paredes (Aço) $[-]$
ϱ	Constante das equações de estado $[-]$
$\bar{\vartheta}$	Volume específico molar $[m^3/kgkmol]$
ϑ	Volume específico $[m^3/kg]$
ϑ_c	Volume específico crítico $[m^3/kg]$
ξ	Constante das equações de estado $[-]$

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Esboço em corte de um gerador de vapor [Narciso, 1998].	2
2.1	Volume de controle infinitesimal.	22
2.2	Ordem de grandeza do volume cilíndrico onde é possível que ocorram colisões para uma determinada molécula em movimento [Turns, 2000].	31
2.3	Representação dos fluxos de espécies químicas segundo o modelo SCRS.	41
3.1	Energia radiante abandonando o elemento de área dA	65
3.2	Integração para a intensidade de radiação no hemisfério.	66
3.3	Efeito do comprimento de onda na emitância espectral hemisférica do tungstênio [Siegel e Howell, 2002].	71
3.4	Efeito do comprimento de onda na absorptância espectral direcional do dióxido de carbono [Siegel e Howell, 2002].	72
3.5	Geometria para definição de intensidade de radiação em meio participante.	73
3.6	Incidência de intensidade de radiação.	73
3.7	Volume cilíndrico de um meio participante emitindo energia por radiação para uma superfície.	75
3.8	Emissão de energia radiante num volume de controle de gás.	77
3.9	Cavidade contendo um gás participante composta por N superfícies isotérmicas.	78
3.10	Troca de energia radiante entre duas superfícies com meio participante entre elas.	79
3.11	Volume de fluido submetido a um fluxo de calor por radiação [Özişik, 1998].	88
3.12	Troca de energia radiante entre uma zona de superfície e uma zona de gás.	90
3.13	Troca de energia radiante entre duas zona de superfície.	92
3.14	Troca de energia radiante entre duas zonas de gás.	95
3.15	Troca de energia radiante entre uma zona de superfície e uma zona de gás.	97

3.16	Zonas de radiação no interior de uma cavidade cilíndrica.....	100
3.17	Zonas de gás [Sika J., 1991].	100
3.18	Zonas de gás e superfície periférica [Sika J., 1991].	101
3.19	Zonas de gás e superfície radial [Sika J., 1991].	102
3.20	Zonas de superfície periférica [Sika J., 1991].	103
3.21	Zonas de superfície radial [Sika J., 1991].....	104
3.22	Zonas de superfície radial e periférica [Sika J., 1991].	105
4.1	Volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional.....	110
4.2	Teste de independência de malha: Perfis de temperaturas ao longo do raio da câmara para a posição axial de 0,313 <i>m</i> da entrada, utilizando diferentes malhas.	118
4.3	Teste de independência de malha: Perfis de temperaturas ao longo do raio da câmara para a posição axial de 1,313 <i>m</i> da entrada, utilizando diferentes malhas.	119
5.1	Esboço em corte de uma câmara de combustão de um gerador de vapor (Garréton e Simonin, 1994).	121
5.2	Vista parcial em corte da malha bidimensional sobre a câmara de combustão (30x60) volumes.	129
5.3	Distribuição de temperatura sobre a câmara de combustão: (a) Modelo E-A com duas etapas de reação química - Nieckele et al. (2002); (b) Modelo E-A com duas etapas de reação química - presente trabalho; (c) Modelo E-A com uma etapa de reação química - presente trabalho; (d) Modelo SCRS - presente trabalho.	131
5.4	(a) Função de Corrente para o modelo E-A; (b) Vetores velocidade para o modelo E-A.	133
5.5	(a) Viscosidade efetiva ($\mu + \mu_t$) ; (b) Energia cinética turbulenta.	134
5.6	(a) Temperatura ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de combustível ao longo da linha de simetria.	136
5.7	(a) Concentração de oxigênio ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de dióxido de carbono ao longo da linha de simetria.	137

5.8	(a) Concentração de monóxido de carbono ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de monóxido de carbono sobre a posição radial a 1,312 <i>m</i> da entrada.	138
5.9	Distribuição de temperatura sobre posições radiais: (a) 0,312 <i>m</i> da entrada; (b) 0,912 <i>m</i> da entrada; (c) 1,312 <i>m</i> da entrada.	139
5.10	Distribuição de oxigênio na câmara de combustão: (a) Modelo SCRS; (b) Modelo E-A, com duas etapas de reação química.	141
5.11	(a) Distribuição de dióxido de carbono na câmara de combustão; (b) Distribuição de monóxido de carbono na câmara de combustão.	142
5.12	Concentração de oxigênio sobre posições radiais: (a) 0,312 <i>m</i> da entrada; (b) 0,912 <i>m</i> da entrada; (c) 1,312 <i>m</i> da entrada.	143
5.13	Concentração de dióxido de carbono sobre posições radiais: (a) 0,312 <i>m</i> da entrada; (b) 0,912 <i>m</i> da entrada; (c) 1,312 <i>m</i> da entrada.	144
6.1	Vista parcial em corte da malha bidimensional sobre a câmara de combustão (30x60) volumes.	147
6.2	Esboço em corte de uma câmara de combustão cilíndrica.	147
6.3	Queimador comercial a gás natural [Kei-Tek, 1998].	148
6.4	Queimador usado na solução do problema.	149
6.5	(a) Distribuição de temperatura na câmara de combustão sem radiação térmica; (b) Distribuição de temperatura na câmara de combustão com radiação térmica; (c) Distribuição das taxas líquidas de transferência de calor por radiação (Positivo → emite mais energia do que recebe; Negativo → recebe mais energia do que emite); (d) Distribuição do número de Damköler.	152
6.6	Comparação de resultados com e sem a presença da radiação térmica: (a) Temperatura ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de combustível ao longo da linha de simetria.	154
6.7	Comparação de resultados com e sem a presença da radiação térmica: (a) Concentração de oxigênio ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de dióxido de carbono ao longo da linha de simetria.	155

6.8	Comparação de resultados com e sem a presença da radiação térmica: (a) Concentração de monóxido de carbono ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de monóxido de carbono sobre a posição radial a 1,312 <i>m</i> da entrada.	156
6.9	Distribuição da concentração de monóxido de carbono na câmara de combustão: (a) Com radiação térmica; (b) Sem radiação térmica.	157
6.10	Análise do efeito da radiação térmica na distribuição de temperatura sobre posições radiais: (a) 0,312 <i>m</i> da entrada; (b) 0,912 <i>m</i> da entrada; (c) 1,312 <i>m</i> da entrada.	158
6.11	Análise do efeito da radiação térmica na concentração de oxigênio sobre posições radiais: (a) 0,312 <i>m</i> da entrada; (b) 0,912 <i>m</i> da entrada; (c) 1,312 <i>m</i> da entrada.	159
6.12	Análise do efeito da radiação térmica na concentração de dióxido de carbono sobre posições radiais: (a) 0,312 <i>m</i> da entrada; (b) 0,912 <i>m</i> da entrada.	160
6.13	Análise do efeito da radiação térmica na concentração de dióxido de carbono sobre a posição radial a 1,312 <i>m</i> da entrada.	161
6.14	Fluxos de calor sobre as paredes da câmara: (a) Parede radial na região de entrada; (b) Parede periférica da câmara; (c) Parede radial na região de saída.	164
A.1	Implementação do modelo de câmara de combustão no IPSEpro-MDK.	182

ÍNDICE DE TABELAS

3.1	Coeficientes para cálculo da emitância total - Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) [Smith et al., 1982, França, F. H. R., 1995].	86
3.2	Argumentos e coeficientes ζ das funções $\overline{g_1 s_2})_o$, $\overline{g_1 g_2})_o$ e $\overline{s_1 s_2})_o$ [Sika J., 1991].	106
4.1	Identificação da variável genérica ϕ , coeficiente difusivo, e termos fontes das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta, usando o modelo SCRS.	113
4.2	Identificação da variável genérica ϕ , coeficiente difusivo, e termos fontes das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta, usando o modelo E-A.	114
5.1	Propriedades termofísicas [Diversas fontes].	126
5.2	Calor específico à pressão constante como função da temperatura em J/kgK [Van Wylen et al., 1998].	127
5.3	Parâmetros das equações de reações químicas do modelo E-A [Turns, 2000; Nieckele et al., 2002]	127
6.1	Principais dimensões do bico injetor e do bocal de saída.	149
6.2	Condições de contorno, onde as propriedades termofísicas sem sub-índice são as da mistura.	150
6.3	Análise dos fluxos de calor sobre a câmara de combustão	162
B.1	Parâmetros das equações de estado [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982].	185
B.2	Constantes empíricas para as equações de Benedict-Webb-Rubin [Van Wylen et al., 1998].	188
B.3	Composição do gás natural bruto em alguns Países [Vielmo et al., 2001].	192

B.4	Massa molecular, condutividade térmica, e constante universal dos gases para as principais substâncias que compõe o gás natural [Vielmo et al., 2001].	193
-----	---	-----

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Reações de combustão estão presentes em muitos processos industriais de manufatura de produtos e também na geração de energia, seja ela elétrica, mecânica ou térmica. Em muitos processos industriais tais como secagem de materiais cerâmicos, moldagem de polímeros, fundição de metais, tratamentos térmicos de peças metálicas, produção e moldagem de vidro, manufatura de alimentos, etc., existe a queima de algum tipo combustível. Em processos intermediários como a geração de vapor, a produção de energia elétrica, simples ou combinada, a climatização de ambientes, dentre outros, a reação química de oxidação de uma determinada substância está presente. Uma melhor modelação deste fenômeno influencia diretamente na eficiência produtiva.

No Brasil, onde a produção de eletricidade é basicamente hídrica, crises energéticas tem surgido devido à sazonalidade climática ocorrida em determinadas épocas, e também ao aumento do consumo de energia associado à falta de investimentos no sistema. Para solucionar esta carência novas alternativas tiveram que ser apresentadas. Uma delas, a construção de um número significativo de termelétricas a GN (gás natural), constitui-se num importante desafio. Além disso, basicamente por necessidade, as indústrias estão almejando cada vez mais tornarem-se independentes energeticamente, causando um aumento na utilização de equipamentos industriais alimentados por combustíveis orgânicos, ao invés de eletricidade. Ainda, por questão de oportunidade e disponibilidade, a utilização de GN como combustível aparece na matriz energética nacional como grande concorrente dos já mais difundidos GLP (Gás Liquefeito de Petróleo), óleo Diesel, lenha e outras biomassas. Com toda esta “revolução energética” os processos de combustão passam a ganhar uma maior importância, pois de boa parte deles dependem os custos de produção.

Um processo bastante importante no cenário industrial é a produção de vapor através da queima de um determinado combustível. Do ponto de vista energético a eficiência deste processo depende do entendimento da reação de combustão ocorrida no interior da câmara do gerador de vapor. A Figura 1.1 mostra um gerador de vapor. As trocas térmicas entre os produtos da combustão e as paredes internas do gerador de vapor necessitam de uma análise bastante detalhada, para que se possa alcançar um melhor rendimento térmico. Em determinadas situações uma grande perda de energia ocorre no processo, pelo fato do equipamento estar operando em condições inadequadas. Este tipo de problema é bastante comum quando se converte uma caldeira originalmente alimentada por um óleo combustível para gás natural, por exemplo. As trocas térmicas presentes na combustão de óleo não possuem as mesmas características daquelas que ocorrem na combustão de GN, ou de GLP. No caso da queima de óleo a transferência de calor por radiação possui um efeito mais significativo no processo, enquanto que na queima de gases a troca de calor por convecção é que se apresenta de forma dominante [Hottel e Sarofim, 1967].

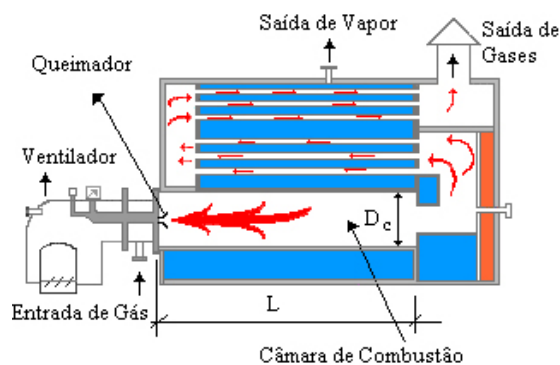


Figura 1.1 – Esboço em corte de um gerador de vapor [Narciso, 1998].

Até mesmo na conversão de um equipamento abastecido com GLP para GN são necessárias uma série de modificações, e muitas vezes mesmo com as modificações sendo feitas de forma adequada, o rendimento do equipamento acaba sendo prejudicado [Narciso, 1998]. Deste modo para evitar perdas na conversão de equipamentos como descrito acima, ou ainda na construção de novas máquinas térmicas, é necessário que se tenha um melhor entendimento sobre o processo de combustão, e consequentemente das trocas térmicas entre os gases quentes e as paredes internas das caldeiras, fornos ou aquecedores.

Além do que foi dito acima outros problemas podem surgir se o processo de com-

bustão se apresenta de forma incorreta. Um problema bastante sério que muitas vezes ocorre, o chamado processo de combustão incompleta, pode emitir substâncias tóxicas tais como o CO e os NOx (óxidos de nitrogênio), que além de prejudicar termicamente o processo acabam por poluir o meio ambiente. A produção de NOx é parcialmente responsável por danos ambientais incluindo fumaça (*smog*), enfermidade em organismos, corrosão de metais, redução do crescimento da vegetação, dentre outros [Glassman, 1977].

1.1 Revisão da Literatura

Combustíveis fósseis são a maior fonte de energia no mundo e possivelmente continuarão sendo por um longo tempo [Eaton et al., 1999]. Grandes esforços estão sendo feitos com relação ao uso destes combustíveis de uma forma mais eficiente e ambientalmente aceitável. Durante o último quarto de século uma parte significativa destes esforços teve como foco principal o desenvolvimento de modelos matemáticos multidimensionais de vários equipamentos, tais como aquecedores, reatores, geradores de vapor e queimadores. O objetivo principal é que possam ser usados para projetar e analisar processos de combustão de combustíveis fósseis ou renováveis (biomassa). Estes modelos servem como ferramentas, que reproduzem experimentos físicos através de equivalentes experimentos numéricos [Eaton et al., 1999].

O desenvolvimento de tecnologias de combustão de combustíveis fósseis no passado foi largamente de natureza empírica, sendo baseada principalmente na experiência acumulada em operações em caldeiras, e sobre dados obtidos a partir de testes simplificados. A experiência e dados obtidos empiricamente possuem aplicabilidade limitada. Quando se consideram algumas variações de parâmetros do processo, tais como estratégias de medição de queima ou a excessiva formação de poluentes, estes já se apresentam de forma mais significativa. Dados de câmaras de combustão de dimensões maiores são tipicamente limitados às medições dos seus efluentes [Eaton et al., 1999]. Dados em escalas menores, enquanto fornecem informações mais precisas do fenômeno governante, são freqüentemente de obtenção onerosa. Deste modo as conclusões para resultados desta natureza se tornam difíceis de serem extrapoladas para sistemas de grande porte. Isso ocorre principalmente por causa da complexidade da turbulência, e também dos processos reativos dos fluxos, pré-misturados ou não, da chama [Eaton et al., 1999]. As metodologias de modelamento de processos de com-

bustão podem fazer a ligação entre estes testes de sub-escala e a operação de câmaras em grandes escalas de potência. Isto deve-se ao fato de proverem informações sobre os processos de combustão que os dados experimentais por si só não podem prever.

Os modelamentos de processos de combustão podem assumir muitas formas, mas poucos possuem a capacidade de representar de maneira detalhada os principais fenômenos envolvidos (mecânica do escoamento, convecção, turbulência, reações químicas e radiação térmica). Algumas modelagens são melhores para um determinado caso, e para outras não. Existem modelagens que fazem um enfoque mais detalhado da cinética química envolvida no processo de combustão mas ignoram, ou resolvem de forma muito simplificada a mecânica do escoamento, a turbulência, a convecção de calor e a radiação térmica. Outras resolvem bem o escoamento (turbulência e convecção), com razoável atenção à cinética química do processo de combustão, e não resolvem a transferência de calor por radiação. Outros modelos apresentam pouco detalhamento tanto para a mecânica do escoamento (incluindo turbulência e convecção) e cinética química, quanto para a radiação térmica presente no processo de combustão.

Robinson [1985] apresenta a solução de um processo de combustão no interior de uma fornalha retangular vertical de uma grande caldeira de uma planta de geração de potência elétrica. São descritos um conjunto de treze equações para representar o problema. Dentre elas estão as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento em três direções, de energia, de espécies químicas, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação. Estão incluídos também modelos de reações químicas e de transferência de calor por radiação. O modelo de combustão utilizado está fundamentado no conceito de reação química em uma única etapa global entre combustível e oxidante, que combinados formam um único produto. Para calcular as reações químicas ele utiliza o modelo E-A (*Eddy Breakup - Arrhenius*), que é baseado na lei de Arrhenius conforme Glassman [1977], Kuo [1986], Fluent [1997], Eaton et al. [1999], Turns [2000] e Berg [2003], e nos modelos de dissipação de vórtices de Spalding, ou de Magnussen [Spalding, 1971; Magnussen e Hjertager, 1977; Spalding, 1977; Fluent, 1997; Isnard e Gomes, 1998; Isnard e Gomes, 1999; Eaton et al., 1999; Berg, 2003], resolvendo a equação de conservação de espécies químicas apenas para oxigênio e combustível. Deste modo a obtenção das frações de dióxido de carbono e de vapor d'água são obtidas através de relações aproximadas, assumindo que o processo de combustão ocorra localmente sob

condições de estequiometria. A transferência de calor devido à radiação é tratada através do Método de Fluxo, sendo este aplicado nas três dimensões em estudo. Este método assume que a equação exata de transferência de calor por radiação seja reduzida à uma forma unidimensional, representando uma aproximação desta equação. Esta forma aproximada é aplicada à radiação térmica que passa por um volume de controle nos dois sentidos, numa mesma direção. As duas equações resultantes, as quais são equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, podem ser combinadas para formar uma única equação diferencial de segunda ordem. O principal benefício desta técnica é que a variável dependente na equação de fluxo é tratada principalmente para as localizações mais próximas, e não para situações envolvendo todos os outros pontos do domínio. Estas equações são resolvidas em forma acoplada através do método dos Volumes Finitos [Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 1995; Ferziger e Perić, 1997; Maliska, 2003], discretizando o domínio em três dimensões. Os resultados obtidos com as simulações são comparados com dados experimentais de duas grandes fornalhas, obtendo boa concordância.

Em um trabalho semelhante ao desenvolvido por Robinson [1985], Abbas e Lockwood [1986] apresentam a descrição de um modelo matemático tridimensional completo para câmaras de combustão de caldeiras de duas grandes termelétricas: uma com queimadores frontais nas paredes e outra com queimadores nos cantos da câmara. As equações governantes do problema consistem das equações de conservação de massa, de quantidade de movimento acoplada ao modelo de turbulência $k-\epsilon$ [Launder e Spalding, 1972; Launder e Sharma, 1974; Launder e Spalding, 1974], de energia e de espécies químicas, juntamente com modelos de transferência de calor por radiação. A solução destas equações é obtida pelo método dos Volumes Finitos. Assumem que a reação química entre combustível e oxidante (oxigênio) ocorra instantaneamente, resolvendo apenas uma equação de conservação para espécies químicas. Deste modo combustível e oxigênio não coexistem em um mesmo volume. Este modelo de combustão é conhecido como SCRS - *Simple Chemically-Reacting System* [Spalding, 1979]. A transferência de calor por radiação é resolvida pelo DTRM - *Discrete Transfer Radiation Model* [Lockwood e Shah, 1981; Carvalho et al., 1991; Carvalho et al., 1993; Fluent, 1997], sendo o coeficiente de absorção do meio participante calculado usando a formulação *Mixed Grey and Clear Gas*, de Hottel e Sarofim [1967]. Os resultados obtidos com as simulações do campo de velocidades são comparados com dados experimen-

tais de escoamentos sem a presença de combustão, obtendo boa concordância. Os demais resultados não foram comparados com dados experimentais.

Correa e Shyy [1987] analisaram modelos físicos e técnicas numéricas utilizadas na queima turbulenta de gases pré-misturados em geometrias complexas. Bons resultados foram obtidos com modelos de taxas finitas generalizadas de reações químicas quando o comportamento cinético da mistura, e das reações químicas, predominava sobre os demais aspectos presentes no processo de combustão.

Uma revisão dos fundamentos da transferência de calor por radiação e também algumas variações no modelamento de sistemas de combustão podem ser encontradas em Viskanta e Meguç [1987]. Nele estão apresentados alguns métodos de solução das equações de transferência de calor por radiação (RTE – *Radiative Transfer Equation*).

Gorner e Zinzer [1990] apresentaram uma revisão de modelagens matemáticas de combustores industriais e câmaras de combustão. Mostraram a simulação de um processo de combustão com múltiplos queimadores, obtendo boa concordância entre os resultados numéricos e os experimentais.

Carvalho et al. [1993] desenvolveram um trabalho relacionado a processos envolvendo transferência de calor por radiação. Em seu trabalho estão sumarizadas as principais características da modelagem matemática para trocas térmicas em cavidades, principalmente no que diz respeito ao processo de transferência de calor por radiação.

Magel et al. [1995] apresentaram um estudo numérico utilizando o método dos Volumes Finitos para a predição do processo de combustão em *boilers*, abastecidos com carvão pulverizado. Eles utilizaram o modelo de combustão baseado no EDC – *Eddy Dissipation Concept* [Magnussen, 1989; Arina, 2000; Berg, 2003] combinado com modelo de taxas finitas de reações químicas, também conhecido como EBU – *Eddy-Breakup* [Spalding, 1971; Magnussen e Hjertager, 1977; Fluent, 1997; Berg, 2003] onde são assumidas taxas de reações químicas instantâneas. São resolvidas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento, e das quantidades escalares (entalpia e frações mássicas das principais espécies químicas envolvidas). O modelo $k-\epsilon$ é usado para simular a turbulência.

Em outro trabalho Magel et al. [1996a] investigaram numericamente o processo de combustão de gás natural em uma câmara de combustão cilíndrica axissimétrica, com um único queimador situado sobre a linha de simetria da câmara. Como resultado de suas

investigações obtiveram perfis de temperatura, de concentrações de oxigênio, de monóxido de carbono e de dióxido de carbono para várias posições de interesse no interior da câmara de combustão. Seus resultados foram comparados com dados experimentais de Garréton e Simonin [1994]. Dando seqüência ao trabalho de Magel et al. [1996a], Magel et al. [1996b] fazem um estudo, também numérico, do processo de combustão turbulenta no interior de uma câmara de combustão cilíndrica com a mesma geometria e potência do queimador utilizado no trabalho anterior ([Magel et al., 1996a]). Neste trabalho é realizada uma simulação detalhada das reações químicas para um processo de combustão turbulenta sem pré-mistura. A radiação térmica foi considerada usando o método de Ordenadas Discretas, assumindo coeficiente de absorção do gás igual a $0,5\text{ m}^{-1}$. Dentre os resultados obtidos estão os perfis de temperatura, de concentrações de oxigênio, de monóxido e de dióxido de carbono para várias posições de interesse no interior da câmara de combustão, além de resultados da taxa de formação de NOx, obtidos com cálculos de pós processamento. Os resultados deste trabalho também foram comparados com os dados experimentais de Garréton e Simonin [1994], obtendo boa concordância.

Gran e Magnussen [1996] desenvolveram um estudo numérico sobre processos reativos com chama difusiva estabilizada, verificando a capacidade de solução de modelos de combustão baseados em taxas finitas de reações químicas e também com reações químicas instantâneas. Três modelos de combustão foram investigados e comparados, o EDC - *Eddy Dissipation Concept* [Spalding, 1971; Magnussen e Hjertager, 1977], e os pré-PDF (*Presumed Probability Density Function*) β -PDF e *PDF-transport* [Kuo, 1986; Fluent, 1997; Berg, 2003]. Concluíram que quando se assumem reações químicas instantâneas, o método *PDF-transport* fornece melhores resultados para a temperatura e para as frações mássicas do que os modelos EDC e β -PDF. Quando taxas finitas de reações químicas são assumidas os resultados do modelo EDC concordam muito bem com os dados experimentais.

Pember et al. [1996] desenvolveram um estudo numérico do processo de combustão sem pré-mistura numa câmara cilíndrica vertical para baixos números de Mach. Axissimetria é assumida, e o gás natural (metano) e o ar são injetados por um queimador de 300 kW situado sobre a linha de simetria da câmara. Reações químicas de combustão em duas etapas foram consideradas. São resolvidas as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento axial e radial, com um número de turbilhonamento (*swirl*) igual a 0,56, além da

equações de conservação de energia e de espécies químicas. A turbulência é resolvida com o modelo $k - \epsilon$ padrão. A lei de Arrhenius e o *Eddy Breakup* são usados para determinar as taxas de reações químicas, sendo a taxa limite utilizada. A transferência de calor por radiação é resolvida através do método de Ordenadas Discretas. Os resultados obtidos tiveram boa concordância com os dados experimentais.

Gomes et al. [1997] investigaram a performance de um procedimento numérico desenvolvido para simular processos de combustão a gás natural em fornalhas industriais cilíndricas. Este trabalho teve o propósito de comparar resultados obtidos numericamente com resultados experimentais. Dois casos foram estudados, um correspondendo a 35% e outro a 100% da fração volumétrica de oxigênio presente no oxidante. No modelamento apresentado neste trabalho estão incluídas, além das equações de conservação de massa, de energia, de espécies químicas e de quantidade de movimento, os modelos de turbulência $k-\epsilon$, de reações químicas E-A, e de transferência de calor por radiação DTRM. O Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas, WSGGM – *Weighted Sum of Gray Gases Model* [Smith et al., 1982; Fluent, 1997; Siegel e Howell, 2002], é utilizado para o cálculo do coeficiente de absorção de energia por radiação devido ao meio participante. A integração das equações diferenciais do modelo foi realizada através do método dos Volumes Finitos, também no FLUENT [Fluent, 1997]. Os resultados obtidos neste trabalho possuem boa concordância com os resultados experimentais de Garréton e Simonin [1994].

Ha e Zhu [1998] apresentam a solução de processos de combustão turbulentos em queimadores industriais alimentados com combustíveis gasosos. São resolvidas as Equações de Navier-Stokes para a determinação do campo de velocidades em situações de jatos pulsantes e movimento angular. O modelo $k-\epsilon$ simula a turbulência presente no escoamento. Para modelar o processo de combustão utilizaram o modelo híbrido do tipo Arrhenius e um modelo modificado de dissipação de vórtices baseado no modelo EBU – *Eddy-Breakup*, para taxas finitas de reações químicas ocorrendo em três etapas. Gás metano é utilizado como combustível, e mecanismos de Zeldovich [Zeldovich et al., 1947] e N_2O são usados para a determinação da quantidade de NO.

Isnard e Gomes [1998] realizaram estudos numéricos sobre a formação de NOx em processo de combustão de gás natural em câmaras cilíndricas. Este trabalho teve como principal propósito investigar a performance de um modelo baseado na formulação de Volumes

Finitos, incluindo além das equações de conservação da energia e das espécies químicas, as equações de Navier-Stokes e o modelo de turbulência $k-\epsilon$. Também é empregado o modelo generalizado de taxas finitas de reações químicas E-A, (*Eddy Breakup - Arrhenius*) para o cálculo das reações químicas, e o modelo de transferência de calor por radiação DTRM, na previsão da formação de NOx em processos industriais de combustão a gás natural. Neste trabalho também foi feito uso do mecanismo de Zeldovich para a determinação do processo de oxidação do nitrogênio. Os resultados deste trabalho apresentam boa concordância com os resultados presentes na literatura. Seguindo nesta mesma linha de pesquisa Isnard e Gomes [1999] investigam a formação de monóxido de carbono durante a combustão de gás natural em uma câmara cilíndrica, novamente utilizando mecanismos de Zeldovich para a previsão de NOx. Em Isnard e Gomes [2000] o principal objetivo foi o de quantificar a eficiência do modelo empregado através de comparações com resultados obtidos experimentalmente. O modelamento empregado neste trabalho é semelhante ao modelo empregado em Isnard e Gomes [1998] e em Isnard e Gomes [1999]. As equações foram resolvidas através do método dos Volumes Finitos, via FLUENT. Também investigaram as conseqüências de se implementar de forma acoplada o mecanismo de Zeldovich para a formação de NOx. Os resultados se assemelham muito aos resultados obtidos experimentalmente.

Zimont et al. [1998] descreveram a teoria, a implementação, e os resultados usando o modelo computacional LEM – *Linear Eddy Model*, que simula a combustão turbulenta de gases pré-misturados com elevados números de Reynolds. Seus resultados também obtiveram boa concordância com dados experimentais, indicando que o modelo pode ser muito útil para ser usado na simulação de geometrias complexas.

Eaton et al. [1999] apresentam uma revisão de modelos aproximados de processos de combustão capazes de simular de forma bastante boa estes fenômenos. Os modelos apresentados estão baseados fundamentalmente nas equações de conservação de massa, de energia, de espécies químicas e de quantidade de movimento. Modelos de turbulência como o $k-\epsilon$, e modelos de transporte de energia radiativa, como o DTRM também são apresentados. Nestes modelamentos as taxas de reações químicas são calculadas pelo uso de sub-modelos baseados nas leis de Arrhenius, modelos de dissipação de vórtices (*Eddy-Breakup*), ou ainda com os dois acoplados (modelo E-A) sendo utilizada a taxa limite de reação. Modelos pré-PDF também são apresentados para a determinação destas reações químicas. Pode-se encontrar também

alguns sub-modelos para combustão de combustíveis particulados (sólidos) e também combustíveis líquidos. Nestes sub-modelos estão incluídas equações capazes de prever a emissão de radiação térmica por partículas em suspensão nos gases de exaustão, juntamente com os demais sub-modelos que podem calcular a formação e emissão de poluentes, tais como os óxidos de nitrogênio. São apresentadas soluções destes modelos para duas situações, uma câmara de combustão vertical retangular alimentada com gás natural, e outra com carvão pulverizado fazendo o uso do método dos Volumes Finitos, e do código computacional comercial FLUENT. São feitas comparações e discussões sobre as limitações das modelagens apresentadas.

Nieckele et al. [1999a] apresentaram os resultados de uma simulação numérica de processos de combustão de GN e oxigênio puro em um forno industrial de geometria retangular para refusão de alumínio. Neste trabalho o modelo adotado para simular o escoamento turbulento foi o $k-\epsilon$. Para o processo de combustão fizeram o uso do modelo E-A, utilizando ainda para a transferência de calor por radiação o modelo DTRM.

Nieckele et al. [1999b] apresentam um estudo numérico tridimensional da oxi-combustão num forno, também retangular, de refusão de alumínio, pelo método dos Volumes Finitos, via FLUENT. Neste trabalho foi analisado o desempenho do forno, comparando um modelo de combustão estagiada, onde o processo de combustão ocorre em duas etapas - metano reage com oxigênio para formar monóxido de carbono e água, e então o monóxido de carbono reage com o oxigênio formando dióxido de carbono, com outro de combustão não estagiada, onde o processo de combustão ocorre em uma única etapa - metano reage com oxigênio formando diretamente dióxido de carbono e água. Verificou-se que o modelo de combustão estagiada forneceu melhores resultados.

Librovich et al. [1999] apresentaram uma análise numérica de processos de combustão laminar de combustíveis gasosos, com e sem pré-mistura, em nuvens de gás numa atmosfera não confinada, levando em conta a dependência da massa específica sobre a temperatura e a composição do gás, assim como a dependência da temperatura sobre o calor específico e as propriedades de transporte (difusividade mássica, térmica e de quantidade de movimento). Seus cálculos empregam octano como combustível e as taxas de reações químicas foram descritas por um esquema de cinética química global, seguindo a lei de Arrhenius. Consideraram a nuvem como sendo esférica, assumindo simetria angular, tornando

o problema unidimensional. As equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas foram resolvidas juntamente com as equações de taxas finitas de reações químicas. Duas situações foram estudadas, uma considerando que a ignição está ocorrendo no centro da nuvem, e outra que a ignição ocorre na periferia. Os resultados obtidos são comparados com soluções analíticas existentes, obtendo boa concordância principalmente para a segunda situação, onde a ignição foi imposta na periferia, e o gás foi considerado sem pré-mistura.

Zhou et al. [1999] apresentaram um estudo numérico do processo de combustão laminar bidimensional de um jato pré-misturado de metano e ar com um mecanismo de cinética química detalhado. O transporte e as propriedades termofísicas para cada espécie química, e também para a mistura de gases são incluídos. Número de Lewis (Le) diferente da unidade foi adotado para a solução do processo de combustão. O objetivo deste trabalho foi demonstrar a sensibilidade do modelo detalhado de cinética química sobre a temperatura da chama e a concentração das principais espécies químicas. A temperatura da chama e a concentração das principais espécies químicas tiveram boa concordância com os dados experimentais. Já a concentração dos radicais CO, OH e NO divergiram dos dados experimentais.

Nieckele et al. [2001] realizaram uma análise numérica envolvendo processos de combustão em uma câmara cilíndrica, novamente usando o FLUENT, para a qual dados experimentais foram avaliados. Neste trabalho é apresentado um estudo comparativo entre diferentes modelos de combustão, comparando os resultados obtidos com dados experimentais apresentados em Magel et al. [1996a]. Dentre os modelos de combustão utilizados pode-se citar os de taxas finitas generalizadas, tais como o E-A, e os modelos pré-PDF. Foi mostrado que o modelo de combustão que mais se aproxima dos dados experimentais foi o combinado de Arrhenius e Magnussen, E-A, obtendo excelente concordância com os resultados experimentais. Na sequência deste trabalho Nieckele et al. [2002] desenvolveram um estudo numérico sobre a mesma geometria do trabalho anterior, utilizando o modelo de taxas finitas generalizadas para cálculo das reações químicas (equações de Arrhenius e Magnussen), porém analisando duas situações para o processo de combustão. Na primeira situação foi utilizado uma única reação global para prever a queima do combustível (metano). Na segunda foi considerada a reação química do metano em duas etapas. Os resultados obtidos também foram comparados com dados experimentais de Magel et al. [1996a], obtendo boa

concordância, sendo que o caso com duas etapas apresentou os melhores resultados, muito próximos dos valores experimentais.

Denis e Vervisch [2001] apresentam um estudo do processo de combustão turbulenta através do método dos Volumes Finitos. Inicialmente relacionam um conjunto básico de equações de conservação, dentre as quais estão as equações de Navier-Stokes, de energia e de espécies químicas. Utilizando-se das médias de Reynolds (RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes* [Launder e Spalding, 1972]), a turbulência foi resolvida através do modelo $k-\epsilon$. Também apresentam algumas ferramentas para a solução de processos de combustão turbulentos. Dentre elas estão modelos baseados nos conceitos de chamas pré-misturadas, chamas sem pré-mistura ou difusivas e chamas parcialmente pré-misturadas, modelos estatísticos com funções pré definidas tais como a β -PDF, além do CMD – *Conditional Moment Closures*, dentre outros. Denis e Vervisch [2001] também apresentam uma metodologia gráfica obtida numericamente para a análise da combustão turbulenta.

Xue et al. [2001] apresentaram um estudo numérico de processos de combustão em cavidades comparando três diferentes modelos. Dentre os modelos estudados estão o VHS – *Volumetric Heat Source*, o EBU e o pré-PDF. O modelo $k-\epsilon$ simula a turbulência e o modelo DTRM as trocas de calor por radiação. São consideradas também as forças de empuxo devido à variação de massa específica com a temperatura. Os resultados obtidos com as predições são comparados com equivalentes dados experimentais disponíveis na literatura, obtendo boa concordância.

Miroslav et al. [2001] realizaram uma investigação numérica e experimental de um processo de combustão turbulenta de metano e ar em um jato livre. Ar e combustível, em proporções estequiométricas, são injetados por um orifício cilíndrico central, e ar puro por um duto anular externo a este orifício, de modo que coexistam mecanismos de pré-mistura e de difusão. O modelo de turbulência adotado para a análise do fluxo reativo foi baseado no *Second-Order Closure* para o *Reynolds Stress*. Este modelo leva em consideração o cálculo das equações das tensões turbulentas e da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Axissimetria também foi considerada. A equação de conservação de energia foi resolvida na formulação de entalpia para um escoamento de mistura, sendo a equação de conservação de espécies químicas resolvida apenas para o CH_4 , O_2 , CO_2 e H_2O , que assume apenas uma etapa global de reação química. As taxas de oxidação foram obtidas através da equação de

Arrhenius e do modelo *Eddy-Breakup*, sendo a taxa limite utilizada. Os resultados obtidos com a simulação numérica apresentaram boa concordância com os dados experimentais.

Zhou et al. [2002] apresentaram um estudo numérico simulando a formação de NO_x em processos turbulentos de combustão. Eles propõem uma terceira versão para o modelo de reações químicas USM – *Unifield Second-Order Moment* [Zhou et al., 2000], que leva em consideração na equação de Arrhenius as flutuações da temperatura e das espécies químicas. Este modelamento é composto das equações de Navier-Stokes, modelo de turbulência k - ϵ , equações de conservação de energia e de espécies químicas, além das equações de taxas finitas de reações químicas baseadas nas leis de Arrhenius. Este modelamento também assume que a reação química entre quaisquer duas substâncias ocorra em uma única etapa, ou em uma única reação global com apenas duas espécies químicas, por exemplo, oxigênio e combustível. Foi utilizado o método dos Volumes Finitos, e assumida a difusão de um jato de metano e ar em um processo de combustão a fim de prever a formação de NO_x. Seus resultados são comparados com resultados experimentais e com resultados de outros modelos de combustão, tais como o E-A (*Eddy-Breakup - Arrhenius*) e o modelo pré-PDF, obtendo boa concordância. Dando seqüência, Zhou et al. [2003] apresentam a simulação numérica do processo de combustão turbulenta sem pré-mistura (difusiva) de um jato de metano envolvido por ar. O modelo de reações químicas em escoamentos turbulentos USM – *Unifield Second-Order Moment* é utilizado para a determinação da formação de NO_x para diferentes números de *swirl* (componente angular da velocidade). Comparações com dados experimentais e também com dados obtidos com os modelo E-A e PDF simplificado são apresentadas. Nesta comparação o USM apresenta melhores resultados que os demais modelos.

Veynante e Vervich [2002] desenvolveram uma pesquisa sobre processos de combustão turbulenta. Uma revisão completa sobre modelagem de fluxos reativos em processos de combustão, variando de regime laminar à regime turbulento, para fluxos com e sem pré-mistura, e ainda parcialmente misturados, é apresentada. Ainda um estudo bastante detalhado sobre a modelagem do escoamento, principalmente turbulento, mostrando sob a forma de revisão as várias ferramentas disponíveis para a solução deste tipo de problema, tais como RANS, LES, e até um enfoque sobre DNS – *Direct Numerical Simulation* está condensado neste trabalho. Conceitos importantes sobre combustão, priorizando fluxos reativos turbulentos, também são apresentados.

Guo et al. [2003] apresentam um estudo sobre processos de combustão turbulenta de uma mistura de metano e ar. É proposta uma variação do modelo pré-PDF, denominada *Joint PDF*. As taxas médias de reações químicas são obtidas com a integração desta *Joint PDF*. Neste modelo as flutuações turbulentas das concentrações dos reagentes e da temperatura são descritas usando uma função pré-PDF baseada numa distribuição Gaussiana tridimensional de primeira ordem nas concentrações dos reagentes, e de segunda ordem na temperatura. Uma comparação entre os resultados deste modelo, juntamente com resultados obtidos com o modelo β -PDF, modelo de E-A e o laminar *Flamelet* [Peters, 1984], são comparados entre si, e com dados experimentais para chamas pré-misturadas. Os resultados obtidos com o *Joint PDF* e com o laminar *Flamelet* apresentam bons resultados, enquanto que os demais modelos apresentam uma significativa diferença.

Em Berg [2003] pode-se encontrar uma revisão completa sobre processos de combustão turbulentos. É apresentada uma modelagem que considera, além das equações de conservação da massa, da energia, das espécies químicas e da quantidade de movimento associado com o modelo de turbulência k - ϵ , os principais conceitos e modelos de reações químicas disponíveis na literatura.

Wang [2004] desenvolveu um estudo numérico de fluxos reativos turbulentos. Questões importantes que aparecem sobre modelagem detalhada de reações químicas, oxidação e formação de fuligem, além da modelagem da transferência de calor por radiação da fase gasosa em fluxos reativos turbulentos são revisados e discutidos neste trabalho. Dois modelos detalhados de combustão turbulenta são desenvolvidos usando o estado-da-arte em modelos de reação química detalhada, formação de fuligem, e cálculos de radiação térmica em chamas turbulentas. Um dos modelos é baseado na descrição empírica do fluxo turbulento e o outro em CFD. O modelo baseado na descrição empírica do fluxo turbulento é uma extensão do modelo TSL – *Two-Stage Lagrangian* para processos de combustão de jatos turbulentos. Esta extensão inclui a incorporação de um modelo detalhado de formação de fuligem e o aperfeiçoamento do modelo de radiação térmica. A formação de fuligem é determinada através do modelo de Appel-Bockhorn-Frenklach acoplado ao *Method of Moments*, adaptado ao TSL. O modelo original de radiação com emissividade constante é melhorado resolvendo a equação de transferência radiante na configuração de espaço do TSL, usando o método harmônico esférico P1 e o método de ordenadas discretas S2. O modelo de CFD é baseado

no código GMTEC, que é capaz de incorporar modelos detalhados de reações químicas além de formação de fuligem e radiação térmica. O detalhamento das reações químicas foi feito através das bibliotecas CHEMKIN. Para determinação da formação de fuligem foi usado o Método dos Momentos acoplado ao modelo de formação de fuligem de Frenklach. São implementados dois modelos detalhados de radiação térmica, o *P1-Gray Model* e o *P1-FSK Model*. Ambos os modelos empregam o método harmônico esférico P1 para a solução da equação de transferência de energia por radiação, em malhas não estruturadas tridimensionais. Em adição uma investigação numérica do processo de combustão turbulenta sem pré-mistura, usando propano e oxigênio enriquecido é desenvolvida, sendo que os dois modelos de combustão apresentados acima apresentaram bons resultados. A principal vantagem do modelo TSL é a economia no tempo computacional, porém algumas deficiências aparecem na predição da quantificação da estrutura da chama devido ao tratamento simplístico da hidrodinâmica. O modelo em CFD teve como principal característica a capacidade de obter melhor detalhamento quantitativo nas predições, e ainda capturar o forte acoplamento entre a formação de fuligem, radiação, estrutura da chama, e emissão de NOx na combustão de propano e oxigênio enriquecido. As deficiências do modelo CFD incluem a simplicidade do modelo de turbulência ($k - \epsilon$), e a aproximação P1 usada para resolver a RTE – *Radiative Transfer Equation*.

Evatt e Chen [2004] realizaram um estudo sobre a influência da mistura de hidrogênio em processos de combustão com fluxos pré-misturados de metano e ar, usando DNS acoplado com um mecanismo de reação química reduzido. Duas situações foram comparadas com relação às características da chama e emissão de poluentes, uma com metano puro e outra enriquecida com hidrogênio. A chama enriquecida com hidrogênio foi menos estável com relação à difusão térmica, e mais resistente à extinção, do que a chama de metano puro, resultando em uma maior área de chama. Foi observado um nível mais baixo de emissão de CO por consumo unitário de combustível para a chama enriquecida, consistente com dados experimentais. Também foi percebido um aumento na emissão de NOx para a chama enriquecida com hidrogênio, como resultado de temperaturas localmente mais altas e também devido à altas concentrações de radicais achadas nestas regiões.

Em um estudo numérico de processos de combustão, Fairweather e Woolley [2004] utilizaram o modelo CMC - *Conditional Moment Closure*, de primeira ordem, para simular

a reação de oxidação do metano para o caso de chamas turbulentas de fluxos sem pré-mistura. As soluções numéricas foram obtidas com o método dos Volumes Finitos. Foram usados dois modelos de turbulência, o $k - \epsilon$ padrão e o *Reynolds Stress*. As reações químicas foram resolvidas com o uso das bibliotecas da CHEMKIN com dois esquemas de solução da cinética química; o *GRI-Mech 2.11*, envolvendo 279 reações e 49 espécies, e o *GRI-Mech 3.0*, que resolve 325 reações e 53 espécies químicas. Para provar a eficiência e acessibilidade destes métodos foram feitas varias predições variando alguns parâmetros, tais como velocidades de injeção e concentração de combustível. Comparações destas predições foram feitas com dados experimentais disponíveis na literatura, obtendo bons resultados para todas as situações, a exceção da predição das frações de NOx, que não apresentaram boa concordância para alguns casos. Com relação à comparação entre os modelos de turbulência utilizados, ambos os modelos apresentaram-se bons, havendo pouca diferença entre eles.

Yang e Blasiak [2004] realizaram um investigação numérica sobre a influência da temperatura do combustível durante o processo de combustão, sem pré-mistura, de um jato de propano pré-aquecido e ar. Uma modelagem baseada nas equações médias de Navier-Stokes, juntamente com as equações médias de conservação de energia e de espécies químicas foi empregada na simulação do processo de combustão numa fornalha retangular. Dois modelos de combustão foram empregados e comparados, o EBU e β -PDF. O modelo de turbulência adotado foi o $k - \epsilon$ RNG. Modelos de NO *Thermal* e NO *Prompt* foram empregados para a determinação da emissão de NO. Os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais obtendo uma melhor concordância para o modelo EBU, principalmente com relação às magnitudes de temperaturas e formato da chama.

1.2 Objetivos

No intuito de desenvolver uma nova modelagem de cálculo para processos de combustão em câmaras, um melhor entendimento dos fenômenos presentes neste processo deve ser tentado. Em muitos casos não é possível desenvolver estudos experimentais para medir de forma adequada os parâmetros e magnitudes dos processos de combustão. Nestes casos para poder analisar o fenômeno de maneira consistente com a realidade se faz necessário, juntamente com técnicas numéricas adequadas, a aplicação de modelos matemáticos que possam representar de forma mais realística os fenômenos dominantes do processo de combustão.

Muitas vezes estes modelos, como os citados anteriormente, não são capazes de prever de forma suficientemente detalhada todos os fenômenos presentes. Alguns deles são capazes de resolver de forma muito consistente as taxas de reações químicas, mas não resolvem bem o escoamento dos gases. Outros resolvem bem o escoamento dos gases, mas não são capazes de prever de forma correta as taxas de reações químicas. Ou ainda, como já visto, existem modelos capazes de resolver de forma razoável tanto o escoamento como as taxas de reações químicas, mas deixam de lado a transferência de calor por radiação, que possui importância significativa no processo. Deste modo o desenvolvimento de modelagens matemáticas mais eficientes deve ser buscado já que a solução, em detalhes, dos principais fenômenos presentes no processo de combustão ainda não foi alcançada. Sendo assim os principais objetivos desta tese são:

1. Inicialmente, partindo de modelos consolidados na literatura, tais como os já apresentados anteriormente na Seção 1.1, montar uma modelagem suficientemente capaz de prever processos de combustão turbulenta de gás natural em uma câmara cilíndrica axissimétrica. Esta modelagem está fundamentada nas equações da conservação da massa, da quantidade de movimento, da energia e das espécies químicas. A equação da conservação de energia é resolvida juntamente com o modelo de transferência de calor por radiação térmica, que utiliza o Método das Zonas [Hottel e Sarofim, 1967; Siegel e Howell, 2002] para a determinação das áreas de fluxo direcionado, e o modelo WSGGM – *Weighted Sum of Gray Gases Model* [Smith et al., 1982] para determinação do espectro de absorção dos gases. A turbulência presente no escoamento é resolvida pelo modelo $k-\epsilon$ padrão. Para determinar as taxas de reações químicas dois modelos são utilizados: o modelo SCRS – *Simple Chemically-Reacting System* [Spalding, 1979], que assume reação química instantânea, e o E-A – *Eddy-Breakup Arrhenius*, que assume taxas finitas de reações químicas [Spalding, 1971; Magnussen e Hjertager, 1977; Kuo, 1986; Turns, 2000; Berg, 2003].
2. Resolver o problema para um caso semelhante ao estudado no *First Work-Shop on Aerodynamics and Steady State Combustion Chambers and Furnaces* [Garréton e Simonin, 1994], a fim de comparar os resultados obtidos com os dois modelos de combustão implementados, verificando os perfis de temperaturas e a distribuição de espécies

químicas no interior da câmara para verificar a consistência da modelagem.

3. Por fim resolver um caso específico, semelhante ao de uma câmara de combustão cilíndrica de uma caldeira, com paredes d'água, com o intuito de analisar a influência das trocas de calor por radiação no comportamento do processo de combustão de gás natural. São verificados os perfis de temperatura, as distribuições de espécies químicas, a eficiência do processo de queima, além das trocas térmicas relacionadas à transferência de calor para o exterior da câmara pelas paredes e nos gases de saída.

A modelagem aqui desenvolvida possui a capacidade de prever com um maior rigor de detalhes a mecânica do escoamento dos fluidos no interior da câmara de combustão (incluindo turbulência), o transporte de calor por convecção, assim como o transporte de calor por radiação térmica. Entretanto modelos menos sofisticados, porém solúveis de forma acoplada aos demais, são utilizados na solução das reações químicas presentes na combustão. Com uma modelagem deste tipo é possível dar um passo mais na busca de uma solução mais realística de processos de combustão deste tipo.

1.3 Escopo da Tese

A seguir são descritos os conteúdos de cada capítulo da presente tese.

O Capítulo 2 apresenta a formulação completa da modelagem matemática de processos de combustão turbulenta de combustíveis gasosos, incluindo as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia, de espécies químicas, de energia cinética turbulenta e de dissipação da energia cinética turbulenta, juntamente com as considerações e simplificações feitas. A geometria em análise é a de coordenadas cilíndricas axissimétricas. Dois modelos de combustão são apresentados neste capítulo, o SCRS e o E-A.

Um estudo detalhado do processo de transferência de calor por radiação, desenvolvido a partir do Método das Zonas, e acoplado ao modelo WSGGM está apresentado no Capítulo 3.

No Capítulo 4 é apresentado um breve detalhamento do método dos Volumes Finitos. Neste capítulo são também descritos detalhes da implementação das equações, assim como dos termos fontes destas equações. Alguns detalhes da implementação da rotina de radiação térmica também são apresentados.

O Capítulo 5 apresenta a modelagem física do problema de combustão de gás natural numa câmara de combustão cilíndrica semelhante ao estudado no *First Work-Shop on Aerodynamics and Steady State Combustion Chambers and Furnaces* [Garréton e Simonin, 1994]. São apresentadas as condições de contorno inerentes ao problema, assim como as propriedades termofísicas e grandezas utilizadas. São também descritos alguns parâmetros utilizados no método numérico empregado na solução das equações de transporte. Também é apresentado um estudo comparativo da presente modelagem com dados experimentais e numéricos disponíveis na literatura, no intuito de validar a modelagem e verificar qual dos modelos de reações químicas melhor representa o processo de combustão em estudo.

No Capítulo 6 é apresentada uma análise do efeito das trocas de calor por radiação térmica sobre o processo de combustão de gás natural, numa câmara de combustão cilíndrica de uma caldeira. A descrição física e os resultados para o modelo de combustão E-A, com duas etapas globais de reação química, juntamente com as condições de contorno e alguns detalhes da implementação são também apresentados neste capítulo.

Finalmente no Capítulo 7 são apresentadas as conclusões sobre a modelagem apresentada e as propostas para continuação deste trabalho.

CAPÍTULO 2

MODELAGEM MATEMÁTICA DA COMBUSTÃO TURBULENTA DE COMBUSTÍVEIS GASOSOS EM CÂMARAS CILÍNDRICAS

Modelos matemáticos têm sido usados extensivamente nas últimas duas décadas para simular numericamente processos físicos. Em decorrência da maior disponibilidade de computadores rápidos, problemas para os quais não havia solução, mesmo em geometrias e casos simples, estão agora sendo resolvidos para modelos e geometrias muito mais próximas da realidade.

As simulações numéricas fornecem não apenas distribuições detalhadas das diferentes variáveis, que em alguns casos são muito difíceis, ou virtualmente impossíveis de serem obtidas experimentalmente, mas também permitem a variação independente de características específicas de transporte do sistema estudado. Estas variáveis são limitadas experimentalmente pela seleção de materiais, tamanho e detalhamento do aparato experimental, variação de temperatura e outras características que são difíceis de serem reproduzidas em laboratório. Novos processos de manufatura podem ser simulados numericamente com o objetivo de fornecer dados sobre sua eficácia antes de consumir recursos significativos na construção de protótipos.

Vários modelos numéricos têm sido propostos para estudar processos de combustão em câmaras. A modelagem de processos de combustão é uma área de pesquisa em expansão e a literatura tem mostrado um crescimento significativo. Os modelos de combustão mais comumente usados podem ser encontrados de forma resumida em Eaton et al. [1999]. Eaton et al. [1999] apresentaram a revisão do modelamento matemático para a conservação da massa, quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas, acoplado à modelos de turbulência, modelos de transferência de calor por radiação, e modelos de reações químicas

ocorrendo durante processos de combustão em câmaras.

Neste capítulo as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, em três direções, considerando o modelo de turbulência k - ϵ , e a conservação de energia e de espécies químicas são obtidas a partir dos princípios fundamentais de conservação aplicados a um volume de controle infinitesimal. Os modelos de combustão a serem usados são o modelo simplificado de reações químicas apresentado em Spalding [1979], o chamado SCRS (*Simple Chemically-Reacting System*), e o modelo de taxas finitas de reações químicas, E-A (*Eddy Breakup-Arrhenius*) [Magnussen e Hjertager, 1977; Kuo, 1986; Fluent, 1997; Eaton et al., 1999; Turns, 2000; Niecekele et al., 2001; Niecekele et al., 2002; Berg, 2003] de Arrhenius-Magnussen. Para ambos os modelos a parcela referente à troca de calor por radiação será computada através da implementação do Método das Zonas [Hottel e Sarofim, 1967; Siegel e Howell, 2002]. O cálculo do coeficiente de absorção do meio participante será determinado pelo modelo da Soma Ponderada de Gases Cinzas – WSGGM (*Weighted Sum of Gray Gases Model*) [Smith et al., 1982]. Devido a importância da modelagem de radiação sua derivação será apresentada separadamente no Capítulo 3.

2.1 Equação de Conservação

Assume-se um pequeno volume de controle infinitesimal, conforme mostrado na Figura 2.1.

A conservação de uma variável ϕ genérica no volume de controle considerado pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho \phi d\mathcal{V} + \int_A (\rho \phi \vec{V}) \cdot \vec{n} dA = - \int_A \vec{J} \cdot \vec{n} dA + \int_{\mathcal{V}} S^\phi d\mathcal{V} \quad (2.1)$$

onde $\vec{J}$ é o fluxo difusivo da variável ϕ , ρ é a massa específica, $\mathcal{V}$ é o volume, A é a área, t é o tempo, $\vec{V}$ é o vetor velocidade, $\vec{n}$ é a componente normal externa à superfície de controle e S^ϕ é o termo fonte da variável ϕ .

Aplicando o teorema da divergência de Gauss para as integrais de área, e a regra de Leibnitz para o primeiro termo do lado esquerdo da igualdade,

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial t} \rho \phi d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \vec{\nabla} \cdot (\rho \phi \vec{V}) d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}} \vec{\nabla} \cdot \vec{J} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} S^\phi d\mathcal{V} \quad (2.2)$$

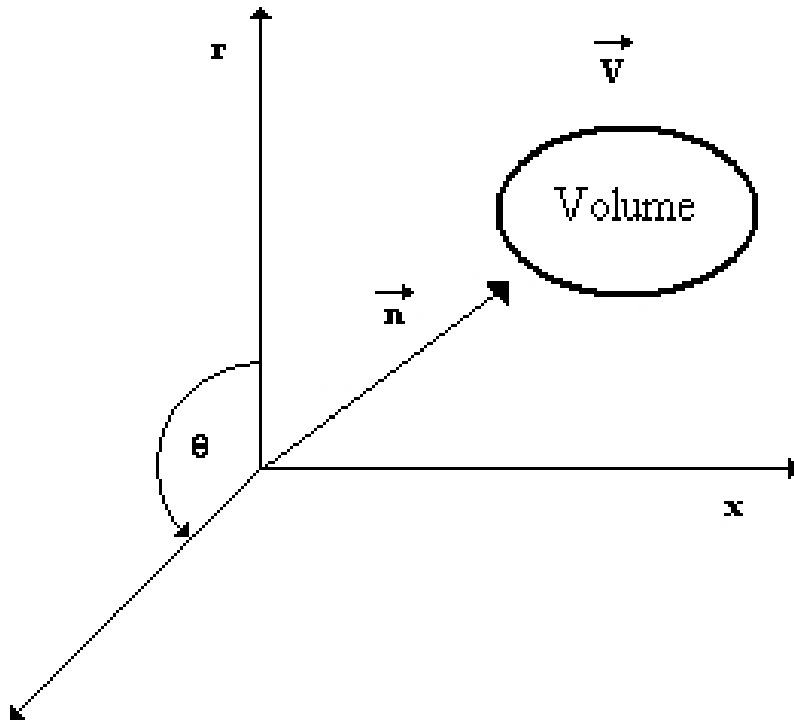


Figura 2.1 – Volume de controle infinitesimal.

Integrando sobre um volume de controle infinitesimal, o resultado é a equação de conservação da variável genérica ϕ .

Deste modo, operando algebricamente os termos das integrais volumétricas da Equação (2.2), tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \vec{\nabla} \cdot (\rho \phi \vec{V}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + S^\phi \quad (2.3)$$

A escolha da variável ϕ , do fluxo $\vec{J}$ e do termo S^ϕ , determinará que princípio de conservação ela estará representando. A seguir, estes termos serão escolhidos a fim de determinar as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia, e de espécies químicas.

2.2 Equações do Movimento

2.2.1 Conservação de Massa

A fim de obter a equação de conservação de massa, substituem-se na Equação (2.3) os seguintes termos

$$\begin{aligned}\phi &= 1 \\ \vec{J} &= 0 \\ S^\phi &= 0\end{aligned}\tag{2.4}$$

obtendo,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) = 0\tag{2.5}$$

onde o vetor $\vec{V}$ é representado da seguinte forma:

$$\vec{V} = \vec{i} \cdot u + \vec{j} \cdot v + \vec{k} \cdot w\tag{2.6}$$

Os termos u , v , e w são as velocidades escalares na direção axial x , radial r , e sentido angular θ , respectivamente, sendo $\vec{i}$, $\vec{j}$, e $\vec{k}$ os vetores unitários para estas respectivas coordenadas (sistema de coordenadas cilíndricas).

O sistema de coordenadas a ser empregado pode ser aplicado a qualquer momento, bastando para isso, manipular o operador vetorial presente na Equação (2.5) da maneira desejada. Como no presente trabalho uma das principais geometrias de interesse é mapeada por coordenadas cilíndricas, o operador pode ser escrito da seguinte forma [Fox e McDonald, 1998]

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial r} + \vec{k} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}\tag{2.7}$$

Logo, substituindo as Equações (2.6) e (2.7) na Equação (2.5)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v) + \frac{\rho v}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho w) = 0\tag{2.8}$$

onde o termo da derivada em r pode ser rescrito fazendo o uso da seguinte relação:

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho v) + \frac{\rho v}{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) \quad (2.9)$$

Substituindo a Equação (2.9) na Equação (2.8), e assumindo que exista simetria em θ , obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) = 0 \quad (2.10)$$

ou ainda para o caso de escoamento permanente, pode-se rescrever a Equação (2.10) da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r v) = 0 \quad (2.11)$$

2.2.2 Conservação de Quantidade de Movimento Linear

Ao se aplicar o princípio de conservação de quantidade de movimento linear, obtêm-se equações de conservação em cada uma das três direções do sistema de coordenadas. Para a velocidade u , na direção axial x , fazendo o uso da Equação (2.3), considerando que o fluido seja newtoniano e o escoamento incompressível, e assumindo

$$\begin{aligned} \phi &= u \\ \vec{J} &= -\mu \vec{\nabla} u \\ S^\phi &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x + \dot{U}^u \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde, μ , p , $\dot{U}^u$ e B_x são respectivamente a viscosidade absoluta, a pressão, o termo fonte e as forças de campo na direção axial, resulta em

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u + \vec{\nabla} \cdot (\rho u \vec{V}) = \rho B_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} u) + \dot{U}^u \quad (2.13)$$

Usando o mesmo desenvolvimento empregado na equação de conservação de massa, a equação de quantidade de movimento na direção x , assumindo que o escoamento seja

permanente, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho u) + \frac{w}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho u) = \rho B_x - \frac{\partial p}{\partial x} &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \\ &+ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \dot{U}^u \end{aligned} \quad (2.14)$$

Considerando a existência de simetria em θ

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho u) = \rho B_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \dot{U}^u \quad (2.15)$$

ou ainda,

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho u) = \rho B_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \dot{S}^u \quad (2.16)$$

onde assume-se

$$\dot{S}^u = \dot{U}^u = 0 \quad (2.17)$$

Para a velocidade v , na direção radial r , também partindo da Equação (2.3), levando em conta as mesmas considerações anteriores, e assumindo

$$\begin{aligned} \phi &= v \\ \vec{J} &= -\mu \vec{\nabla} v \\ S^\phi &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho B_r + \dot{V}^v \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde B_r e $\dot{V}^v$ representam as forças de campo e o termo fonte na direção radial, resulta em

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v + \vec{\nabla} \cdot (\rho v \vec{V}) = \rho B_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} v) + \dot{V}^v \quad (2.19)$$

Novamente executando desenvolvimento empregado na dedução da Equação (2.13) na Equação (2.19), para escoamento em regime permanente, obtém-se

$$\begin{aligned} u \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho v) + \frac{w}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho v) - \frac{\rho w^2}{r} &= \rho B_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right) \\ &+ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial \theta} \right) - \frac{2\mu}{r^2} \frac{\partial w}{\partial \theta} + \dot{V}^v \end{aligned} \quad (2.20)$$

Assumindo que exista simetria em θ :

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho v) - \frac{\rho w^2}{r} = \rho B_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right) + \dot{V}v \quad (2.21)$$

Deve-se dar atenção especial ao termo do lado direito da Equação (2.21) onde se tem a derivada da velocidade v em relação a r . Assim

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right) = \frac{\partial}{\partial r} \mu \left[\frac{1}{r} r \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r} v \frac{\partial r}{\partial r} \right] = \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\mu v}{r^2} \quad (2.22)$$

ou ainda,

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\mu v}{r^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\mu v}{r^2} \quad (2.23)$$

Deste modo, substituindo o termo desenvolvido acima (Equação (2.23)) na Equação (2.21), obtém-se

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho v) = \rho B_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\mu v}{r^2} + \frac{\rho w^2}{r} + \dot{V}v \quad (2.24)$$

ou ainda,

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho v) = \rho B_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \dot{S}^v \quad (2.25)$$

onde o termo

$$\dot{S}^v = -\frac{\mu v}{r^2} + \frac{\rho w^2}{r} + \dot{V}v \quad (2.26)$$

Para a velocidade w , na coordenada angular θ , partido da Equação (2.3), levando-se em conta as mesmas considerações anteriores, e assumindo que

$$\begin{aligned} \phi &= w \\ \vec{J} &= -\mu \vec{\nabla} w \\ S^\phi &= -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \rho B_\theta + \dot{W}^w \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde B_θ e $\dot{W}^w$ representam as forças de campo e o termo fonte no sentido angular θ , resulta

em,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho w + \vec{\nabla} \cdot (\rho w \vec{V}) = \rho B_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{\nabla} w) + \dot{W}^w \quad (2.28)$$

Usando mesmo desenvolvimento empregado na dedução das Equações (2.13) e (2.19) tem-se, assumindo escoamento em regime permanente,

$$\begin{aligned} u \frac{\partial}{\partial x} (\rho w) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho w) + \frac{w}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho w) + \frac{\rho v w}{r} &= \rho B_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r w) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \\ &+ \frac{2\mu}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \dot{W}^w \end{aligned} \quad (2.29)$$

Assumindo que exista simetria em θ :

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho w) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho w) + \frac{\rho v w}{r} = \rho B_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r w) \right) + \dot{W}^w \quad (2.30)$$

Da mesma forma que na equação de quantidade de movimento na direção r , deve-se dar atenção especial ao termo do lado direito da Equação (2.30), onde se tem a derivada da velocidade w em relação a r . Desta forma

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r w) \right) = \frac{\partial}{\partial r} \mu \left[\frac{1}{r} r \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{1}{r} w \frac{\partial r}{\partial r} \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial r} \right) - \frac{\mu w}{r^2} \quad (2.31)$$

Substituindo o termo desenvolvido acima (Equação (2.31)) na Equação (2.30):

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho w) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho w) = \rho B_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial w}{\partial r} \right) - \frac{\mu w}{r^2} - \frac{\rho v w}{r} + \dot{W}^w \quad (2.32)$$

onde os termos

$$-\frac{\mu w}{r^2} - \frac{\rho v w}{r} \quad (2.33)$$

representam as forças de Coriolis, na unidade de volume de fluido.

A fim de tornar a equação de quantidade de movimento linear tangencial (Equação (2.32)), numa equação de quantidade de movimento angular, deve-se transformar de w para rw . Com isso o termo fonte da equação será reduzido, aumentado a taxa de convergência

da solução, sem no entanto modificar a solução. Assumindo que $\phi = rw$ obtém-se

$$w = \frac{\phi}{r} \quad (2.34)$$

Substituindo a Equação (2.34) na Equação (2.32):

$$\begin{aligned} u \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\phi}{r} \right) + v \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho \frac{\phi}{r} \right) &= \rho B_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\phi}{r} \right) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\phi}{r} \right) \right) \\ &- \frac{\mu}{r^2} \left(\frac{\phi}{r} \right) - \frac{\rho v}{r} \left(\frac{\phi}{r} \right) + \dot{W}^w \end{aligned} \quad (2.35)$$

desenvolvendo, e empregando novamente a Equação (2.34), obtém-se

$$\begin{aligned} u \frac{\partial}{\partial x} (\rho rw) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho rw) &= r \rho B_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x} (rw) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial}{\partial r} (rw) \right) \\ &- \frac{2\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rw) + \dot{W}^w \end{aligned} \quad (2.36)$$

ou ainda, de forma semelhante às equações anteriores,

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho rw) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho rw) = r \rho B_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x} (rw) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial}{\partial r} (rw) \right) + \dot{S}^\theta \quad (2.37)$$

onde

$$\dot{S}^\theta = -\frac{2\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rw) + \dot{W}^w \quad (2.38)$$

A dedução completa destas equações (Equações de Navier-Stokes) pode ser encontrada em várias referencias [Schlichting, 1979; Fox e McDonald, 1998].

2.3 Modelo de Reações Químicas Com Taxas Finitas Generalizadas de Arrhenius-Magnussen

O modelo de combustão com taxas finitas de reações químicas de Arrhenius e Magnussen [Magnussen e Hjertager, 1977; Kuo, 1986; Fluent, 1997], composto das equações de conservação de espécies químicas e de energia, é apresentado na presente seção.

2.3.1 Conservação de Espécies Químicas - Modelo Arrhenius-Magnussen

A fim de modelar o processo de combustão, faz-se necessário acompanhar os componentes da mistura ao longo da câmara de combustão determinando onde está ocorrendo a oxidação do combustível.

Para obter a equação de conservação de espécies químicas, faz-se o uso da Equação (2.3). Definindo os seguintes termos:

$$\begin{aligned}\phi &= f_\alpha \\ \vec{J} &= -\Gamma_\alpha \vec{\nabla} f_\alpha \\ S^\phi &= R_\alpha\end{aligned}\tag{2.39}$$

obtém-se a equação para a conservação de espécies químicas

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho f_\alpha + \vec{\nabla} \cdot (\rho f_\alpha \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma_\alpha \vec{\nabla} f_\alpha) + R_\alpha\tag{2.40}$$

A concentração, ou fração mássica do componente α da mistura, f_α , pode ser definida como

$$f_\alpha = \frac{m_\alpha}{m} = \frac{m_\alpha \mathcal{V}^{-1}}{m \mathcal{V}^{-1}} = \frac{\rho_\alpha}{\rho}\tag{2.41}$$

onde m_α a massa do componente α na mistura, m a massa total da mistura, ρ_α a massa específica do componente α na mistura, e ρ a massa específica total da mistura.

Para coordenadas cilíndricas axissimétricas e regime permanente, assumindo

$$\Gamma_\alpha = \rho D\tag{2.42}$$

e

$$\dot{S}^\alpha = R_\alpha\tag{2.43}$$

obtém-se:

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho f_\alpha) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho f_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial f_\alpha}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho D r \frac{\partial f_\alpha}{\partial r} \right) + \dot{S}^\alpha\tag{2.44}$$

onde D é a difusividade mássica da mistura. O termo R_α é a taxa volumétrica de formação

ou destruição de uma determinada espécie química α . Este termo é computado como o somatório de todas as taxas volumétricas de formação ou destruição em todas as reações k onde a espécie α está presente, $R_{\alpha,k}$. Deste modo

$$R_{\alpha} = \sum_k R_{\alpha,k} \quad (2.45)$$

Esta taxa de formação ou destruição, $R_{\alpha,k}$, pode ser obtida por uma expressão de cinética química de Arrhenius, ou por expressões que consideram que as taxas de reações químicas sejam controladas pela mistura turbulenta, tais como as equações de Magnussen [Magnussen e Hjertager, 1977], ou ainda, de forma conjunta, pelas duas expressões [Nieckele et al., 2001; Eaton et al., 1999; Fluent, 1997]. Modelos deste tipo são capazes de resolver uma grande faixa de aplicações, incluindo sistemas de reações químicas em regime laminar ou turbulento, e ainda sistemas de combustão com e sem pré-mistura.

No modelo de Arrhenius a taxa de formação ou destruição de cada espécie α , para cada reação k onde ela se apresenta, pode ser obtida a partir de conceitos de taxas finitas de reações químicas elementares, como reações bi-moleculares e teorias de colisão.

A maior parte das reações químicas de interesse em processos de combustão são bi-moleculares [Turns, 2000]; isto é, duas moléculas A e B colidem e reagem para formar duas diferentes moléculas C e D . Assumindo uma reação química irreversível do tipo



a taxa na qual a reação procede é diretamente proporcional à concentração das duas espécies reagentes. Para a espécie A da reação apresentada acima (Equação (2.46)), pode-se escrever a seguinte equação para a taxa de destruição de A :

$$\frac{1}{V} \frac{d}{dt} ([A] V) = -k_{bimolec} [A] [B] \quad (2.47)$$

onde $k_{bimolec}$ representa o coeficiente de taxa de reação química bi-molecular, e possui uma grande dependência com a variação de temperatura.

A teoria de colisões moleculares pode ser usada para a determinação da forma da Equação (2.47), e ainda sugerir a dependência da temperatura sobre o coeficiente de taxa de reação química bi-molecular. Para determinar a frequência de colisões de um par de

moléculas, pode-se considerar um caso bastante simples, o qual assume uma única molécula de diâmetro σ_d , viajando com velocidade constante v , e colidindo com moléculas idênticas, porém estáticas. A Figura 2.2 ilustra este caso. Se a distância percorrida entre as colisões, isto é, o livre caminho médio, é grande, então a ordem de grandeza de um volume cilíndrico, conforme mostrado na Figura 2.2, no qual colisões são possíveis, é igual à $v\pi\sigma_d^2\Delta t$, em um determinado intervalo de tempo Δt , onde $\pi\sigma_d^2$ representa a área de seção transversal deste cilindro. Se as moléculas que estão estáticas são distribuídas randomicamente e possuem um número de densidade $n/\mathcal{V}$, que é o número de moléculas de uma determinada espécie química por unidade de volume, o número de colisões experimentado por esta molécula pode ser expresso como

$$Z_c = \left(\frac{n}{\mathcal{V}}\right) v\pi\sigma_d^2 \quad (2.48)$$

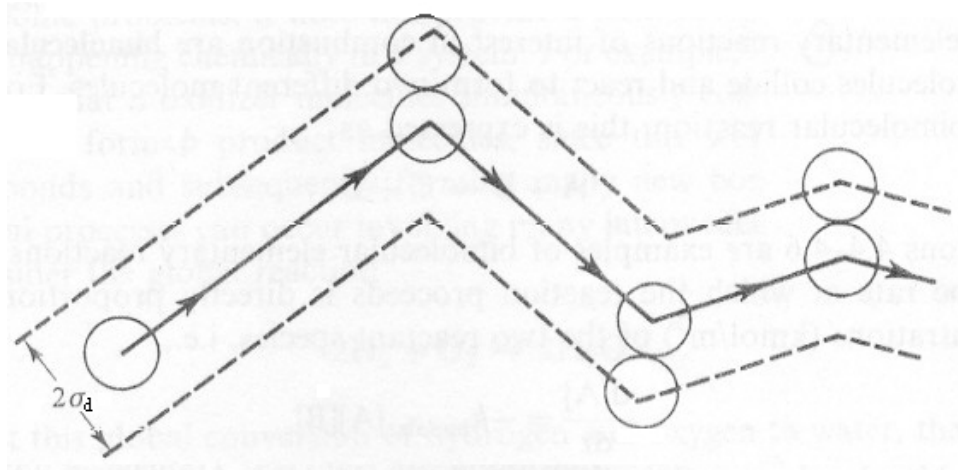


Figura 2.2 – Ordem de grandeza do volume cilíndrico onde é possível que ocorram colisões para uma determinada molécula em movimento [Turns, 2000].

Entretanto, em um gás real todas as moléculas estão em movimento. Assumindo a velocidade média em função da temperatura, $\overline{v^T}$, como sugerido por Turns [2000], para as moléculas,

$$\overline{v^T} = \left(\frac{8\sigma_B T}{\pi m_\alpha}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.49)$$

onde σ_B é a constante de Boltzman ($1,381 \times 10^{-23} J/K$); a freqüência de colisão para moléculas idênticas, para uma distribuição Maxwellina de velocidade [Turns, 2000], é determinada da seguinte forma:

$$Zc^r = \sqrt{2 \left(\frac{n}{V} \right) \overline{v^T} \pi \sigma_d^2} \quad (2.50)$$

A Equação (2.50) apenas é válida para moléculas idênticas. Como em processos de combustão estão presentes moléculas de espécies químicas diferentes (ex. combustível e oxidante, dentre outras), se faz necessário analisar, de forma semelhante, uma situação onde se tenham moléculas de diâmetros diferentes. Supondo que as moléculas de combustível e oxidante tenham diâmetros $\sigma_{d,A}$ e $\sigma_{d,B}$, respectivamente o diâmetro total da molécula que ocupa o volume onde ocorrem as colisões é dado pela soma dos diâmetros das duas moléculas, isto é, $\sigma_{d,A} + \sigma_{d,B} \equiv 2\sigma_{d,AB}$. Deste modo a Equação (2.50) se torna:

$$Zc^r = \sqrt{2 \left(\frac{n_B}{V} \right) \overline{v_A^T} \pi \sigma_{d,AB}^2} \quad (2.51)$$

e expressa a freqüência de colisão de uma única molécula da espécie A com todas as moléculas de gás B . $\overline{v_A^T}$ representa a velocidade média em função da temperatura para a molécula A , e n_B o número de moléculas da espécie B .

É de interesse determinar a freqüência de colisões associada a todas as moléculas A e B . Deste modo o número total de colisões por unidade de volume, e por unidade de tempo, é obtido pela multiplicação da freqüência de colisões de uma única molécula da espécie A (Equação (2.51)) pelo número total de moléculas da espécie A em um determinado volume, usando a velocidade média molecular apropriada. Sendo assim

$$\frac{Zc_{AB}^r}{V} = \left(\frac{n_A}{V} \right) \left(\frac{n_B}{V} \right) \pi \sigma_{d,AB}^2 \left(\overline{v_A^T}^2 + \overline{v_B^T}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.52)$$

Definindo a massa reduzida, m_μ ,

$$m_\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (2.53)$$

onde m_A e m_B são as massas das espécies A e B , respectivamente, tem-se, substituindo as Equações (2.49) e (2.53) na Equação (2.52), o número total de colisões por unidade de

volume, e por unidade de tempo, agora como função da temperatura,

$$\frac{Zc_{AB}^r}{\mathcal{V}} = \left(\frac{n_A}{\mathcal{V}}\right) \left(\frac{n_B}{\mathcal{V}}\right) \pi \sigma_{d,AB}^2 \left(\frac{8\sigma_B T}{\pi m_\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.54)$$

onde $\overline{v_B^T}$ representa a velocidade média em função da temperatura para a molécula B , n_A o número de moléculas da espécie A .

Para melhor ilustrar a taxa de reação química pode-se rescrever a Equação (2.47) da seguinte forma:

$$\frac{1}{V} \frac{d}{dt} ([A] V) = \left(\frac{Zc_{AB}^r}{\mathcal{V}}\right) \mathcal{P} \mathcal{N}_{AV}^{-1} \quad (2.55)$$

onde $\mathcal{N}_{AV}$ é o número de Avogadro e $\mathcal{P}$ representa a probabilidade de colisão entre as moléculas. A probabilidade que uma colisão ocasiona uma reação pode ser expressa como o produto de dois fatores: um fator energia, $e^{[-E_k/\overline{RT}]}$, o qual representa a fração de colisão que ocorre devido à presença de uma sobre energia acrescida ao nível necessário para a reação, E_k , ou energia de ativação; e um fator geométrico ou *stearic factor*, sf , que leva em conta a geometria de colisões entre as espécies A e B . Empregando as seguintes relações:

$$\frac{n_A}{\mathcal{V}} = [A] \mathcal{N}_{AV} \quad (2.56)$$

e

$$\frac{n_B}{\mathcal{V}} = [B] \mathcal{N}_{AV} \quad (2.57)$$

a Equação (2.55) se torna

$$-\frac{d[A]}{dt} = sf \mathcal{N}_{AV} \sigma_{d,AB}^2 \left(\frac{8\pi\sigma_B T}{m_\mu}\right)^{\frac{1}{2}} e^{[-E_k/\overline{RT}]} [A] [B] \quad (2.58)$$

Comparando a Equação (2.58) com a Equação (2.47), pode ser visto que o coeficiente de taxa de reação bi-molecular, baseado na teoria de colisões, é

$$k_{bimolec}(T) = sf \mathcal{N}_{AV} \sigma_{d,AB}^2 \left(\frac{8\pi\sigma_B T}{m_\mu}\right)^{\frac{1}{2}} e^{[-E_k/\overline{RT}]} \quad (2.59)$$

Infelizmente, através de teorias de colisão, não se faz possível determinar a energia de ativação e o fator geométrico (*stearic factor*) [Turns, 2000]. Porém se a variação da

temperatura de interesse não é muito grande, o coeficiente de taxa de reação química bimolecular pode ser expresso pela equação empírica de Arrhenius,

$$k_{bimolec}(T) = A_k e^{[-E_k/\overline{RT}]} \quad (2.60)$$

onde A_k é um fator pré-exponencial ou fator de frequência em cada reação k . Comparando as Equações (2.59) e (2.60), nota-se que A_k não é constante, dependendo, baseado nas teorias de colisão, de $T^{1/2}$. Segundo Turns [2000] e Eaton et al. [1999] é comum escrever o coeficiente $k_{bimolec}$ através da Equação Modificada de Arrhenius, a qual leva em conta a dependência deste fator pré-exponencial com a temperatura,

$$k_{bimolec}(T) = A_k T^{\beta_k} e^{[-E_k/\overline{RT}]} \quad (2.61)$$

onde β_k é o expoente de temperatura em cada reação k , obtido empiricamente, juntamente com a Energia de Ativação E_k , e o coeficiente A_k .

Rescrevendo a Equação (2.58) para obter a taxa líquida de produção, ou destruição de uma determinada espécie química α , em todas as reações k em que esta se apresenta, multiplicando pela massa molecular desta espécie, $\overline{MM}_\alpha$, e levando em consideração os coeficiente estequiométricos para as α -ésimas espécies químicas presentes nos produtos e nos reagentes, $\eta''_{\alpha,k}$ e $\eta'_{\alpha,k}$, respectivamente, obtém-se

$$R_{\alpha,k} = (\eta''_{\alpha,k} - \eta'_{\alpha,k}) \overline{MM}_\alpha T^{\beta_k} A_k \Pi_{\alpha_{reagentes}} C_\alpha^{\gamma_{\alpha,k}} e^{(-E_k/\overline{RT})} \quad (2.62)$$

onde Π_α é o produtório, C_α é a concentração molar para cada espécie reagente α , e $\gamma_{\alpha,k}$ é o expoente de concentração para cada espécie reagente α em cada reação k .

Assumindo que as reações de combustão para as principais espécies de interesse sejam irreversíveis pode-se rescrever a Equação (2.62) da seguinte forma:

$$R_{\alpha,k} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha T^{\beta_k} A_k \Pi_{\alpha_{reagentes}} C_\alpha^{\gamma_{\alpha,k}} e^{(-E_k/\overline{RT})} \quad (2.63)$$

onde $\eta_{\alpha,k}$ é o coeficiente estequiométrico da espécie α na reação k (valores positivos para reagentes e valores negativos para produtos).

A média temporal da equação de Arrhenius (Equação (2.63) ou Equação (2.62)) pode ser realizada pela substituição do somatório de valores médios e flutuações para cada

uma das variáveis de modo similar ao aplicado na obtenção das equações médias de Reynolds. Deste modo decompondo estas variáveis instantâneas em suas componentes principais e suas componentes de flutuações pode-se obter variações para a média temporal dessas equações, juntamente com vários termos adicionais envolvendo valores de flutuações de T e das concentrações de espécies, C_α . Porém a magnitude dos valores das flutuações e as correlações associadas não são conhecidas [Eaton et al., 1999]. Deste modo a modelagem dos termos de reação química turbulenta em uma formulação numérica de processos de combustão requer o uso de algumas simplificações.

No emprego destas simplificações, para alcançar uma possível solução das equações de reações químicas, acopladas com escoamentos turbulentos, três modelos aproximados tem sido usados, os quais podem ser classificados de acordo com duas escalas de tempo característico associadas com reações químicas em escoamentos turbulentos: a escala de tempo da reação química, e a escala de tempo de mistura devido à turbulência. A escala de tempo da reação química é basicamente o tempo requerido para as espécies de interesse reagirem completamente para uma condição de equilíbrio. A escala de tempo para a mistura devido à turbulência é basicamente o tempo requerido para que as grandes escalas de turbulência se dissipem e se reduzam a escalas menores onde interações moleculares passam a ser dominantes.

Na primeira aproximação, que é o caso limite dos processos de combustão, as espécies reagentes são assumidas pré-misturadas, ou a escala de tempo da turbulência é assumida muito rápida comparada com a escala de tempo da reação química. Neste caso a taxa de mistura devido à turbulência pode ser ignorada, e as taxas finitas de reações químicas podem ser baseadas nas propriedades médias. Este caso limite não é aplicável para chamas difusivas turbulentas não pré-misturadas de hidrocarbonetos [Eaton et al., 1999], e como este é justamente o caso a ser estudado neste trabalho não poderá ser considerada.

Nas outras duas aproximações do modelamento, a escala de tempo de mistura devido à turbulência é, ou da mesma ordem de grandeza, ou muito maior do que a escala de tempo da reação química para as principais espécies de interesse. Quando as escalas de tempo de mistura devido à turbulência e as escalas de tempo das reações químicas são da mesma ordem de grandeza, ambas podem ser consideradas como boas aproximações no modelamento. Quando a escala de tempo de mistura devido à turbulência é assumida como sendo muito

maior do que a escala de tempo das reações químicas, a escala de tempo das reações químicas pode ser ignorada e o foco principal do modelamento pode ser baseado apenas sobre a escala de tempo de mistura devido à turbulência. Deste modo um modelamento com esse tipo de característica deve ser utilizado.

Tentativas para simultaneamente considerar misturas turbulentas e taxas finitas de reações químicas (escalas de tempo de mistura devido à turbulência, e escalas de tempo de reações químicas com mesma ordem de grandeza), em formulações numéricas são construídas principalmente sobre variações dos métodos primeiramente apresentados por Magnussen e Hjertager [1977], o qual emprega o chamado *Eddy-Breakup* sugerido por Spalding [1971].

No *Eddy-Breakup*, também chamado modelo de Magnussen, as taxas de reações químicas entre as espécies estão basicamente fundamentadas em teorias de dissipação de vórtices onde a turbulência está presente. A principal característica do modelo de Magnussen está no fato de que, para processos de combustão difusivos, as espécies químicas reagentes, combustível e oxidante (oxigênio), se apresentam em vórtices separados. Como as reações químicas, na maior parte dos casos, à escassez de situações em que se tenha condições de ignição e de extinção, são muito rápidas, assume-se que a taxa de combustão é determinada pela taxa de mistura sobre uma escala molecular de vórtices de combustível e de oxigênio. Em outras palavras, pela taxa de dissipação de vórtices. Como combustível e oxigênio aparecem em flutuações de quantidades intermitentes, existirá uma relação entre as flutuações e a concentração média das espécies [Magnussen e Hjertager, 1977]. Consequentemente a taxa de dissipação pode ser expressa através da concentração média das espécies reagentes. De forma adequada a taxa de combustão para o combustível, ou taxa de destruição de combustível na reação química de combustão, pode ser escrita da seguinte forma:

$$R_{comb} = K_1 f_{comb} \left(\frac{\epsilon}{k} \right) \quad (2.64)$$

onde K_1 é uma constante empírica, prescrita como 4,0, e $\frac{\epsilon}{k}$ é a escala de tempo para a turbulência, obtida do modelo k - ϵ , sendo ϵ a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, e k a energia cinética turbulenta.

Porém em regiões da chama onde a concentração de combustível é alta e a concentração de oxigênio é baixa, o oxigênio seria a espécie reagente que mostra o maior sinal de intermitência, ou seja, a espécie química mais homogênea [Magnussen e Hjertager, 1977].

Assim a dissipação de vórtices de oxigênio será, quando expressa da mesma forma que a equação acima, consequentemente a taxa limite de combustão. Deste modo

$$R_{ox} = K_1 \left(\frac{f_{ox}}{s} \right) \left(\frac{\epsilon}{k} \right) \quad (2.65)$$

onde s é a quantidade estequiométrica de oxigênio requerida para queimar 1 kg de combustível.

Rescrevendo as Equações (2.64) e (2.65) de forma generalizada, levando em consideração os coeficientes estequiométricos, a massa específica da mistura e a massa molecular das espécies envolvidas de forma a representar k -reações químicas de combustão, obtém-se uma única equação para representar as taxas finitas de reações químicas para as espécies reagentes,

$$R_{\alpha,k} = -\eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha K_1 \rho \left(\frac{\epsilon}{k} \right) \left(\frac{f_{j^*}}{\eta_{j^*,k} \overline{MM}_{j^*}} \right) \quad (2.66)$$

onde j^* representa o reagente j que fornece o menor valor para $R_{\alpha,k}$.

Em chamas turbulentas com pré-mistura, combustível e oxigênio se apresentam em um mesmo vórtice. Estes vórtices seriam separados por vórtices contendo produtos da combustão. A taxa de combustão é, neste caso, determinada pela expansão local dos gases de combustão, os quais podem ser determinados pelo mesmo mecanismo descrito acima [Magnussen e Hjertager, 1977]. Porém uma equação extra, responsável pela dissipação dos gases quentes oriundos da combustão pode ser adicionada nas situações onde a concentração dos gases de combustão é baixa. No sentido de relatar esta terceira equação, pode-se escrever,

$$R_{prod} = K_1 K_2 \left(\frac{f_p}{(1+s)} \right) \left(\frac{\epsilon}{k} \right) \quad (2.67)$$

onde K_2 é uma constante empírica, prescrita como 0,5, e f_p é a concentração mássica dos gases produtos, resultantes do processo de combustão.

Rescrevendo a Equação (2.67) de forma generalizada, análoga ao que foi feito para as Equações (2.64) e (2.65), obtém-se

$$R_{\alpha,k} = \eta_{\alpha,k} \overline{MM}_\alpha K_1 K_2 \rho \left(\frac{\epsilon}{k} \right) \left(\frac{\sum_p f_p}{\sum_p \eta_{p,k} \overline{MM}_p} \right) \quad (2.68)$$

onde $\overline{MM}_p$ é a massa molecular dos produtos e $\eta_{p,k}$ é coeficiente estequiométrico da espécie química p dos produtos da combustão na reação k .

As três equações sugeridas acima, Equações (2.64), (2.65) e (2.67) ou Equações (2.66) e (2.68), são assumidas como sendo geralmente aplicáveis à processos de combustão por difusão (caso do presente trabalho), processos de combustão com pré-mistura, e também combustão de jatos e partículas. Deste modo as Equações (2.66) e (2.68) são resolvidas, sendo o menor valor obtido, ou seja, a taxa limite utilizada na solução.

Finalmente, para o modelo combinado de Arrhenius-Magnussen, o valor final da taxa de formação ou destruição das espécies químicas, que deve ser empregado no cálculo do termo fonte das equações de conservação de energia e de espécies químicas, deve ser o menor valor obtido no cálculo da equação de Arrhenius e das equações de Magnussen. Segundo Miroslav et al. [2001] as taxas de reações químicas obtidas com a equação de Arrhenius são muito maiores do que as taxas de reações em chamas reais. Como a turbulência é um fenômeno que tende a decair, ou seja, os maiores vórtices são dissipados em vórtices menores, e assim por diante até atingir a escala de dissipação molecular, praticamente todas as reações químicas do processo de combustão ocorrem após a mistura entre as menores escalas de dissipação de vórtices. Sendo assim a escala de tempo das reações químicas se torna muito maior que a escala de tempo mecânico do escoamento, de modo que a turbulência é que vai controlar o processo de combustão. Segundo esta teoria a cinética de Arrhenius pode controlar as taxas de reações químicas apenas onde as temperaturas são baixas.

O número de equações de conservação de espécies químicas que deve ser resolvido para este modelo de combustão é igual a $\alpha - 1$ espécies químicas, sendo o somatório de R_α igual a 0.

2.3.2 Conservação de Energia - Modelo Arrhenius-Magnussen

No intuito de obter a equação de conservação de energia, fazendo novamente o uso da Equação (2.3), e assumindo os seguintes termos:

$$\begin{aligned}\phi &= h \\ \vec{J} &= -\frac{\kappa}{c_p} \vec{\nabla} h \\ S^\phi &= S_{rea} + S_{rad}\end{aligned}\tag{2.69}$$

obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h + \vec{\nabla} \cdot (\rho h \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa}{c_p} \vec{\nabla} h \right) + S_{rea} + S_{rad} \quad (2.70)$$

onde h , c_p e κ representam a entalpia, o calor específico e a condutividade térmica da mistura, respectivamente. Deste modo definem-se

$$h = \sum_{\alpha} \frac{\rho_{\alpha}}{\rho} h_{\alpha} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} h_{\alpha} \quad (2.71)$$

$$h_{\alpha} = \int_{T_{ref}}^T h_{\alpha}^0 + c_{p,\alpha} dT \quad (2.72)$$

$$c_p = \sum_{\alpha} f_{\alpha} c_{p,\alpha} \quad (2.73)$$

e

$$\kappa = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \kappa_{\alpha} \quad (2.74)$$

onde h_{α}^0 é a entalpia de formação da espécie α , e T_{ref} é a temperatura de referência.

O termo fonte S_{rea} representa o somatório dos termos fonte de entalpia devido às reações químicas, e segundo Fluent [1997], Nieckele et al. [2001] e Nieckele et al. [2002] pode ser definido da seguinte forma

$$S_{rea} = \sum_{\alpha} \left[\frac{h_{\alpha}^0}{MM_{\alpha}} + \int_{T_{ref,\alpha}}^{T_{ref}} c_{p,\alpha} dT \right] R_{\alpha} \quad (2.75)$$

onde R_{α} é a taxa volumétrica de formação ou destruição da espécie α obtida com o modelo de combustão. Nesta equação são considerados todos os reagentes e todos os produtos considerados nas reações de combustão. O termo h_{α}^0 é a entalpia de formação da espécie α , T_{ref} é a temperatura de referência, e $T_{ref,\alpha}$ é a temperatura de referência da espécie α .

O termo S_{rad} representa a transferência de calor por radiação. Este termo é determinado através da solução do modelo de transferência de calor por radiação pelo Método das Zonas [Hottel e Sarofim, 1967; Siegel e Howell, 2002], associado com o modelo de soma pon-

derada de gases cinzas (WSGGM – *Weighted Sum of Gray Gases Model* [Fluent, 1997; Smith et al., 1982]). Maiores detalhes sobre o modelamento do processo de radiação, juntamente com o modelo de soma ponderada de gases cinzas será visto no Capítulo 3.

Novamente fazendo a consideração de axissimetria e regime permanente, substituindo as Equações (2.6) e (2.7) na Equação (2.70) obtém-se a equação de conservação de energia em coordenadas cilíndricas axissimétricas, agora para o modelo E-A. Sendo assim

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho h) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho h) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\kappa}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\kappa}{c_p} r \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \dot{S}^h \quad (2.76)$$

onde no presente modelo

$$\dot{S}^h = S_{rea} + S_{rad} \quad (2.77)$$

2.4 Modelo de Reações Químicas Simplificadas - SCRS

O modelo de combustão de reações químicas simplificadas, SCRS [Spalding, 1979], é composto das equações de conservação de espécies químicas e de energia, sendo estas acopladas às equações de Navier-Stokes e ao modelo de turbulência k - ϵ . Este modelo assume reação química instantânea, e considera que o tempo característico da reação química seja governado pelo tempo característico da mecânica do escoamento. As demais características deste modelo são apresentadas a seguir.

2.4.1 Conservação de Espécies Químicas - Modelo SCRS

Da mesma forma que para o modelo de taxas finitas de reações químicas, E-A, deve-se acompanhar os componentes da mistura ao longo da câmara de combustão. Para obter a equação de conservação de espécies químicas, novamente fazendo o uso da Equação (2.3), define-se os seguintes termos:

$$\begin{aligned} \phi &= f_\alpha \\ \vec{J} &= -\Gamma_\alpha \vec{\nabla} f_\alpha \\ S^\phi &= \dot{G}^\alpha \end{aligned} \quad (2.78)$$

onde a concentração, ou fração mássica do componente α da mistura, f_α , já foi definida pela Equação (2.41), sendo $\dot{G}^\alpha$ o consumo ou a produção do componente α na mistura, Γ_α o coeficiente de difusão do componente α na mistura,

Substituindo estas definições na Equação (2.3) resulta em

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho f_\alpha + \vec{\nabla} \cdot (\rho f_\alpha \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma_\alpha \vec{\nabla} f_\alpha) + \dot{G}^\alpha \quad (2.79)$$

Segundo o modelo de combustão SCRS, em que a reação química de combustão envolve apenas dois reagentes, combustível e oxidante (ver Figura 2.3), a reação química simplificada pode ser definida como

$$f_{comb} + f_{ox} + f_{prod} = 1 \quad (2.80)$$

onde f_{prod} é a fração mássica dos produtos da combustão.

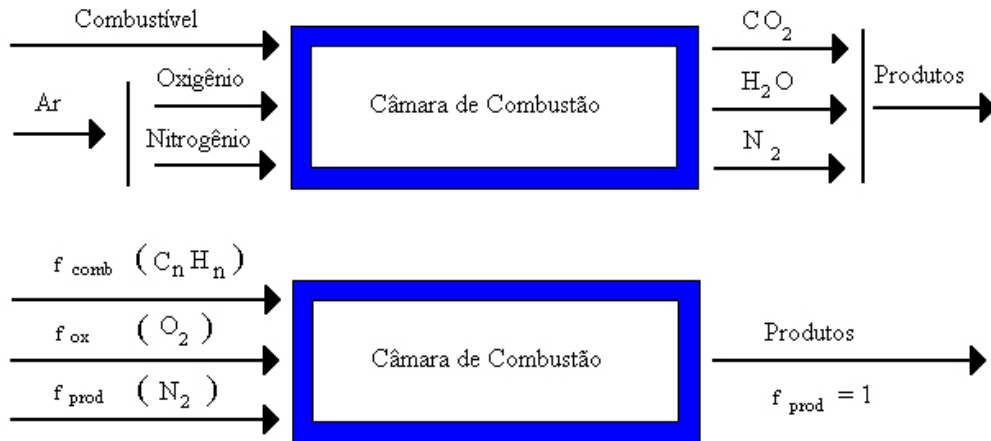


Figura 2.3 – Representação dos fluxos de espécies químicas segundo o modelo SCRS.

Deste modo se faz necessário resolver as seguintes equações diferenciais:

Combustível

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho f_{comb} + \vec{\nabla} \cdot (\rho f_{comb} \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma_{comb} \vec{\nabla} f_{comb}) + \dot{G}^{comb} \quad (2.81)$$

onde f_{comb} é a fração mássica do combustível na mistura, Γ_{comb} é o coeficiente de difusão mássica do combustível na mistura, e $\dot{G}^{comb}$ representa o consumo de combustível na mistura.

Oxigênio

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho f_{ox} + \vec{\nabla} \cdot (\rho f_{ox} \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma_{ox} \vec{\nabla} f_{ox}) + \dot{G}^{ox} \quad (2.82)$$

onde f_{ox} é a fração mássica de oxigênio na mistura, Γ_{ox} é o coeficiente de difusão mássica do oxigênio na mistura, e $\dot{G}^{ox}$ representa o consumo de oxigênio na mistura.

Com a consideração de reação química instantânea no processo de combustão, sabendo que em escoamentos turbulentos a difusão de espécies químicas devido à turbulência é dominante sobre a difusão molecular, adota-se com boa aproximação [Spalding, 1979] que

$$\Gamma_{\alpha} = \Gamma_{comb} = \Gamma_{ox} = \rho D \quad (2.83)$$

onde D é a difusividade mássica da mistura.

Segundo o modelo SCRS o combustível e o oxidante reagem através de uma única reação química, sendo o resultado desta reação assumido como produtos. Levando em consideração a relação estequiométrica s , entre as massas de oxigênio e de combustível, obtém-se

$$\dot{G}^{ox} = s \dot{G}^{comb} \quad (2.84)$$

Dividindo a Equação (2.82) por s , e subtraindo-a da (2.81) obtém-se uma única equação para as espécies químicas,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho \left(f_{comb} - \frac{f_{ox}}{s} \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho \left(f_{comb} - \frac{f_{ox}}{s} \right) \vec{V} \right) &= \vec{\nabla} \cdot \left(\rho D \vec{\nabla} \left(f_{comb} - \frac{f_{ox}}{s} \right) \right) \\ &+ \dot{G}^{comb} - \frac{\dot{G}^{ox}}{s} \end{aligned} \quad (2.85)$$

onde, conforme a Equação (2.84), os termos de consumo de combustível e de oxigênio são globalmente anulados. Já o termo

$$f_{comb} - \frac{f_{ox}}{s} \quad (2.86)$$

segue sendo tratado localmente no domínio de cálculo.

A fim de simplificar a Equação (2.85), define-se, como uma variável auxiliar, a fração

mássica de mistura f_{fx} ,

$$f_{fx} = f_{comb} - \frac{f_{ox}}{s} \quad (2.87)$$

e deste modo

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho f_{fx}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho f_{fx} \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} f_{fx}) \quad (2.88)$$

Analisando o sinal de f_{fx} é possível identificar a região rica em combustível e a região rica em oxigênio. Desta forma, quando f_{fx} for maior que zero tem-se uma região rica em combustível, e quando f_{fx} for menor que zero tem-se uma região rica em oxigênio. No modelo SCRS é assumido que a reação química é instantânea e portanto o oxigênio e o combustível não coexistem. O modelo ilustra este fato da seguinte forma:

$$f_{fx} > 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} f_{ox} = 0 \\ f_{comb} = f_{fx} \end{array} \right\} \quad (2.89)$$

e

$$f_{fx} < 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} f_{comb} = 0 \\ f_{ox} = -s f_{fx} \end{array} \right\} \quad (2.90)$$

Da mesma forma que na dedução das equações de conservação de massa, de energia, e de quantidade de movimento, aplicando as Equações (2.6) e (2.7) na Equação (2.88), obtém-se a equação da conservação de espécies químicas em coordenadas cilíndricas. Deste modo, em regime permanente, e considerando a axissimetria,

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho f_{\alpha}) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho f_{\alpha}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho D r \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial r} \right) + \dot{S}^{\alpha} \quad (2.91)$$

onde, no presente modelo, $\alpha = fx$, e deste modo

$$\dot{S}^{\alpha} = \dot{S}^{fx} = 0 \quad (2.92)$$

2.4.2 Conservação de Energia - Modelo SCRS

Da mesma forma que no modelo E-A, no intuito de obter a equação de conservação de energia para o modelo SCRS, fazendo o uso da Equação (2.3), e assumindo os seguintes

termos:

$$\begin{aligned}\phi &= h \\ \vec{J} &= -\frac{\kappa}{c_p} \vec{\nabla} h \\ S^\phi &= -\dot{G}^{comb} H^{comb} + S_{rad}\end{aligned}\tag{2.93}$$

obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h + \vec{\nabla} \cdot (\rho h \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa}{c_p} \vec{\nabla} h \right) - \dot{G}^{comb} H^{comb} + S_{rad}\tag{2.94}$$

onde os termos h , c_p e κ representam, respectivamente, a entalpia, o calor específico e a condutividade térmica da mistura, já definidos anteriormente. Os termos H^{comb} e S_{rad} são a entalpia de combustão e o termo fonte que leva em conta a transferência de calor por radiação.

Note que na Equação (2.94) não foi incluída a parcela referente ao transporte de energia devido a difusão de cada espécie separadamente. Esta hipótese é muito boa, principalmente considerando a importância da advecção [Spalding, 1979].

Verifica-se também na Equação (2.94) a existência do termo $\dot{G}^{comb}$, referente ao consumo de combustível. Para que se possa resolver este termo, se faz necessário a solução da equação de conservação de espécies químicas, também para o combustível. Porém, como visto na seção anterior, tem-se somente uma equação, equação da conservação da fração de mistura, para a determinação das espécies químicas no processo de combustão. Desta forma, comparando as Equações (2.81) e (2.94), verifica-se que, multiplicando a Equação (2.81) pela entalpia de combustão (H^{comb}) e somando com a Equação (2.94), pode-se anular este termo obtendo uma nova equação para a conservação de energia. Sendo assim, para c_p constante, integrando a Equação (2.72) com $T_{ref} = 0$, obtém-se

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \rho (c_p T + H^{comb} f_{comb}) &+ \vec{\nabla} \cdot (\rho (c_p T + H^{comb} f_{comb}) \vec{V}) \\ &= \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa}{c_p} \vec{\nabla} (c_p T + H^{comb} f_{comb}) \right) \\ &+ S_{rad}\end{aligned}\tag{2.95}$$

podendo novamente simplificar a equação fazendo

$$h = c_p T + H^{comb} f_{comb} \quad (2.96)$$

Com a consideração de axissimetria e regime permanente, substituindo as Equações (2.6), (2.7) e (2.96) na Equação (2.95) obtém-se a equação da conservação de energia em coordenadas cilíndricas axissimétricas. Deste modo

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho h) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho h) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\kappa}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\kappa}{c_p} r \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \dot{S}^h \quad (2.97)$$

onde no presente modelo

$$\dot{S}^h = S_{rad} \quad (2.98)$$

O termo S_{rad} , da mesma forma que no modelo E-A, é determinado através da solução do modelo de transferência de calor por radiação pelo Método das Zonas [Hottel e Sarofim, 1967], associado com o modelo de soma ponderada de gases cinzas (WSGGM – *Weighted Sum of Gray Gases Model*). Maiores detalhes sobre o modelamento do processo de radiação, juntamente com o modelo de soma ponderada de gases cinzas também será visto no Capítulo 3.

Completando os modelos E-A e SCRS, pode-se determinar a massa específica da mistura através da equação de estado de gás perfeito [Spalding, 1979; Fluent, 1997]:

$$\rho = \frac{p \overline{MM}}{RT} \quad (2.99)$$

onde a massa molecular $\overline{MM}$ varia de acordo com a concentração da mistura, e é calculada da seguinte forma.

$$\frac{1}{\overline{MM}} = \sum_{\alpha} \frac{f_{\alpha}}{\overline{MM}_{\alpha}} \quad (2.100)$$

2.5 Turbulência: Equações de Transporte

Os primeiros modelos para a descrição da transferência de quantidade de movimento e de energia (ou de outra propriedade), em escoamentos turbulentos, se baseiam essencialmente na identificação de grandezas adimensionais para a caracterização do escoamento. Os

modelos assim desenvolvidos relacionam, por exemplo, quantidades tais como número de Nusselt (Nu) em função de parâmetros tais como número de Reynolds (Re) e o número de Prandtl (Pr). Embora úteis em algumas situações, essas correlações são via de regra limitadas à geometria do problema, e às faixas de Re e de Pr para os quais foram ajustadas.

Com o surgimento dos computadores digitais, análises mais elaboradas tornaram-se possíveis através da aplicação de técnicas numéricas para a solução das equações diferenciais governantes do escoamento. Embora informações sobre as menores escalas do escoamento turbulento sejam relevantes, em muitas situações é suficiente uma descrição do escoamento médio. O conceito de *Tensão de Reynolds*, introduzido por Reynolds [1895], usa esta idéia e é o ponto de partida para a vasta maioria das simulações de escoamentos. De acordo com esse método, qualquer propriedade do escoamento pode ser expressa através de uma quantidade média e outra de flutuação associada à turbulência. Desse modo para eliminar a necessidade de resolver os detalhes do escoamento utiliza-se uma integração ao longo de um intervalo de tempo. Quando variações temporais do escoamento, não associadas à turbulência, ocorrem ao longo de escalas de tempo muito maiores do que as referentes aos maiores vórtices, uma média temporal das variáveis como definida por Reynolds [1895] torna-se conveniente. Assume-se que a média temporal da velocidade seja

$$\bar{U} = \frac{1}{t} \int_{t_0 - t/2}^{t_0 + t/2} U dt \quad (2.101)$$

As propriedades resultantes desta média, para um escoamento turbulento em regime permanente ou estacionário, variam muito menos espacialmente do que os valores instantâneos da turbulência [Freire et al., 2002].

A velocidade média na Equação (2.101) é definida como um valor limite alcançado para valores de t indefinidamente longos. Na prática, o valor médio pode ser estabelecido num intervalo de tempo pequeno que, dependendo do escoamento, pode representar uns poucos segundos ou mesmo alguns milésimos de segundo. Em regiões do escoamento totalmente turbulento a velocidade média pode ser avaliada de forma razoável num intervalo de tempo da ordem de $10^2 \frac{L'}{u}$, onde u e L' são as magnitudes das escalas de velocidade e comprimento, respectivamente, dos maiores vórtices. Desta forma a Equação (2.101) pode, em princípio, ser usada para a definição de valores médios, mesmo em escoamentos não estacionários, desde

que ao longo do tempo mínimo t necessário para a média.

A diferença entre a velocidade instantânea e seu valor médio é definida como:

$$U' = U - \bar{U} \quad (2.102)$$

onde U' é a flutuação da velocidade.

Por analogia ao que foi feito para a velocidade U , uma quantidade instantânea qualquer Φ pode ser escrita como a soma de um valor médio $\bar{\Phi}$ e um termo de flutuação Φ' . Deste modo

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (2.103)$$

Por tratar-se de uma flutuação em torno da média, com valores positivos e negativos respectivamente a ela,

$$\bar{\Phi}' = 0 \quad (2.104)$$

Com isso pode-se agora obter novas relações necessárias na avaliação da transferência de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas para o escoamento médio. Assim, uma vez que operações temporais e espaciais são comutativas, obtém-se

$$\overline{\frac{\partial \Phi}{\partial \chi}} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial \chi} \quad (2.105)$$

e

$$\frac{\partial \bar{\Phi}'}{\partial \chi} = \frac{\partial \Phi'}{\partial \chi} = 0 \quad (2.106)$$

onde χ pode ser qualquer uma das coordenadas espaciais.

Aplicando as Equações (2.103), (2.104), (2.105) e (2.106) nas Equações (2.11), (2.16), (2.25), (2.37), (2.91) e (2.97) obtém-se a representação do campo de velocidades e propriedades médias de um escoamento turbulento. Esta representação é composta pelas seguintes equações:

Conservação de Massa

Aplicando o conceito de média na Equação (2.11) obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r \bar{v}) = 0 \quad (2.107)$$

Conservação de Quantidade de Movimento Linear

Observando as Equações (2.16), (2.25) e (2.37) nota-se, desconsiderando os termos fontes, que estas equações são idênticas. Estas podem ser representadas por uma única equação, que é a seguinte:

$$u \frac{\partial}{\partial x} (\rho \Phi) + v \frac{\partial}{\partial r} (\rho \Phi) = \rho B_\Phi - \vec{\nabla} p + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \dot{F}_\Phi \quad (2.108)$$

onde o termo fonte $\dot{F}_\Phi$ pode ser substituído de maneira adequada para cada uma das três direções, como já desenvolvido anteriormente (Equações (2.17), (2.26), e (2.38)), e Φ representa as componentes de velocidade axial, radial e angular.

Considerou-se, além de escoamento incompressível, que as variações da massa específica e da viscosidade são tão pequenas de forma que seus efeitos sobre a turbulência possam ser desprezados.

Realizando a média da Equação (2.108) resulta:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{\Phi}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{\Phi}) = \rho \bar{B}_\Phi - \vec{\nabla} \bar{p} + \vec{\nabla} \cdot \left(\mu \vec{\nabla} \bar{\Phi} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \overline{u'v'}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho \overline{u'v'}) + \bar{\dot{F}}_\Phi \quad (2.109)$$

As Equações (2.109) e (2.107) são conhecidas como *Equações de Reynolds*. Nestas equações o termo $\overline{\rho u'v'}$ é denominado *Tensor de Reynolds*, o qual representa a transferência de quantidade de movimento adicional causada pela turbulência.

Neste modelamento, devido a consideração de axissimetria, não está sendo considerada a componente de flutuação de velocidade para o sentido angular da conservação de quantidade de movimento. Sendo assim, as derivadas cruzadas oriundas das *Tensões de Reynolds* para esta componente são desprezadas.

Conservação de Energia

O transporte de energia pode ser descrito através da Equação (2.97). Aplicando o conceito de média a ela obtém-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{h}) = \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\kappa}{c_p} \vec{\nabla} \bar{h} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \overline{u'h'}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho \overline{v'h'}) + \bar{\dot{S}}^h \quad (2.110)$$

onde o termo $\overline{\dot{S}^h}$, além de representar eventuais fontes e sumidouros de energia, pode englobar também qualquer termo que não se encaixe na estrutura dos outros termos da equação, como por exemplo os termos referentes às trocas de calor por radiação S_{rad} , e devido às reações químicas S_{rea} , do modelamento de taxas finitas de reações químicas de Arrhenius-Magnussen.

As médias dos produtos de flutuações $\overline{\rho u' h'}$ e $\overline{\rho v' h'}$ são interpretadas como difusividades adicionais de h devido à turbulência, e precisam ser determinadas.

Conservação de Espécies Químicas

De maneira análoga ao que foi feito para a equação de conservação de energia, aplicando o conceito de média à Equação (2.91), obtém-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{f}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{f}_\alpha) = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} \bar{f}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x} (\overline{\rho u' f'_\alpha}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \overline{\rho v' f'_\alpha}) + \bar{\dot{S}^\alpha} \quad (2.111)$$

onde as médias dos produtos de flutuações $\overline{\rho u' f'_\alpha}$ e $\overline{\rho v' f'_\alpha}$, são interpretadas como a difusividade adicional de f_α devido à turbulência, e precisam ser também determinadas. Na Seção 2.5.1 serão desenvolvidas expressões para estes termos.

O termo $\bar{\dot{S}^\alpha}$ também pode englobar termos que não se encaixem na estrutura da equação, como por exemplo as taxas de reações químicas R_α do modelo de Arrhenius-Magnussen.

2.5.1 Conceito de Viscosidade Turbulenta

A hipótese de que as *Tensões de Reynolds* $\overline{\rho u' v'}$ são proporcionais à deformação no escoamento médio, agindo de forma análoga às tensões viscosas, foi originalmente proposta por Boussinesq [1877], através do conceito de viscosidade turbulenta. Considerando um escoamento unidirecional ao longo de uma placa plana infinita, ele propôs que, assim como no caso de tensão viscosa, a contribuição da turbulência na transferência de quantidade de movimento poderia ser modelada por

$$-\overline{\rho u' v'} = \mu_t \frac{\partial U}{\partial y} \quad (2.112)$$

onde u' e v' são as flutuações de velocidade associadas às componentes de velocidades instantâneas u e v , paralela e normal à superfície, respectivamente, e y é a direção normal a esta superfície. Em contraste com a viscosidade molecular, μ_t não é uma propriedade física

do fluido, mas sim do escoamento, uma medida local do nível de turbulência, variando de ponto a ponto e de escoamento para escoamento.

Ao longo dos últimos anos a hipótese de Boussinesq, numa forma generalizada proposta por Kolmogorov [1942], tem sido um dos métodos mais empregados para a previsão de escoamentos turbulentos [Freire et al., 2002]. Segundo Kolmogorov, o *Tensor de Reynolds* pode ser avaliado através da seguinte relação

$$-\overline{\rho u'v'} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) - \frac{2}{3}k \quad (2.113)$$

onde k é a energia cinética das flutuações de velocidade. Introduzindo a Equação (2.113) na Equação (2.109) obtém-se, na direção axial,

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{u}) &= \rho \bar{B}_x - \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{p} + \frac{2}{3}k \right) + \vec{\nabla} \cdot \left((\mu + \mu_t) \vec{\nabla} \bar{u} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \bar{S}^u \end{aligned} \quad (2.114)$$

e, na direção radial,

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{v}) &= \rho \bar{B}_r - \frac{\partial}{\partial r} \left(\bar{p} + \frac{2}{3}k \right) + \vec{\nabla} \cdot \left((\mu + \mu_t) \vec{\nabla} \bar{v} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \bar{S}^v \end{aligned} \quad (2.115)$$

Para a equação de quantidade de movimento angular rw em quantidades médias obtém-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{r}w) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{r}w) = \rho \bar{B}_\theta + \vec{\nabla} \cdot \left((\mu + \mu_t) \vec{\nabla} \bar{r}w \right) + \bar{S}^\theta \quad (2.116)$$

sendo desprezadas as derivadas cruzadas, oriundas das *Tensões de Reynolds*.

Modelos seguindo esta hipótese avaliam μ_t utilizando desde simples relações algébricas até equações diferenciais, tal como o modelo $k - \epsilon$ apresentado em Launder e Spalding [1972], que será mostrado posteriormente. A energia cinética k não precisa ser obtida obrigatoriamente do modelo, já que ela pode ser eliminada pela definição de uma nova pressão p^* para o escoamento. Deste modo:

$$p^* = \bar{p} + \frac{2}{3}k \quad (2.117)$$

Segundo Launder e Spalding [1972] os termos das flutuações médias das propriedades h e f_{fx} podem ser determinados da seguinte forma:

$$-\rho \overline{u'h'} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{h}}{\partial x} \quad (2.118)$$

$$-\rho \overline{v'h'} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} \quad (2.119)$$

$$-\rho \overline{u'f'_\alpha} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial x} \quad (2.120)$$

e

$$-\rho \overline{v'f'_\alpha} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial r} \quad (2.121)$$

onde a energia cinética turbulenta das flutuações de velocidade é definida como

$$k = \frac{(\overline{u'^2} + \overline{v'^2})}{2} \quad (2.122)$$

Estas deduções, incluindo as *Tensões de Reynolds*, podem ser encontradas em vários livros texto [Tennekes e Lumley, 1972; Hinze, 1975; Schlichting, 1979; Launder e Spalding, 1972]. Deste modo substituindo as Equações (2.118) e (2.119) na Equação (2.110), e as Equações (2.120) e (2.121) na Equação (2.111), obtêm-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{h}) = \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{\kappa}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \vec{\nabla} \bar{h} \right) + \bar{S}^h \quad (2.123)$$

e

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{f}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{f}_\alpha) = \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \vec{\nabla} \bar{f}_\alpha \right) + \bar{S}^\alpha \quad (2.124)$$

2.5.2 Modelo k - ϵ

A viscosidade turbulenta pode ser obtida através de modelos de turbulência empíricos, modelos de uma equação de conservação ou ainda por modelos de duas ou mais equações de conservação. Os modelos empíricos são relativamente simples e empregam o conceito de

viscosidade aparente [Schlichting, 1979; Fox e McDonald, 1998] juntamente com coeficientes obtidos experimentalmente. O modelo de uma equação utiliza constantes empíricas e uma equação de conservação para determinar a energia cinética turbulenta.

Existem vários modelos a duas equações. Como exemplo podem ser citados os modelos $k - \epsilon$, $k - \omega$ e $k - \hat{\epsilon}$, [Sebben, 1997]. Nestes casos, a viscosidade turbulenta é obtida relacionando-se estas duas variáveis com outras propriedades e constantes empíricas. As propriedades utilizadas variam de gênero e número, e sua utilização depende do modelo empregado.

Provavelmente o modelo de turbulência mais conhecido e usado ainda atualmente seja o modelo $k - \epsilon$, que utiliza duas equações de conservação para determinar a viscosidade turbulenta. Este modelo utiliza uma equação de conservação para energia cinética turbulenta k , e outra para a sua dissipação ϵ [Launder e Spalding, 1972; Rodi, 1984; Visser e Cilliers, 1995; Xu et al., 1998]. Desta forma, executando a mesma manipulação feita para as equações anteriores, de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas, obtêm-se

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho k) = \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \vec{\nabla} k \right) + P_k - \rho \epsilon \quad (2.125)$$

e

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \epsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \epsilon) = \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \vec{\nabla} \epsilon \right) + C_{1,\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2,\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.126)$$

onde o termo de produção ou dissipação de energia cinética turbulenta pode ser definido como:

$$P_k = \mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \quad (2.127)$$

A viscosidade turbulenta é

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.128)$$

Estas equações, mais as equações de conservação de massa (Equação (2.107)), quantidade de movimento (Equações (2.114) e (2.115)), conservação de energia (Equação (2.123)) e conservação de espécies químicas (Equação (2.124)) podem ser resolvidas numericamente

desde que sejam utilizados valores adequados para as cinco constantes, $C_{1,\epsilon}$, $C_{2,\epsilon}$, C_μ , e σ_k e σ_ϵ presentes nas Equações (2.125) e (2.126). Os valores normalmente usados [Launder e Sharma, 1974; Launder e Spalding, 1974; Cotton e Jackson, 1990; Davidson, 1990; Xia et al., 1998] para estas constantes são:

$$C_{1,\epsilon} = 1,44$$

$$C_{2,\epsilon} = 1,92$$

$$C_\mu = 0,09$$

$$\sigma_k = 1,0$$

$$\sigma_\epsilon = 1,3$$

Neste modelo são usadas funções de parede para relacionar o contorno do domínio computacional com o limite da sub-camada viscosa. Este modelo também é indicado para simular escoamentos com altos números de Reynolds, caso a ser resolvido neste trabalho.

2.5.3 Funções de Parede

Os vórtices próximos às paredes sólidas possuem diminutas escalas de comprimento, e assim frequências altas. Dessa forma a turbulência nessas regiões pode ser considerada estatisticamente, independente dos vórtices de baixa frequência (grandes escalas de comprimento) e do escoamento médio. Assim o escoamento junto à parede é assumido ser afetado somente pela proximidade da parede e pela viscosidade do fluido. Tal região é denominada *Região de Parede* e pode ser subdividida em três regiões [Freire et al., 2002].

Sub-camada limite viscosa: onde o transporte devido a difusão molecular é dominante;

Camada de amortecimento: onde o transporte molecular e turbulento são da mesma ordem de magnitude;

Região turbulenta: onde o transporte turbulento é dominante.

Uma outra característica importante do escoamento turbulento junto às superfícies sólidas é a existência de uma região onde a tensão total τ (soma das tensões viscosas e das *Tensões de Reynolds*) é constante e igual à tensão de cisalhamento na parede τ_w [Freire et al., 2002].

Dadas estas características, o perfil de velocidade U do escoamento pode ser deter-

minado a partir das condições na parede, expressas pela tensão de cisalhamento na parede τ_w , pela rugosidade e , da distância y normal à superfície, e das propriedades físicas do fluido, ou seja,

$$U = U(\tau_w, e, y, \rho, \mu) \quad (2.129)$$

Desta forma, por meio de análise dimensional,

$$\frac{U}{u^*} = f\left(\frac{u^* y}{\nu}, \frac{u^* e}{\nu}\right) \quad (2.130)$$

onde define-se a velocidade de referência como

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.131)$$

e a viscosidade cinemática como

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (2.132)$$

Para uma superfície lisa $e = 0$, obtém-se

$$\frac{U}{u^*} = f\left(\frac{u^* y}{\nu}\right) \quad (2.133)$$

Sub-camada Limite Viscosa

Na sub-camada limite viscosa ($y \rightarrow 0$) a tensão total τ é praticamente igual à tensão viscosa e à tensão na parede τ_w . Portanto

$$\mu \frac{\partial U}{\partial y} \cong \tau = \tau_w \quad (2.134)$$

ou ainda,

$$\frac{\partial U}{\partial y} \cong \frac{\tau_w}{\mu} \quad (2.135)$$

Esta relação indica uma variação linear de velocidade e, como $U = 0$ na parede, obtém-se

$$U = \frac{\tau_w}{\mu} y \quad (2.136)$$

ou em termos adimensionais

$$\frac{U}{u^*} = \frac{u^* y}{\nu} \quad (2.137)$$

Definindo a velocidade característica adimensional,

$$u^+ = \frac{U}{u^*} \quad (2.138)$$

e também a dimensão característica adimensional,

$$y^+ = \frac{u^* y}{\nu} \quad (2.139)$$

pode-se escrever o perfil de velocidade para a sub-camada limite viscosa. Deste modo

$$u^+ = y^+ \quad (2.140)$$

Dados experimentais mostram que esta relação é válida para valores de $y^+ < 5$.

Região Turbulenta

Na região turbulenta o transporte turbulento é dominante. Portanto espera-se que nessa região a variação da velocidade não dependa da viscosidade, mas sim de u^+ e y^+ , ou seja,

$$\frac{\partial U}{\partial y} = f(u^*, y) \quad (2.141)$$

Aplicando também a análise adimensional na Equação (2.141), obtém-se

$$\frac{\partial U}{\partial y} = \frac{u^*}{\Lambda y} \quad (2.142)$$

onde Λ é a constante de proporcionalidade.

Integrando a Equação (2.142) resulta:

$$u^+ = \frac{1}{\Lambda} \ln(y^+) + \Psi \quad (2.143)$$

onde Ψ é uma constante de ajuste.

A Equação (2.143) é conhecida como perfil logaritmo de velocidade na parede, e é um dos resultados mais conhecidos no estudo da turbulência, sendo válida aproximadamente

para o intervalo $30 < y^+ < 200$. Na região $5 < y^+ < 30$ os efeitos viscosos e turbulentos são de mesma ordem de magnitude e um perfil de velocidade deve ser ajustado. Para valores de $y^+ > 200$ a variação de velocidade não depende mais somente dos parâmetros ligados à parede sólida mas também de efeitos dinâmicos da camada limite como um todo [Freire et al., 2002].

De acordo com resultados experimentais de Nikuradse [1933], pode-se associar à constante de proporcionalidade Λ o valor de 0,4, e para a constante de ajuste Ψ o valor de 5,5. Por outro lado, num trabalho mais recente Coles e Hirst [1968] propõem $\Lambda = 0,41$ e $\Psi = 5,0$.

Para avaliar u^+ e y^+ se faz necessário conhecer τ_w . Deste modo, assume-se que perto da parede a produção de turbulência é igual à sua dissipação. Assim

$$-\rho \overline{u'v'} \frac{\partial u}{\partial y} = \rho \epsilon \quad (2.144)$$

Como

$$-\rho \overline{u'v'} = \tau = \mu_t \frac{\partial u}{\partial y} \quad (2.145)$$

obtem-se:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\tau}{\mu_t} \quad (2.146)$$

Substituindo na Equação (2.144):

$$\tau \frac{\tau}{\mu_t} = \rho \epsilon \quad (2.147)$$

Utilizando-se da Equação (2.128), e assumindo a velocidade de fricção como sendo

$$\mu \tau = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \quad (2.148)$$

obtem-se, em termos de y^+ , levando em conta as Equações (2.131), (2.134) e (2.139),

$$y^+ = \frac{\rho C_\mu^{\frac{1}{4}} k^{\frac{1}{2}}}{\mu} y \quad (2.149)$$

Em um problema não isotérmico, para a situação em que se tem fluxo de calor por

convecção para o exterior do domínio de cálculo, funções de parede também são necessárias para determinar o fluxo de calor por difusão das regiões próximas à parede para a mesma. Sendo assim, segundo dados experimentais, tem-se para $y^+ \leq 11,5$ a transferência de calor à parede é governada por fenômenos moleculares, sendo função apenas das propriedades do fluido em consideração. Deste modo

$$\Gamma_T = \left(\frac{\mu}{Pr} \right) \quad (2.150)$$

Para $y^+ \geq 11,5$, os efeitos da turbulência estão presentes, e a difusão de calor tem sua intensidade aumentada. Sendo assim a seguinte função de parede deve ser usada [Patankar, 1980]:

$$\Gamma_T = \frac{\mu y^+}{Pr_t \left\{ 2,5 \ln(9y^+) + \left[9 \left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1 \right) \left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{-\left(\frac{1}{4}\right)} \right] \right\}} \quad (2.151)$$

2.6 Modelamento em Coordenadas Cilíndricas Axissimétricas

Como no presente trabalho a geometria em estudo se apresenta em coordenadas cilíndricas, considerando axissimetria e as médias de Reynolds, fazendo o uso das Equações (2.7) e (2.6) pode-se rescrever as Equações (2.107), (2.114), (2.115), (2.116), (2.123), (2.124), (2.125) e (2.126) em coordenadas cilíndricas axissimétricas para os modelos SCRS e E-A.

Conservação de Massa - Modelos SCRS e E-A:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho \bar{v}) + \frac{\bar{v}\rho}{r} = 0 \quad (2.152)$$

Conservação de Quantidade de Movimento Axial - u - Modelos SCRS e E-A:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r}(\rho \bar{u}) &= \rho \bar{B}_x - \frac{\partial p^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (2.153)$$

Reescrevendo a Equação (2.153) na forma da Equação (2.3):

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{u}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \bar{\dot{S}}^u \end{aligned} \quad (2.154)$$

onde

$$\bar{\dot{S}}^u = \rho \bar{B}_x - \frac{\partial p^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \quad (2.155)$$

Conservação de Quantidade de Movimento Radial - r - Modelos SCRS e E-A:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{v}) &= \rho \bar{B}_r - \frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r} \end{aligned} \quad (2.156)$$

Reescrevendo a Equação (2.156) também na forma da Equação (2.3):

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{v}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{v}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \bar{\dot{S}}^v \end{aligned} \quad (2.157)$$

onde

$$\bar{\dot{S}}^v = \rho \bar{B}_r - \frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r} \quad (2.158)$$

Conservação de Quantidade de Movimento Angular rw - Modelos SCRS e E-A:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r \bar{w}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r \bar{w}) &= r \rho \bar{B}_\theta + \frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial x} (r \bar{w}) \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w}) \right) \\ &- \frac{2(\mu + \mu_t)}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w}) \end{aligned} \quad (2.159)$$

Reescrevendo a Equação (2.159), da mesma forma que as equações anteriores, na forma da

Equação (2.3):

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho r \bar{w}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r \bar{w}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial x} (r \bar{w}) \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r (\mu + \mu_t) \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w}) \right) + \bar{\dot{S}}^\theta \end{aligned} \quad (2.160)$$

onde

$$\bar{\dot{S}}^\theta = r \rho \bar{B}_\theta - \frac{2(\mu + \mu_t)}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w}) \quad (2.161)$$

Conservação de Energia - Modelo SCRS:

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{h}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{\kappa}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\kappa}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} \right) + \bar{\dot{S}}^h \quad (2.162)$$

onde o termo $\bar{\dot{S}}^h$ é composto apenas por $\bar{S}_{rad}$, já que para este modelo é assumido que a reação química seja instantânea. O termo $\bar{S}_{rad}$ será determinado pelo modelo de transferência de calor por radiação através do Método das Zonas acoplado ao modelo WSGGM (ver Capítulo 3).

Conservação de Espécies Químicas - Modelo SCRS:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{f}_{fx}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{f}_{fx}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{f}_{fx}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{f}_{fx}}{\partial r} \right) \end{aligned} \quad (2.163)$$

Conservação de Energia - Modelo E-A:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{h}) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{h}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{\kappa}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\frac{\kappa}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} \right) \\ &+ \bar{\dot{S}}^h \end{aligned} \quad (2.164)$$

onde o termo $\bar{\dot{S}}^h$ é composto pelos termos médios $\bar{S}_{rad}$ e $\bar{S}_{rea}$, e são determinados, respectivamente, pelo modelo de transferência de calor por radiação, Método das Zonas, acoplado ao modelo WSGGM (ver Capítulo 3), e modelo de taxas finitas de reações químicas globais de Arrhenius-Magnussen (Equação (2.75)).

Conservação de Espécies Químicas - Modelo E-A:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{f}_\alpha) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{f}_\alpha) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial r} \right) \\ &+ \bar{\dot{S}}^\alpha \end{aligned} \quad (2.165)$$

onde o termo $\bar{\dot{S}}^\alpha$ é obtido a partir do cálculo médio de $\bar{R}_\alpha$ fazendo o uso dos modelos de taxas finitas de reações químicas de Arrhenius e de Magnussen (Equações (2.63), (2.66) e (2.68)).

Conservação de Energia Cinética Turbulenta:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho k) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \left(\frac{\partial k}{\partial r} \right) \right) \\ &+ P_k - \rho \epsilon \end{aligned} \quad (2.166)$$

Reescrevendo a Equação (2.166) na forma da Equação (2.3):

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho k) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho k) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \left(\frac{\partial k}{\partial x} \right) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \left(\frac{\partial k}{\partial r} \right) \right) + \bar{\dot{S}}^k \quad (2.167)$$

onde

$$\bar{\dot{S}}^k = P_k - \rho \epsilon \quad (2.168)$$

O termo de produção ou dissipação de energia cinética turbulenta, P_k , é determinado pela Equação (2.127)

Conservação da Dissipação de Energia Cinética Turbulenta:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \epsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \epsilon) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial r} \right) \right) \\ &+ C_{1,\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2,\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (2.169)$$

Reescrevendo a Equação (2.169) na forma da Equação (2.3):

$$\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \epsilon) + \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} (\rho \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial r} \right) \right) + \bar{\dot{S}}^\epsilon \quad (2.170)$$

onde

$$\overline{\dot{S}^\epsilon} = C_{1,\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2,\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.171)$$

Novamente o termo P_k é determinado pela Equação (2.127).

2.7 Considerações Finais Sobre o Modelo

As equações obtidas no presente capítulo contam com as hipóteses simplificativas repetidas a seguir:

1. Escoamento turbulento e incompressível;
2. Modelo de turbulência k - ϵ (RANS) para fluido incompressível sem reação química;
3. Fluido Newtoniano;
4. Número de Lewis laminar igual à unidade ($Le = (Sc/Pr) = 1$);
5. Número de Lewis turbulento igual à unidade ($Le = (Sc_t/Pr_t) = (\sigma_t/\sigma_t) = 1$);
6. No modelo SCRS a reação química de combustão ocorre instantaneamente (combustível e oxigênio não coexistem);
7. No modelo de combustão E-A de Arrhenius-Magnussen assume-se taxas finitas de reações químicas;
8. Propriedades termofísicas constantes para cada material ou substância;
9. Derivadas cruzadas, oriundas das *Tensões de Reynolds* são desprezadas na equação de $\overline{rw}$, ou seja, turbulência isotrópica;
10. Termos de empuxo nas equações de quantidade de movimento são desconsiderados;
11. Pressão constante e uniforme no interior da câmara;
12. Para a taxa de reação química do modelo E-A assume-se que as reações ocorrem a taxas finitas na temperatura média. Isto é assumido pelo fato de que

$$\overline{R_\alpha} \neq R_\alpha(\overline{T});$$

13. No modelos E-A e SCRS o coeficiente de difusividade mássica é assumido como sendo o coeficiente de difusividade da mistura;
14. Assume-se gás perfeito.

CAPÍTULO 3

MODELAGEM DA TRANSFÊRENCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO

Discutem-se, neste capítulo, os princípios físicos, os modelos de gases participantes e os métodos de solução empregados em problemas de radiação. Em seguida desenvolve-se a formulação do método das zonas, associado ao modelo de soma ponderada de gases cinzas, para cálculo da transferência de energia radiante, incluindo as expressões para determinação das áreas de troca direta para zonas contidas no interior de cavidades cilíndricas.

3.1 Radiação em Superfícies

A radiação térmica caracteriza-se pela não necessidade de um meio material para sua propagação [Siegel e Howell, 2002]. O transporte da energia radiante pode ser explicado tanto pelas ondas eletromagnéticas quanto pelos fótons, embora, isoladamente, nenhuma dessas teorias expliquem completamente o fenômeno. De acordo com a teoria eletromagnética, os comprimentos de onda de radiação térmica estão compreendidos entre 0,1 e 100 μm . Nesta fração do espectro de radiação eletromagnética está incluída uma pequena fração da região ultravioleta (0,1 até 0,4 μm), além de todo o espectro visível (0,4 até 0,7 μm) e infravermelho (0,7 até 100 μm) [Incropera e DeWitt, 2002].

A radiação térmica emitida por uma superfície distribui-se sobre uma faixa de comprimentos de onda, λ . A magnitude desta radiação se apresenta de forma variável em função do comprimento de onda, e desta forma, o termo espectral é usado para indicar esta dependência. A radiação emitida é formada por uma distribuição contínua e não-uniforme de componentes espectrais, ou seja, com um único comprimento de onda. Além disso, tanto a magnitude da radiação em qualquer comprimento de onda, quanto a distribuição espectral, variam de acordo com a natureza e a temperatura da superfície que emite a radiação.

A natureza espectral da radiação é uma das duas características que complicam a sua descrição. Muitas vezes, para que se possa pelo menos inicialmente resolver um determinado problema, faz-se o uso da idealização de corpo negro, que é aquele capaz de absorver toda a energia radiante incidente em todos os comprimentos de onda e todas as direções. Uma outra idealização, mais realística que a de corpo negro, é a de superfície cinza, que pode ser definida como sendo uma superfície para a qual os valores da absortividade espectral, α_λ , e da emissividade espectral ε_λ são independentes do comprimento de onda ao longo das regiões espectrais da irradiação e da emissão. Pode-se definir absortividade e emissividade como sendo razão entre a radiação absorvida ou emitida pela superfície e a radiação absorvida ou emitida por um corpo negro na mesma temperatura.

A segunda característica está relacionada à sua direcionalidade, ou seja, uma superfície pode emitir preferencialmente em certas direções, criando uma distribuição direcional da radiação emitida ou refletida. Uma aproximação muito comum é assumir que a superfície seja difusa, ou melhor, a radiação emitida ou refletida independe da direção.

3.1.1 Intensidade de Radiação

A radiação emitida por uma superfície se propaga em todas as direções possíveis, e freqüentemente se está interessado na sua distribuição direcional. Também a radiação que incide sobre uma superfície pode vir de diferentes direções, e a maneira pela qual a superfície responde a essa radiação depende da direção. Tais efeitos direcionais podem ser tratados pela introdução do conceito de intensidade de radiação, i . A Figura 3.1 apresenta um elemento diferencial de área dA , do qual sai a taxa de energia radiante d^3Q dentro do intervalo diferencial de comprimento de onda $d\lambda$, que contém λ (espectral), no interior do ângulo sólido $d\omega$, que é definido como

$$d\omega = \frac{dA_n}{r^2} = \frac{r^2 \sin\beta d\beta d\gamma}{r^2} = \sin\beta d\beta d\gamma \quad (3.1)$$

onde dA_n é a superfície diferencial projetada no espaço a partir de dA ; β e γ são os ângulos de zênite e azimutal respectivamente, em um sistema de coordenadas esféricas. Na simbologia usada a seguir os superíndices nos termos diferenciais representam a quantidade de dependências da respectiva diferencial. Por exemplo, para a taxa de energia radiante espectral direcional, d^3Q , o índice 3 representa a dependência com relação ao intervalo de

comprimento de onda $d\lambda$, ao ângulo sólido $d\omega$ e ao elemento infinitesimal de área dA . Esta mesma notação será apresentada para o restante deste capítulo.

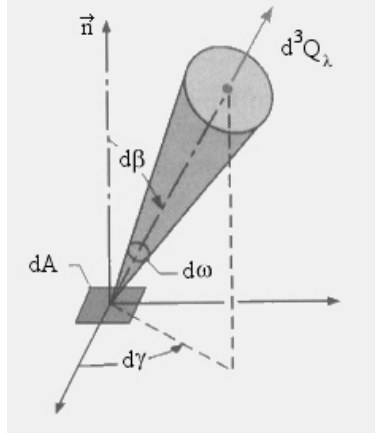


Figura 3.1 – Energia radiante abandonando o elemento de área dA .

A taxa de energia radiante espectral direcional, ou espectral por unidade de ângulo sólido $d\omega$ é obtida como

$$d^3Q_\lambda = i_\lambda dA \cos \beta d\omega d\lambda \quad (3.2)$$

onde i_λ é intensidade de radiação espectral por unidade de ângulo sólido $d\omega$.

Integrando d^3Q_λ em todo o espectro, obtém-se a parcela da energia radiante total direcional d^2Q . Deste modo

$$d^2Q = \int_\lambda d^3Q_\lambda \quad (3.3)$$

sendo

$$i = \int_\lambda i_\lambda d\lambda \quad (3.4)$$

onde i é intensidade de radiação total por unidade de ângulo sólido $d\omega$.

A taxa de energia total hemisférica que abandona o elemento de área dA , dQ , é obtida pela integração de d^2Q em todos os ângulos sólidos contidos no hemisfério $\cap$, como indicado pela Figura 3.2. Sendo assim, fazendo o uso da Equação (3.1),

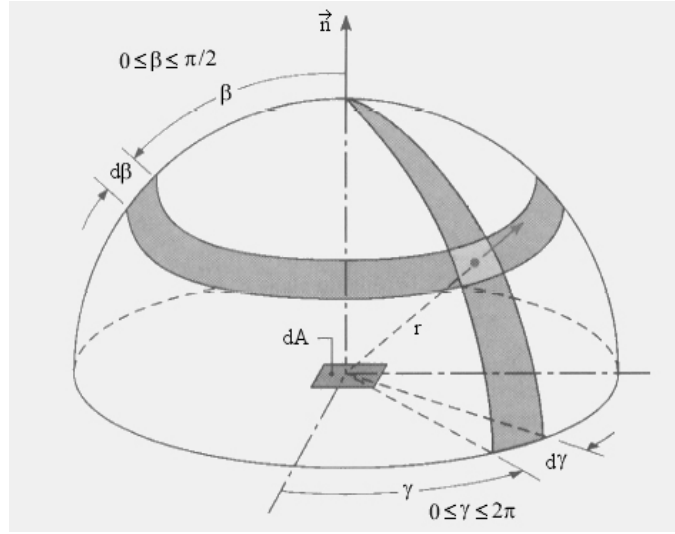


Figura 3.2 – Integração para a intensidade de radiação no hemisfério.

$$dQ = \int_{\Omega} d^2Q d\Omega = \int_{\beta=0}^{\pi/2} \int_{\gamma=0}^{2\pi} i dA \cos \beta \sin \beta d\beta d\gamma \quad (3.5)$$

Para as superfícies difusas, nas quais a intensidade total de radiação não depende da direção, dQ torna-se:

$$dQ = \pi i dA \quad (3.6)$$

3.1.2 Corpo Negro

Na solução de problemas que envolvem radiação térmica, uma das mais importantes idealizações utilizadas é a de superfície negra. Embora ela seja uma idealização das superfícies reais, a superfície negra, ou corpo negro serve como elemento de referência para avaliação do comportamento radiante de corpos reais.

O poder emissivo quantifica a radiação que é emitida por unidade de área superficial dA . Desse modo, o poder emissivo espectral hemisférico de corpo negro, $e_{\lambda,b}$, é dado por

$$e_{\lambda,b} = \frac{d^2Q_{\lambda,b}}{dAd\lambda} \quad (3.7)$$

sendo $d^2Q_{\lambda,b}$ a taxa de energia espectral hemisférica emitida por uma superfície negra de área dA . Por meio da Mecânica Quântica, demonstra-se que $e_{\lambda,b}$ depende da temperatura

do corpo negro e do índice de refração do meio com que faz contacto. O poder emissivo total hemisférico de corpo negro, e_b , é obtido da integração de $e_{\lambda,b}$ em todo o espectro, e corresponde a toda energia radiante emitida pelo corpo negro, por unidade de área e de tempo. A partir de resultados tanto teóricos da Mecânica Quântica quanto experimentais, é demonstrado que [Siegel e Howell, 2002; Incropera e DeWitt, 2002]

$$e_b = n^2 \sigma T^4 \quad (3.8)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzman, T a temperatura do corpo negro e n é o índice de refração do meio, admitido independente da frequência de radiação. A Equação (3.8) é conhecida como Lei de Stefan-Boltzman. Para $n = 1$, a taxa de energia emitida por dA é

$$dQ_b = \int_{\lambda} d^2 Q_{\lambda,b} = \int_{\lambda} e_{\lambda,b} dA d\lambda = dA \int_{\lambda} e_{\lambda,b} d\lambda = dA e_b = dA \sigma T^4 \quad (3.9)$$

Outra propriedade importante do corpo negro é que sua intensidade de radiação não depende da direção de emissão, sendo um dos resultados das Leis de Kirchhoff [Siegel e Howell, 2002]. Assim a superfície do corpo negro é difusa. Das Equações (3.6) e (3.7), obtém-se que

$$e_{\lambda,b} = \pi i_{\lambda,b} \quad (3.10)$$

sendo $i_{\lambda,b}$ a intensidade de radiação espectral hemisférica do corpo negro.

3.1.3 Superfícies Reais

Em geral a radiação das superfícies encontradas na natureza possuem comportamento espectral diferente da apresentada pelo corpo negro. Na determinação da transferência de energia radiante nessas superfícies, é comum a utilização de coeficientes que relacionam o comportamento radiante dessas superfícies, emissão e absorção, com o do corpo negro.

Numa superfície de área A , que recebe a taxa de energia espectral hemisférica $dQ_{\lambda,i}$, admitida uniformemente distribuída na área e perfeitamente difusa, a intensidade de radiação é constante em todas as direções. A absortividade espectral hemisférica, α_{λ} , é a razão entre

a parcela da energia absorvida pela superfície, $dQ_{\lambda,i,a}$, e a incidente,

$$\alpha_\lambda = \frac{dQ_{\lambda,i,a}}{dQ_{\lambda,i}} \quad (3.11)$$

Um outro conceito bastante importante, que está relacionado com a energia que incide sobre uma superfície, é a irradiação. A irradiação espectral hemisférica, dG_λ , é definida como

$$dG_\lambda = \frac{dQ_{\lambda,i}}{A} \quad (3.12)$$

O restante da energia incidente, ou seja, a que não é absorvida, é totalmente refletida, uma vez que o fenômeno de refração é insignificante em corpos sólidos opacos. Desse modo a taxa de energia refletida em um determinado comprimento de onda λ , $dQ_{\lambda,i,r}$, é

$$dQ_{\lambda,i,r} = dQ_{\lambda,i} - dQ_{\lambda,i,a} = (1 - \alpha_\lambda)dQ_{\lambda,i} = (1 - \alpha_\lambda)AdG_\lambda \quad (3.13)$$

Quando se leva em conta a radiação em todos os comprimentos de onda, ou seja a radiação total que incide na superfície de área A , Q_i , define-se a absortividade total hemisférica, α , como

$$\alpha = \frac{Q_a}{Q_i} = \frac{\int_\lambda dQ_{\lambda,i,a}}{\int_\lambda dQ_{\lambda,i}} \quad (3.14)$$

sendo Q_a a taxa total hemisférica de energia absorvida pela superfície de área A . A irradiação total hemisférica G que incide sobre a área A , é obtida com a integração da Equação (3.12) em todo o espectro. Da mesma forma a taxa total hemisférica de energia refletida pela superfície de área finita A , Q_r , é também obtida com a integração de $dQ_{\lambda,i,r}$ (Equação (3.13)) em todos os comprimentos de onda λ .

A emissão de energia pela superfície de área A é também analisada pela comparação com a emissão de corpo negro. A emissividade espectral hemisférica ε_λ é calculada como

$$\varepsilon_\lambda = \frac{dQ_{\lambda,e}}{dQ_{\lambda,b}} \quad (3.15)$$

em que $dQ_{\lambda,e}$ e $dQ_{\lambda,b}$ correspondem, respectivamente, às taxas de energias espectrais hemisféricas emitidas pela superfície de área A e pelo corpo negro à temperatura de A . De acordo

com a Equação (3.7),

$$dQ_{\lambda,e} = \varepsilon_{\lambda} e_{\lambda,b} A d\lambda \quad (3.16)$$

A integração de $dQ_{\lambda,e}$ e $dQ_{\lambda,b}$ em todos os comprimentos de onda fornece, respectivamente, a taxa total hemisférica de energia emitida por A , Q_e , e a taxa total hemisférica de energia que seria emitida pelo corpo negro à temperatura de A , Q_b . A emissividade total hemisférica, ε , é calculada a partir da razão entre esses dois valores. Deste modo

$$\varepsilon = \frac{Q_e}{Q_b} = \frac{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,e}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,b}} \quad (3.17)$$

A radiosidade espectral hemisférica dB_{λ} é a taxa de energia espectral hemisférica, por unidade de área, que deixa a superfície de área A , levando em conta tanto a emissão quanto a reflexão. Das Equações (3.13) e (3.16), obtém-se:

$$dB_{\lambda} = \frac{dQ_{\lambda,e} + dQ_{\lambda,i,r}}{A} = \varepsilon_{\lambda} e_{\lambda,b} d\lambda + (1 - \alpha_{\lambda}) G_{\lambda} \quad (3.18)$$

A radiosidade total hemisférica, B , é obtida pela integração de dB_{λ} em todos os comprimentos de onda λ .

A taxa de energia espectral hemisférica trocada pela superfície de área A , dQ_{λ} , é dada por

$$dQ_{\lambda} = dQ_{\lambda,e} + dQ_{\lambda,i,r} - dQ_{\lambda,i} = A(dB_{\lambda} - dG_{\lambda}) \quad (3.19)$$

sendo a taxa total hemisférica de energia trocada pela superfície de área A , dQ , também obtida da integração de dQ_{λ} (Equação (3.19)) em todo o espectro.

Superfícies nas quais a emissividade e a absortividade espectrais hemisféricas não dependem do comprimento de onda são chamadas superfícies cinzas. Dessa forma, de acordo com as Equações (3.17), (3.15), (3.14) e (3.11), obtêm-se

$$\varepsilon = \frac{Q_e}{Q_b} = \frac{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,e}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,b}} = \frac{\int_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} dQ_{\lambda,b}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,b}} = \varepsilon_{\lambda} \frac{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,b}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,b}} = \varepsilon_{\lambda} \quad (3.20)$$

e

$$\alpha = \frac{Q_a}{Q_i} = \frac{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,i,a}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,i}} = \frac{\int_{\lambda} \alpha_{\lambda} dQ_{\lambda,i}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,i}} = \alpha_{\lambda} \frac{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,i}}{\int_{\lambda} dQ_{\lambda,i}} = \alpha_{\lambda} \quad (3.21)$$

Uma consequência das Leis de Kirchhoff é que ε_λ e α_λ são iguais quando a radiação espectral hemisférica incidente, $dQ_{\lambda,i}$, e a emissão espectral hemisférica, $dQ_{\lambda,e}$, são perfeitamente difusas [Özişik, 1985; Siegel e Howell, 2002; Incropera e DeWitt, 2002]. Nesse caso, para superfícies cinzas, resulta:

$$\varepsilon = \alpha \quad (3.22)$$

Geralmente α_λ e ε_λ variam significativamente com o comprimento de onda em superfícies reais. Entretanto essas superfícies podem apresentar comportamento de corpo cinza, ou seja, $\varepsilon = \alpha$, desde que α_λ e ε_λ variem pouco dentro da faixa do espectro em que a emissão e a irradiação, respectivamente, são significativas [Incropera e DeWitt, 2002].

3.2 Radiação em Meios Participantes

Os meios participantes absorvem, emitem e espalham energia radiante. São exemplos de meios participantes gases polares como o monóxido e o dióxido de carbono, o metano e o vapor de água. O ar e os gases monoatômicos, ou apolares são transparentes à radiação térmica. Para os gases, a questão é mais complicada pelo fato de que, ao contrário da radiação a partir de um sólido ou de um líquido, que é distribuída continuamente em função do comprimento de onda, a radiação dos gases é emitida em intervalos de comprimento de onda específicos, conhecidos por bandas [Siegel e Howell, 2002]. Além disso a radiação em gases não é um fenômeno de superfície como assumido anteriormente no caso do elemento de área A , mas um fenômeno volumétrico.

3.2.1 Mecanismos Físicos de Absorção e Emissão

As propriedades radiantes de sólidos opacos variam mais suavemente com o comprimento de onda do que as dos gases. As Figuras 3.3 e 3.4 mostram essa tendência para a emitância espectral hemisférica do tungstênio e absorptância espectral hemisférica do dióxido de carbono.

As irregularidades decorrem dos vários tipos de transição de energia que ocorrem nos gases, compostos de moléculas, átomos, íons e elétrons livres, cada qual com níveis diferentes de energia [Siegel e Howell, 2002]. Sob o ponto de vista atômico, o processo de radiação

pode ser entendido através do conceito de fóton, a unidade básica de radiação. Emissão e absorção ocorrem quando fótons são liberados e capturados, respectivamente, provocando transições de energia. Além desses dois processos, é possível que parte da energia do fóton seja transferida devido ao espalhamento inelástico, processo sem importância em problemas usuais de engenharia.

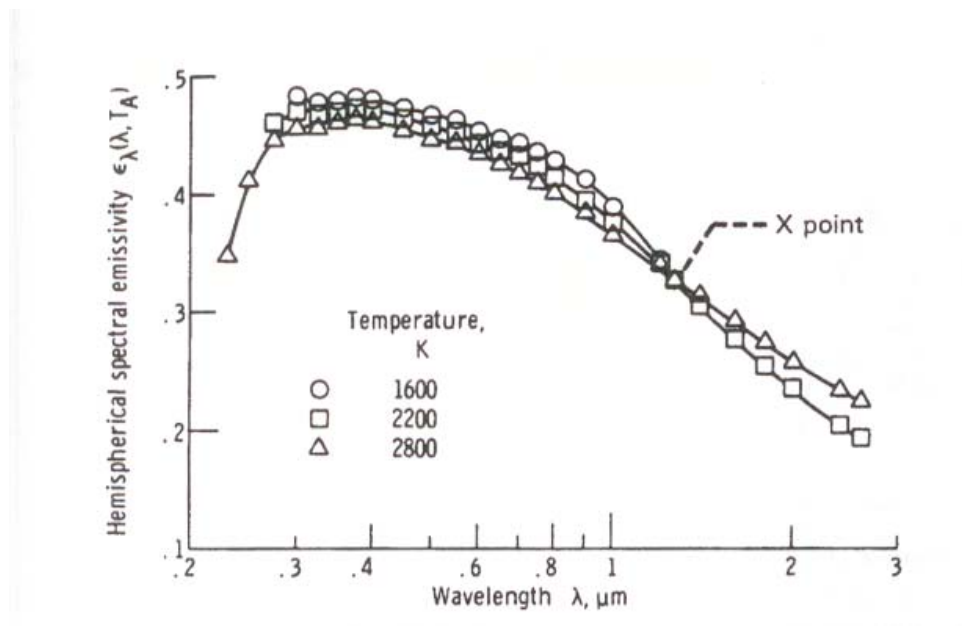


Figura 3.3 – Efeito do comprimento de onda na emitância espectral hemisférica do tungstênio [Siegel e Howell, 2002].

Três tipos de transição podem ocorrer : *bound-bound*, *bound-free* e *free-free*. No primeiro caso, o fóton é absorvido ou emitido por um átomo ou molécula e não se verifica recombinação de íons e elétrons, mas salto quântico de energia de um estado de vibração, rotação ou eletrônico para outro. Uma vez que essas variações de energia ocorrem aos saltos, os coeficientes de absorção e emissão são funções que variam abruptamente com o comprimento de onda. A absorção resultante da transição *bound-free* ocorre quando o átomo absorve energia suficiente para causar ionização, de modo que o íon e o elétron ficam livres para assumir qualquer energia cinética. Do contrário, quando o elétron e o íon se combinam, ocorre emissão *free-bound*. Nesses dois últimos casos, não há saltos quânticos de energia e os coeficientes de absorção e emissão variam continuamente no espectro. Por fim, a transição *free-free* é observada quando um elétron interage eletricamente com um íon,

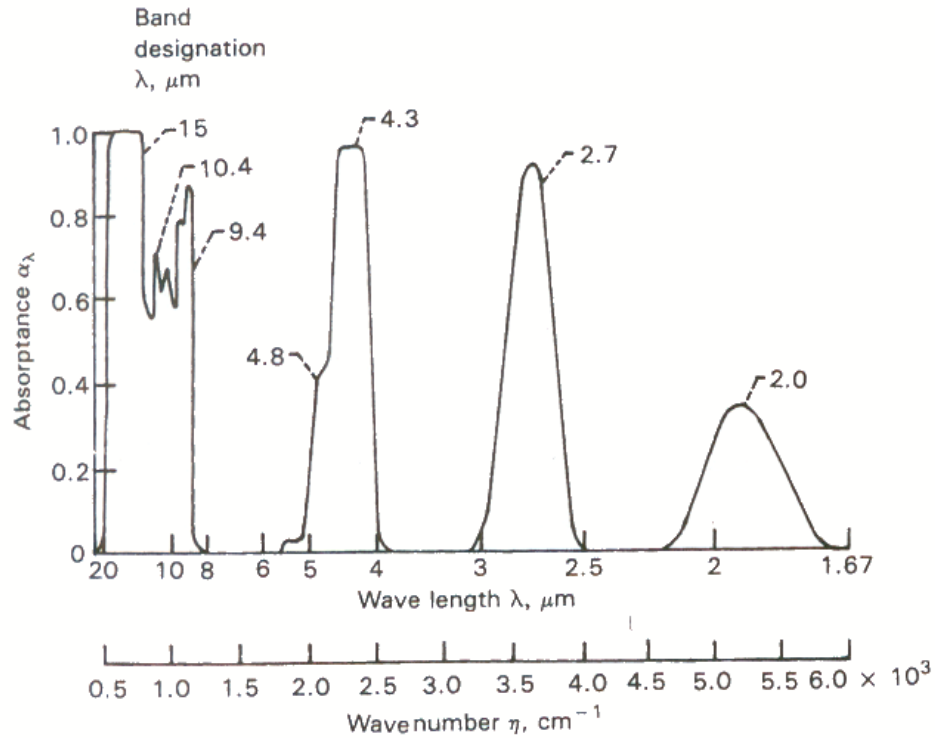


Figura 3.4 – Efeito do comprimento de onda na absorptância espectral direcional do dióxido de carbono [Siegel e Howell, 2002].

liberando ou capturando o fóton. Também nesse caso, os coeficientes variam suavemente com o comprimento de onda [Siegel e Howell, 2002].

A radiação em problemas de engenharia geralmente envolve gases que participam com transições nos estados de vibração ou rotação (*bound-bound*) e que, desse modo, têm coeficientes de absorção que variam bruscamente com o comprimento de onda [Siegel e Howell, 2002].

3.2.2 Coeficiente de Extinção $K(\lambda, T, p)$

Na área diferencial dA da Figura 3.5, contida em gás participante, incide a taxa de energia radiante espectral d^3Q_λ , dentro do ângulo sólido $d\omega$. A intensidade de radiação i_λ é a energia radiante incidente nessa área por unidade de tempo, ângulo sólido e área projetada na direção normal a i_λ . Desse modo

$$i_\lambda = \frac{d^3Q_\lambda}{dA \cos \beta d\omega d\lambda} \quad (3.23)$$

onde β é o ângulo entre a normal da área e a direção do ângulo sólido. A intensidade de radiação mantém-se constante quando não há atenuação ou emissão no meio [Siegel e Howell, 2002].

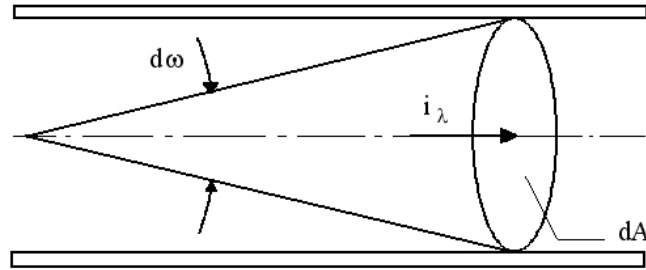
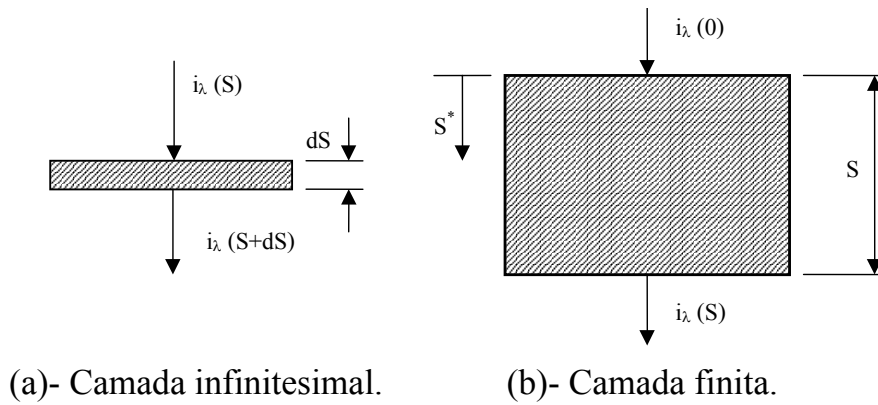


Figura 3.5 – Geometria para definição de intensidade de radiação em meio participante.

A Figura 3.6-a mostra a intensidade de radiação espectral i_λ atravessando uma placa de espessura dS de um meio que absorve radiação térmica. Essa camada de gás é mantida



(a)- Camada infinitesimal.

(b)- Camada finita.

Figura 3.6 – Incidência de intensidade de radiação.

em baixa temperatura para que sua emissão possa ser desprezada. Experimentos mostram que nestas condições a redução na intensidade é proporcional ao produto de i_λ por dS , sendo a constante de proporcionalidade dada pelo coeficiente espectral de extinção K_λ . Deste modo

$$di_\lambda = -K_\lambda i_\lambda dS \quad (3.24)$$

onde K_λ depende do comprimento de onda λ , da temperatura, da pressão e da composição

do gás ou mistura de gases. Quando a intensidade de radiação atravessa uma camada finita, Figura 3.6-b, a Equação (3.24) é integrada ao longo da trajetória percorrida,

$$i_\lambda(S) = i_\lambda(0)e^{\left[-\int_0^S K_\lambda(S^*)dS^*\right]} \quad (3.25)$$

onde $i_\lambda(0)$ e $i_\lambda(S)$ são as intensidades de radiação espectrais nas extremidades inicial e final da trajetória, e S^* é a trajetória percorrida pela radiação. A Equação (3.25), conhecida como Lei de Bouguer [Siegel e Howell, 2002], mostra que a intensidade de radiação é atenuada exponencialmente ao longo do caminho considerado.

O coeficiente de extinção K_λ é composto pelos coeficientes de absorção, a_λ , e de espalhamento, σ_λ ,

$$K_\lambda = a_\lambda + \sigma_\lambda \quad (3.26)$$

Em problemas de combustão de combustíveis gasosos onde a presença de particulados nos gases de combustão é muito pequena, pode-se desprezar σ_λ . Portanto, neste trabalho, não é considerada a existência de espalhamento, de modo que $K_\lambda = a_\lambda$. O coeficiente de absorção espectral depende da temperatura e pressão do gás e apresenta forte variação com o comprimento de onda, como visto na Figura 3.4.

A Lei de Bouguer pode ser escrita simplificadamente por meio da grandeza adimensional k_λ , chamada de espessura óptica espectral, ou opacidade espectral. Desse modo

$$k_\lambda(S) = \int_0^S K_\lambda dS^* = \int_0^S a_\lambda dS^* \quad (3.27)$$

Assim a Equação (3.25) fica:

$$i_\lambda(S) = i_\lambda(0)e^{[-k_\lambda(S)]} \quad (3.28)$$

A espessura óptica espectral k_λ depende da temperatura, da pressão e da composição do meio ao longo da trajetória de integração, sendo uma medida da capacidade do meio de atenuar energia radiante no comprimento de onda λ [Siegel e Howell, 2002; Özişik, 1985]. Quanto maior esta espessura óptica, maior será a atenuação. Quando o coeficiente de absorção espectral a_λ é constante ao longo da trajetória de integração, a espessura óptica

espectral se reduz a

$$k_\lambda(S) = a_\lambda S \quad (3.29)$$

3.2.3 Emissão de Energia Radiante em Meio Participante

Na solução da equação da energia no gás, é necessário o balanço de energia radiante em cada volume infinitesimal do meio. Esse balanço aparece na forma da divergência do fluxo de energia radiante que atravessa as fronteiras desse volume, igual a $\vec{\nabla} q_R$. Fisicamente esse termo corresponde à taxa de energia radiante perdida por unidade de volume, e pode ser adicionada na forma de um termo fonte, tal como o $\overline{S_{rad}}$ na equação de conservação de energia (Equações (2.162) e (2.164)), já apresentadas no Capítulo 2.

Assumindo que o volume cilíndrico infinitesimal do meio participante $d\mathcal{V}$, apresentado da Figura 3.7, está emitindo energia por radiação na direção da superfície negra de área dA , obtém-se:

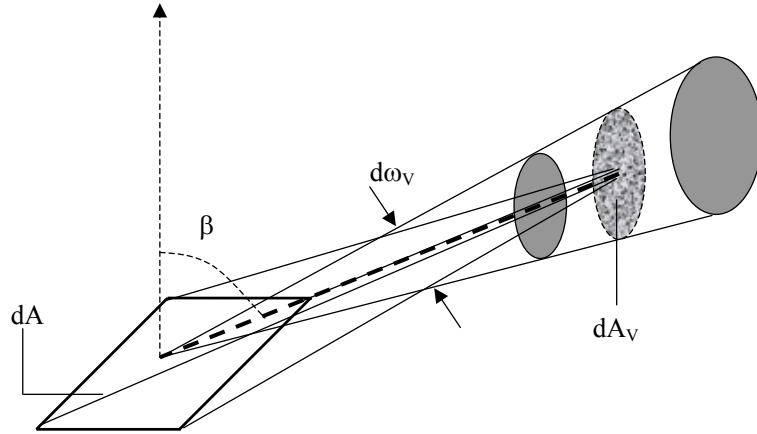


Figura 3.7 – Volume cilíndrico de um meio participante emitindo energia por radiação para uma superfície.

$$d^4 Q_{\lambda,e} = -di_{\lambda,b} dA_V d\omega_V d\lambda = -di_{\lambda,b} dA_V \frac{dA \cos \beta}{S^2} d\lambda \quad (3.30)$$

onde $di_{\lambda,b}$ é a variação da intensidade de radiação emitida por $d\mathcal{V}$ na direção de dA , dA_V é o elemento infinitesimal de área transversal do volume $\mathcal{V}$, e $d\omega_V$ é a variação do ângulo sólido entre $\mathcal{V}$ e dA . O produto de dS por dA_V resulta em $d\mathcal{V}$.

De acordo com as Equações (3.24) e (3.29) pode-se reescrever a Equação (3.30) da seguinte forma:

$$d^4Q_{\lambda,e} = i_{\lambda,b}a_{\lambda}dSdA_{\mathcal{V}}d\omega_{\mathcal{V}}d\lambda = i_{\lambda,b}a_{\lambda}d\mathcal{V}d\omega_{\mathcal{V}}d\lambda \quad (3.31)$$

A integração de $d^4Q_{\lambda,e}$ em todos os ângulos sólidos $d\omega$ resulta em

$$d^3Q_{\lambda,e} = \int_{\omega=0}^{4\pi} d^4Q_{\lambda,e}d\omega = i_{\lambda,b}a_{\lambda}d\lambda d\mathcal{V} \int_{\omega=0}^{4\pi} d\omega = 4\pi i_{\lambda,b}a_{\lambda}d\lambda d\mathcal{V} \quad (3.32)$$

De acordo com a Equação (3.10)

$$d^3Q_{\lambda,e} = 4e_{\lambda,b}a_{\lambda}d\lambda d\mathcal{V} \quad (3.33)$$

sendo $e_{\lambda,b}$ o poder emissivo espectral de corpo negro à temperatura de $d\mathcal{V}$.

Embora o valor de $d^3Q_{\lambda,e}$ tenha sido obtido para essa condição particular, a emissão do elemento $d\mathcal{V}$ é independente do meio vizinho e a expressão acima tem validade geral [Siegel e Howell, 2002]. Quando a intensidade de radiação emitida pelo volume $d\mathcal{V}$ é igual em todas as direções, a taxa de energia emitida dentro de um ângulo sólido $d\omega$ corresponde a

$$d^4Q_{\lambda,e} = d^3Q_{\lambda,e} \frac{d\omega}{4\pi} = i_{\lambda,b}a_{\lambda}d\lambda d\omega d\mathcal{V} \quad (3.34)$$

3.2.4 Equação de Transferência Radiante

Considera-se um volume cilíndrico de meio participante de comprimento S conforme o da Figura 3.8. Como já discutido na Seção 3.2.2, assume-se desprezível o espalhamento da radiação térmica. Em um dado volume de controle $d\mathcal{V}$ a intensidade espectral de radiação térmica é reduzida pela absorção e incrementada pela emissão. Desse modo

$$\frac{di_{\lambda}}{dS^*} = -a_{\lambda}(\lambda, S^*) i_{\lambda}(\lambda, S^*) + a_{\lambda}(\lambda, S^*) i_{\lambda,b}(\lambda, S^*) \quad (3.35)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação representa a absorção e o segundo a emissão do meio participante.

Supondo um volume cilíndrico de gás com temperatura, pressão e composição uni-

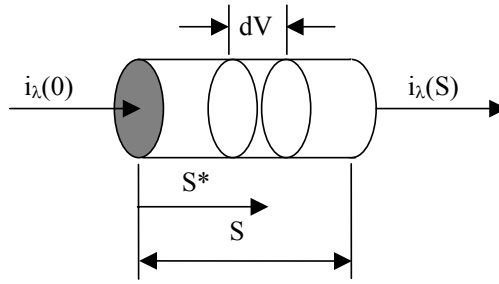


Figura 3.8 – Emissão de energia radiante num volume de controle de gás.

formes, conforme mostra a Figura 3.8, onde o coeficiente de absorção espectral do gás, a_λ , e a intensidade de radiação espectral de corpo negro, $i_{\lambda,b}$, são constantes neste volume, a Equação (3.35) pode ser integrada de $S^* = 0$ a S , iniciando de $i_\lambda(0)$ em $S^* = 0$, resultando em

$$i_\lambda(\lambda, S) = i_\lambda(\lambda, 0) e^{-a_\lambda(\lambda)S} + i_{\lambda,b}(\lambda) [1 - e^{-a_\lambda(\lambda)S}] \quad (3.36)$$

onde o termo $e^{-a_\lambda(\lambda)S}$ representa a transmitância espectral, ou fração transmitida ($\tau_\lambda(S)$) da intensidade de radiação espectral do início da trajetória, $i_\lambda(0)$. O termo $1 - e^{-a_\lambda(\lambda)S}$ representa a fração de $i_\lambda(0)$ que foi absorvida ao longo do caminho, ou a absorptância espectral, $\alpha_\lambda(S)$. Pela lei de Kirschhoff esta quantidade está presente na emissão espectral ao longo da trajetória, como mostrado pelo último termo do lado direito da Equação (3.36). Deste modo é possível rescrever a Equação (3.36) da seguinte forma

$$i_\lambda(\lambda, S) = i_\lambda(\lambda, 0)\tau_\lambda(\lambda, S) + i_{\lambda,b}(\lambda)\alpha_\lambda(\lambda, S) \quad (3.37)$$

onde $\alpha_\lambda(\lambda, S) = 1 - \tau_\lambda(\lambda, S)$.

Integrando $\alpha_\lambda(\lambda, S)$ em todos os comprimento de onda obtém-se a absorptância total ao longo de um determinado caminho S , para um dado volume de gás uniforme (temperatura, pressão e composição uniformes). Deste modo

$$\alpha_g(S) = \frac{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_\lambda(\lambda, 0)\alpha_\lambda(\lambda, S)d\lambda}{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_\lambda(\lambda, 0)d\lambda} = \frac{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_\lambda(\lambda, 0)[1 - e^{-a_\lambda(\lambda)S}]d\lambda}{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_\lambda(\lambda, 0)d\lambda} \quad (3.38)$$

De forma similar a emitância total de um gás uniforme, ao longo de um determinado caminho, é

$$\varepsilon_g(S) = \frac{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda,b}(\lambda) \alpha_{\lambda}(\lambda, S) d\lambda}{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda,b}(\lambda) d\lambda} = \frac{\pi \int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda}(\lambda) [1 - e^{-a_{\lambda}(\lambda)S}] d\lambda}{\sigma T^4} \quad (3.39)$$

onde T é a temperatura do gás. A transmitância total também é obtida da mesma forma

$$\tau_g(S) = \frac{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda}(\lambda, 0) \tau_{\lambda}(\lambda, S) d\lambda}{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda}(\lambda, 0) d\lambda} = \frac{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda}(\lambda, 0) [e^{-a_{\lambda}(\lambda)S}] d\lambda}{\int_{\lambda=0}^{\infty} i_{\lambda}(\lambda, 0) d\lambda} \quad (3.40)$$

Note que pela lei de Kirschhoff $\alpha_{\lambda}(S) = \varepsilon_{\lambda}(S)$, e sendo assim $\alpha_{\lambda}(S) = 1 - \tau_{\lambda}(S)$.

3.2.5 Transferência de Energia Radiante no Interior de Cavidades

(a) Balanço de Energia Radiante em Superfícies Difusas

A Figura 3.9 apresenta uma cavidade limitada por N superfícies e contendo um gás participante em seu interior. Nesta análise cada uma das superfícies é admitida isotérmica e assume-se que as energias radiantes emitida e refletida por elas, bem como a incidente, sejam difusas e uniformemente distribuídas em suas áreas. O gás, porém, não é necessariamente isotérmico.

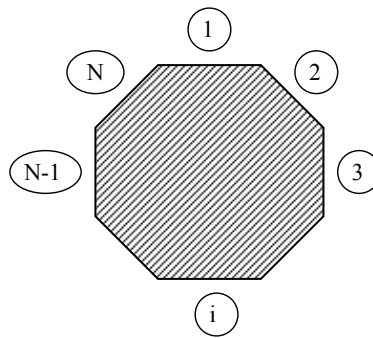


Figura 3.9 – Cavidade contendo um gás participante composta por N superfícies isotérmicas.

Conforme a Equação (3.19), a taxa de energia radiante hemisférica espectral, $d^2Q_{\lambda,k}$,

que uma superfície genérica k perde é

$$d^2Q_{\lambda,k} = dA_k(dB_{\lambda,k} - dG_{\lambda,k}) \quad (3.41)$$

onde $dB_{\lambda,k}$ e $dG_{\lambda,k}$ são, respectivamente, a radiosidade e a irradiação espectrais hemisférica na superfície k , sendo dA_k sua área. A Equação (3.18) fornece a relação entre $dB_{\lambda,k}$ e $dG_{\lambda,k}$. Deste modo

$$dB_{\lambda,k} = \varepsilon_{\lambda,k} e_{\lambda,b,k} d\lambda + (1 - \alpha_{\lambda,k}) dG_{\lambda,k} \quad (3.42)$$

A irradiação $dG_{\lambda,k}$ leva em consideração tanto a irradiação das superfícies quanto o efeito do gás participante. Na Figura 3.10 apresenta-se um par de superfícies j - k , separadas pelo gás. Na direção de S , sai da área dA_j a radiação de intensidade $i_{\lambda,j}$ que atravessa o meio contido no ângulo sólido $d\omega_k$ e atinge dA_k . A intensidade $i_{\lambda,j-k}$ que chega em dA_k é obtida pela soma da energia transmitida e da emitida ao longo da trajetória S . De acordo com a Equação (3.36) obtém-se

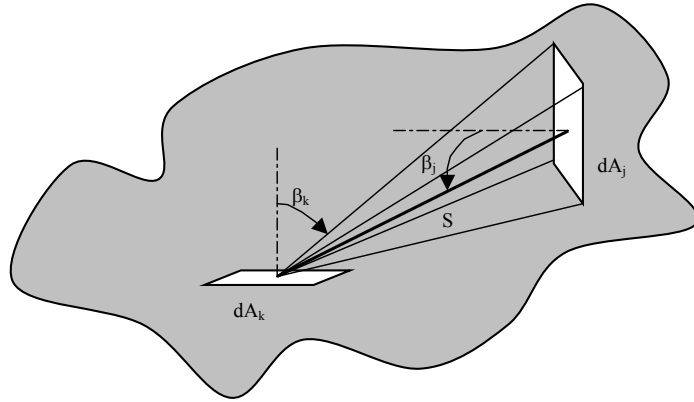


Figura 3.10 – Troca de energia radiante entre duas superfícies com meio participante entre elas.

$$i_{\lambda,j-k} = i_{\lambda,j} e^{(-k_\lambda)} + \int_0^{k_\lambda} i_{\lambda,b}(k_\lambda^*) e^{(k_\lambda - k_\lambda^*)} dk_\lambda^* \quad (3.43)$$

sendo k_λ a espessura óptica espectral hemisférica entre dA_j e dA_k . Na equação acima a primeira parcela contabiliza a energia radiante que sai de dA_j e é transmitida pelo gás até atingir dA_k ; a segunda fornece a energia radiante emitida pelo meio ao longo dessa trajetória

e que atinge dA_k .

Como a radiação que abandona cada superfície é assumida difusa, tem-se que $i_{\lambda,j} = dB_{\lambda,j}/(\pi d\lambda)$, como pode ser deduzido da Equação (3.6). O termo $i_{\lambda,b}(k_\lambda^*)$ representa a intensidade de radiação de corpo negro à temperatura do ponto do gás correspondente à espessura óptica (k_λ^*) e é igual a $e_{\lambda,b}(k_\lambda^*)/\pi$, conforme Equação (3.10). A taxa de energia radiante espectral hemisférica que chega em dA_k , $d^3Q_{\lambda,i,j-k}$, provém da definição de intensidade de radiação espectral hemisférica, Equação (3.6). Sendo assim

$$d^3Q_{\lambda,i,j-k} = i_{\lambda,j-k} d\omega \cos \beta_k dA_k d\lambda \quad (3.44)$$

De acordo com a Equação (3.1), o ângulo sólido $d\omega$ é igual a $dA_j \cos \beta_j / S^2$. Substituindo essas informações na Equação (3.44) obtém-se

$$d^3Q_{\lambda,i,j-k} = \left(\frac{dB_{\lambda,j}}{\pi} e^{(-k_\lambda)} + \int_0^{k_\lambda} \frac{e_{\lambda,b}(k_\lambda^*)}{\pi} e^{(-k_\lambda + k_\lambda^*)} dk_\lambda^* \right) \frac{\cos \beta_j \cos \beta_k}{S^2} dA_j dA_k \quad (3.45)$$

Integrando a Equação (3.45) nas áreas dA_j e dA_k :

$$d^2Q_{\lambda,i,j-k} = \int_{dA_j} \int_{dA_k} d^3Q_{\lambda,i,j-k} \quad (3.46)$$

Da definição de irradiação espectral hemisférica, Equação (3.12),

$$dG_{\lambda,j-k} = \frac{d^2Q_{\lambda,i,j-k}}{dA_k} = \frac{1}{dA_k} \int_{dA_j} \int_{dA_k} d^3Q_{\lambda,i,j-k} \quad (3.47)$$

A irradiação espectral hemisférica total que chega em k deve levar em conta todas as outras superfícies. Sendo assim

$$dG_{\lambda,k} = \sum_{j=1}^N dG_{\lambda,j-k} \quad (3.48)$$

A irradiação hemisférica total em k , G_k , é obtida pela integração de $dG_{\lambda,k}$ em todos os comprimentos de onda λ . Deste modo

$$G_k = \int_{\lambda} dG_{\lambda,k} \quad (3.49)$$

Conhecida a distribuição de temperatura do gás, a solução do problema exige o conhecimento da temperatura ou da taxa de energia radiante espectral em cada superfície. Em geral, o campo de temperatura do gás é desconhecido e é necessário o balanço de energia radiante no gás. Assim, os problemas contêm os outros modos de transferência de calor, condução e advecção, e é necessário o balanço global de energia no gás e nas superfícies envolventes.

(b) Balanço de Energia Radiante no Gás

De modo análogo ao utilizado na obtenção da equação (3.34), pode-se demonstrar que a energia absorvida por esse volume é

$$d^3Q_{\lambda,i,a} = \int_{\omega=0}^{4\pi} a_{\lambda} i_{\lambda} d\lambda d\mathcal{V} d\omega = a_{\lambda} d\lambda d\mathcal{V} \int_{\omega=0}^{4\pi} i_{\lambda} d\omega \quad (3.50)$$

sendo i_{λ} a intensidade de radiação espectral incidente em $d\mathcal{V}$ dentro do ângulo sólido $d\omega$.

A taxa de energia espectral hemisférica perdida por $d\mathcal{V}$ por unidade de volume, dq_{λ} , é

$$dq_{\lambda} = d^3Q_{\lambda,e} - d^3Q_{\lambda,i,a} \quad (3.51)$$

ou, de acordo com as Equações (3.33) e (3.50),

$$dq_{\lambda} = 4e_{\lambda,b} a_{\lambda} d\lambda d\mathcal{V} - a_{\lambda} d\lambda d\mathcal{V} \int_{\omega=0}^{4\pi} i_{\lambda} d\omega \quad (3.52)$$

A taxa hemisférica total de energia perdida, por unidade de volume, deve levar em conta todos os comprimentos de onda. Desse modo

$$\vec{\nabla} q_R = \int_{\lambda=0}^{+\infty} dq_{\lambda} d\lambda \quad (3.53)$$

3.2.6 Análise da Formulação de Cálculo

Embora o procedimento descrito acima seja completo e consistente, sua aplicação em problemas reais é difícil. Em primeiro lugar, o campo de temperaturas no gás dificilmente é conhecido de forma explícita e a utilização da Equação (3.53) é dificultada por duas razões: a intensidade média em cada ponto é desconhecida e a avaliação da emissão depende

das temperaturas, tornando o processo iterativo, e a outra razão é que as propriedades radiantes do gás dependem de suas condições térmicas, que não são conhecidas. Além disso o balanço total de energia requer a integração das equações espectrais, que são dificultadas pelo comportamento descontínuo das propriedades espectrais.

Desse modo simplificações são feitas tanto na descrição das propriedades dos gases quanto na formulação do processo. São comuns soluções que admitem o gás como cinza, ou seja, suas propriedades radiantes não variam no espectro. Em outros problemas, sua temperatura pode ser assumida constante, permitindo o uso de tabelas apropriadas à transferência radiante em cavidades de diferentes geometrias. De qualquer forma, a formulação desenvolvida é valiosa, pois é fundamental para a escolha do método de solução.

3.3 Modelos de Gases Participantes

A absorção e a emissão de energia radiante estão associadas às transições entre os níveis de energia dos átomos e das moléculas constituintes do gás [Siegel e Howell, 2002]. Explica-se com isso o comportamento irregular de suas propriedades espectrais e o fato da emissão e da absorção serem significativas apenas em certas regiões do comprimento de onda, principalmente em temperaturas abaixo de 1000 K . Esse comportamento introduz dificuldades na integração das equações espectrais em todos os comprimentos de onda para o cálculo da energia radiante a ser inserida na equação global da energia. Seguem as abordagens adotadas para a descrição do comportamento dos gases participantes.

3.3.1 Gás Cinza

Nesse modelo o coeficiente de extinção do gás (ou o coeficiente de absorção, quando não ocorre espalhamento) é considerado independente do comprimento de onda. De acordo com as características das propriedades espectrais dos gases, é evidente que eles estão distantes desse modelo. Entretanto há algumas situações em que os gases podem ser considerados cinzas sobre trechos do espectro. Em outros casos, quando há presença de partículas de fuligem ou outro material no meio para melhorar sua emissão e absorção, o comportamento da mistura pode aproximar-se daquele de gás cinza. Além disso gases cinzas são considerados por permitirem o entendimento de muitas das características do processo de radiação térmica, sem as complicações que os efeitos espectrais podem trazer. Por isso esses gases são

de interesse prático e teórico, e recebem atenção constante da literatura ainda hoje.

3.3.2 Bandas de Absorção

Nesse caso o espectro de radiação é discretizado em intervalos finitos de comprimento de onda, denominados bandas. Fora de cada uma delas, o coeficiente de absorção possui valor nulo. O objetivo desse modelo consiste em determinar a emitância e absorptância totais de cada banda, de modo que a integração das equações espectrais simplifica-se em um somatório dos efeitos de cada banda. Dependendo do modo como o coeficiente de absorção é aproximado nas bandas, algumas subdivisões podem ser estabelecidas para esse modelo. Duas das mais comuns são: (a) *box-model*, em que o coeficiente de absorção é admitido constante em cada banda, e (b) modelo exponencial, por meio do qual o coeficiente de absorção possui comportamento exponencial em torno do centro da banda. De todos os modelos de bandas de absorção, o exponencial é o que conduz a melhores resultados.

3.3.3 Soma Ponderada de Gases Cinzas - WSGGM

Supondo-se um gás participante à temperatura constante e estabelecida uma trajetória S , sua emitância direcional espectral ε_λ é obtida pela Equação (3.39), sendo dependente da trajetória S , da temperatura e da pressão do gás. Define-se emitância direcional total (em todos os comprimentos de onda), ε_g , como a razão da energia radiante emitida pelo gás na direção S pela energia que seria emitida pelo corpo negro à temperatura do gás. Expressando-se essas energias direcionais em termos de intensidade de radiação, de acordo com a Equação (3.39) obtém-se

$$\varepsilon_g(S) = \frac{\int_\lambda i_{\lambda,b}(\lambda) \alpha_\lambda(\lambda, S) d\lambda}{\int_\lambda i_{\lambda,b}(\lambda) d\lambda} = \frac{\int_\lambda [1 - e^{(-a_\lambda S)}] e_{\lambda,b} d\lambda}{\int_\lambda e_{\lambda,b} d\lambda} \quad (3.54)$$

sendo $e_{\lambda,b} = i_{\lambda,b}(\lambda)/\pi$, conforme a Equação (3.10).

Embora o coeficiente de absorção apresente comportamento descontínuo no espectro de radiação, Figura 3.4, é possível dividir esse espectro em I regiões onde o coeficiente de absorção pode ser considerado constante. Assim a equação acima poderia ser calculada por

$$\varepsilon_g(S) = \sum_{i=0}^I \left\{ [1 - e^{(-a_i S)}] \frac{\int_{\Delta\lambda_i} e_{\lambda,b} d\lambda}{\int_\lambda e_{\lambda,b} d\lambda} \right\} \quad (3.55)$$

sendo $\Delta\lambda_i$ o intervalo no espectro no qual o coeficiente de absorção é constante e igual a a_i . O primeiro termo do somatório corresponde à emitância do gás cinza de coeficiente de absorção igual a a_i , e o segundo, à fração de energia radiante que o corpo negro emite na faixa espectral $\Delta\lambda_i$, dependente apenas da temperatura do gás. Deste modo a emitância do gás real pode ser dada pela soma ponderada das emitâncias dos gases cinzas “contidos” no seu espectro de radiação, sendo o fator de ponderação função apenas da temperatura. De modo simplificado, a emitância do gás pode ser escrita como

$$\varepsilon_g(S) = \sum_{i=0}^I C_{e,i}(T) [1 - e^{(-a_i S)}] \quad (3.56)$$

em que $C_{e,i}(T)$ são os termos de ponderação, função apenas da temperatura; $i = 0$ corresponde a todas as faixas do espectro nas quais o coeficiente de absorção é zero. Assim, $a_0 = 0$ e, pela definição dos fatores de ponderação,

$$C_{e,0}(T) = 1 - \sum_{i=1}^I C_{e,i}(T) \quad (3.57)$$

O coeficiente de absorção é dependente da temperatura, pressão e composição do gás, e a emitância total depende, adicionalmente, da trajetória S considerada.

O mesmo procedimento pode ser utilizado para a avaliação da absortância direcional total do gás, $\alpha_g(S)$, definida como a razão entre a energia absorvida pelo gás na trajetória S e a energia incidente. Assim, da Equação (3.38),

$$\alpha_g(S) = \frac{\int_{\lambda} [1 - e^{(-a_{\lambda} S)}] i_{\lambda}(\lambda, 0) d\lambda}{\int_{\lambda} i_{\lambda}(\lambda, 0) d\lambda} \quad (3.58)$$

Novamente divide-se o domínio de integração acima nas I regiões em que a_{λ} pode ser considerado constante, ou seja, nas I regiões “cinzas” do gás. Assim

$$\alpha_g(S) = \sum_{i=0}^I \left\{ [1 - e^{(-a_i S)}] \frac{\int_{\Delta\lambda_i} i_{\lambda}(\lambda, 0) d\lambda}{\int_{\lambda} i_{\lambda}(\lambda, 0) d\lambda} \right\} = \sum_{i=0}^I \{ C_{a,i}(T, T_e) [1 - e^{(-a_i S)}] \} \quad (3.59)$$

sendo $C_{a,i}(T, T_e)$ os coeficientes de ponderação, dependentes das temperaturas do gás, T , e da fonte emissora, T_e . A dependência de $C_{a,i}$ em relação a T deve-se ao fato de que é essa temperatura que determina as faixas $\Delta\lambda_i$ do espectro, em que a_i pode ser admitida constante; em relação a T_e , essa dependência vem da relação entre os termos integrais da

Equação (3.59).

As Equações (3.56) e (3.59) foram obtidas apenas por meio de artifícios algébricos e são capazes de fornecer valores exatos para $\varepsilon_g(S)$ e $\alpha_g(S)$, desde que conhecido o comportamento espectral do coeficiente de absorção $a_{i,\lambda}$. Mas nesse ponto reside a maior dificuldade, pois para cada temperatura e pressão esse comportamento varia muito, sendo necessário o conhecimento do comportamento espectral de $a_{i,\lambda}$ para cada condição. Uma alternativa é empregar as Equações (3.56) e (3.59) como equações de interpolação de valores experimentais de $\varepsilon_g(S)$ e $\alpha_g(S)$, sendo os coeficientes de absorção a_i considerados independentes da temperatura, e $C_{e,i}(T)$ e $C_{a,i}(T, T_e)$ funções apenas das temperaturas envolvidas, sendo esse, em essência, o procedimento adotado no modelo da soma ponderada de gases cinzas (WSGGM). Além disso as faixas do espectro em que $a_{i,\lambda}$ é constante são independentes da temperatura do gás, de modo que $C_{a,i}(T, T_e) = C_{a,i}(T_e)$. Quando a fonte emissora é um corpo negro ocorre da definição dos coeficientes de ponderação $C_{e,i}$ e $C_{a,i}$, que $C_{e,i}(T) = C_{a,i}(T)$.

Smith et al. [1982] representaram os coeficientes de ponderação por meio de uma função polinomial de ordem $J - 1$ da temperatura. Deste modo

$$C_{e,i}(T) = \sum_{j=1}^J c_{e,i,j} T^{j-1} \quad (3.60)$$

em que $c_{e,i,j}$ são os coeficientes da função polinomial. Assim a Equação (3.56) torna-se

$$\varepsilon_g(S) = \sum_{i=1}^I \left(\sum_{j=1}^J c_{e,i,j} T^{j-1} \right) [1 - e^{(-a_i S)}] \quad (3.61)$$

Smith et al. [1982] utilizaram o modelo de soma ponderada de gases cinzas para determinar as absorptâncias e emitâncias de gases resultantes de combustão. Geralmente a temperatura desses gases situa-se entre 600 e 2400 K e a pressão total mantém-se pouco acima de 1 atm, quando o insuflamento é feito por ventiladores. O produto da combustão estequiométrica de óleos combustíveis contém a mistura de dióxido de carbono e vapor de água, ambos à pressão de 0,1 atm; no caso de combustão estequiométrica do metano as pressões parciais do dióxido de carbono e do vapor de água são, respectivamente, 0,1 e 0,2 atm [Smith et al., 1982]. O restante da mistura é nitrogênio, que é transparente à radiação térmica.

Para essas condições de temperatura e pressão, utilizou-se a Equação (3.61) como equação de interpolação de valores experimentais da emitância total dessas misturas. Testes preliminares feitos por Smith et al. [1982] mostraram a equação de interpolação resultante de $I = 3$ e $J = 4$ como adequada. Os coeficientes polinomiais $c_{e,i,j}$ e os coeficientes de absorção a_i , obtidos em Smith et al. [1982], são apresentados na Tabela 3.1, que também indica as condições físicas para as quais os resultados foram gerados. A emitância total, avaliada por meio da Equação (3.61) através desses coeficientes, manteve-se em concordância com os dados disponíveis na literatura.

Tabela 3.1 – Coeficientes para cálculo da emitância total - Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) [Smith et al., 1982, França, F. H. R., 1995].

i	$a_i [m^{-1}]$	$c_{e,i,1} \times 10^1$	$c_{e,i,2} \times 10^4 [K^{-1}]$	$c_{e,i,3} \times 10^7 [K^{-2}]$	$c_{e,i,4} \times 10^{11} [K^{-3}]$
Mistura $CO_2 + H_2O$: $p_{CO_2} = 0,1 \text{ atm}$, $p_{H_2O} = 0,1 \text{ atm}$					
1	0,08606	5,150	-2,303	0,9779	-1,494
2	1,4110	0,7749	3,399	-2,297	3,770
3	35,620	1,907	-1,824	0,5608	-0,5122
Mistura $CO_2 + H_2O$: $p_{CO_2} = 0,1 \text{ atm}$, $p_{H_2O} = 0,2 \text{ atm}$					
1	0,12603	6,508	-5,551	3,029	-5,353
2	1,9548	-0,2504	6,112	-3,882	6,528
3	39,570	2,718	-3,118	1,221	-1,612
$p_T = 1 \text{ atm}$; $0,001 \leq p_S \leq 10,0 \text{ atm} - m$; $600 \leq T \leq 2400 \text{ K}$					

3.4 Métodos de Solução de Problemas de Radiação em Meios Participantes

A maioria dos métodos de solução da transferência de calor combinando condução, advecção e radiação em meios participantes foi desenvolvida a partir dos anos sessenta. De um modo geral não existe método que possa ser considerado o melhor para todos os problemas, e a escolha depende das características e exigências de cada um deles. Howell [1988] realizou uma análise dos principais métodos disponíveis para a solução de problemas

envolvendo radiação em meios participantes, bem como as dificuldades enfrentadas nesses métodos.

3.4.1 Aproximações P - N

Consistem na expansão da intensidade de radiação em harmônicos esféricos, com aproximação até N termos. Através desse procedimento é possível reduzir os termos íntegro-diferenciais resultantes do balanço de energia radiante em termos diferenciais. Quanto maior o valor de N , maior a precisão dos resultados provenientes desse método. Quando $N = 1$ o fluxo de energia radiante é expresso por meio de diferenciais de primeira ordem da intensidade de radiação, e o método é denominado aproximação diferencial. Campo e Schuler [1988], Schuler e Campo [1988] e Seo et al. [1994] utilizaram a aproximação $P-1$ no problema de transferência de calor no escoamento de gases participantes em dutos circulares, considerando apenas as trocas radiais de energia radiante, obtendo resultados satisfatórios do ponto de vista de tempo de cálculo. Esse método permite a introdução da dependência do coeficiente de absorção em relação ao espectro de radiação e do fenômeno de espalhamento.

3.4.2 Método de Monte Carlo

Esse método estatístico pode, em princípio, ser utilizado para simulação de todos os processos envolvidos em problemas de radiação. Sua limitação reside na dificuldade de compatibilizar a malha por ele exigida e a requerida para a solução das equações da energia e da quantidade de movimento. Necessita-se, nesse caso, de poder computacional suficiente para a redução da malha do método de Monte Carlo para que haja coincidência com as malhas das equações da energia e da quantidade de movimento, resultando no aumento do número de simulações estatísticas. Trabalhos recentes têm utilizado o método de Monte Carlo para a solução de problemas difíceis, como a transferência de energia em meios sem equilíbrio termodinâmico, polarização em transferência radiante, meios não homogêneos e inclusão do efeito de espalhamento em fornalhas.

3.4.3 DTRM - *Discrete Transfer Radiation Model*

Este modelo baseia-se no princípio de que um fluxo de calor por radiação que atravessa um meio participante é atenuado ou aumentado devido à absorção e emissão deste meio

[Özişik, 1985]. Este método pode ser usado de forma acoplada à um método numérico, tal como o Método dos Volumes Finitos. A principal consideração do DTRM é que a radiação que parte de uma superfície discreta numa certa faixa de ângulos sólidos pode ser aproximada por uma única direção. A técnica de traçado destas direções usada no DTRM é capaz de prever com suficiente precisão a transferência de calor entre superfícies, sem utilizar o cálculo do fator de forma. O DTRM também assume que todas as superfícies são difusas. Isto significa que a reflexão da radiação incidente sobre uma superfície é isotrópica com relação ao ângulo sólido. Para melhor descrever este modelo, parte-se do princípio de que a radiação térmica em gases é um fenômeno volumétrico. Deste modo ao se assumir um fluxo de calor com intensidade de radiação hemisférica total difusa i , passando por um volume de fluido semi-transparente, absorvedor e emissor, de espessura S e temperatura uniforme T (ver Figura 3.11), pode-se obter, como resultado de um balanço, a variação na intensidade de radiação por unidade de comprimento ao longo da direção de propagação.

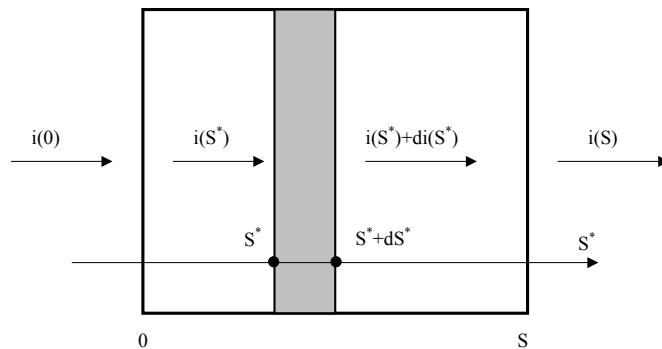


Figura 3.11 – Volume de fluido submetido a um fluxo de calor por radiação [Özişik, 1998].

Sendo assim a variação na intensidade de radiação pode ser escrita como a diferença entre o ganho devido à emissão, e a atenuação devido à absorção do meio [Siegel e Howell, 2002; Özişik, 1985].

Deste modo a variação da entalpia do fluido devido à radiação pode ser computada através da soma das alterações na intensidade de radiação de cada segmento S^* , e de cada direção (ou vetor) que é determinada através do volume de controle, e introduzida no termo fonte da equação da conservação de energia, tal como $\overline{S_{rad}}$, Equações (2.162) e (2.164)), já apresentadas no Capítulo 2.

3.4.4 Método das Zonas

Consiste na subdivisão do meio participante não isotérmico em volumes de gás onde as temperaturas são admitidas uniformes, denominados zonas de radiação. Da mesma forma as superfícies envolventes podem ser divididas em zonas de superfície. O conceito básico do método é que as energias radiantes recebidas por uma zona de gás, por exemplo, de outras zonas, de área e de gás, são proporcionais, respectivamente, à radiosidade e ao poder emissivo de corpo negro correspondentes. As constantes de proporcionalidade são denominadas áreas de troca direta. Algumas limitações do método residem na dificuldade de tratar geometrias mais complexas do que cavidades cilíndricas e retangulares, na incorporação do fenômeno de espalhamento e na compatibilização da malha do método das zonas com a requerida para solução dos termos difusivos e advectivos da equação da energia. Ainda assim esse método tem se mostrado poderoso na solução de problemas tridimensionais e tem sido o mais utilizado em projetos de fornalhas. Nakra e Smith [1977], Clausen e Smith [1979], Smith et al. [1985] e França e Goldstein [1998] empregaram o método das zonas na transferência de calor no escoamento de gases participantes em dutos circulares. A dependência do coeficiente de absorção em relação ao comprimento de onda pode ser introduzida por meio do modelo de soma ponderada de gases cinzas. Nesta tese o método das zonas foi o escolhido para a avaliação das trocas de energia radiante, tendo-se mostrado adequado para o problema estudado.

3.5 Modelo da Soma Ponderada de Gases Cinzas Aplicado ao Método das Zonas

Nesta seção é detalhado o procedimento para obter as expressões necessárias ao cálculo das trocas radiantes no interior de um duto de superfície cinza, sem a ocorrência de espalhamento.

3.5.1 Troca de Energia Radiante Gás-Superfície

A Figura 3.12 apresenta um volume de gás participante, $\mathcal{V}_\gamma$, e uma superfície de área A_k . De acordo com o método das zonas, assume-se que cada um deles possui temperatura constante. A determinação da energia radiante que a zona de gás envia à área é dada pela integração das energias radiantes que cada volume infinitesimal $d\mathcal{V}_\gamma$, contido em $\mathcal{V}_\gamma$, envia

a cada elemento de área infinitesimal dA_k , contido em A_k . Conforme a Equação (3.33), a energia radiante espectral emitida por dV_γ é dada por $4a_\lambda(T_\gamma)e_{\lambda,b}(T_\gamma)dV_\gamma d\lambda$, sendo $4a_\lambda(T_\gamma)$ o coeficiente de absorção de V_γ e $e_{\lambda,b}(T_\gamma)$ o poder emissivo do corpo negro à temperatura de V_γ . Essa emissão é uniforme em todas as direções, de modo que a energia emitida, por unidade de ângulo sólido é $a_\lambda(T_\gamma)e_{\lambda,b}(T_\gamma)dV_\gamma d\lambda/\pi$. A energia emitida por V_γ que chega em dA_k deve estar contida dentro do ângulo sólido $d\omega_{\gamma-k} = dA_k \cos \beta_k / S_{\gamma-k}^2$, como indicado na Figura 3.12. Além disso apenas a fração transmitida ao longo da trajetória $S_{\gamma-k}$ deve ser levada em conta. Assim, de acordo com a Equação (3.40), obtém-se

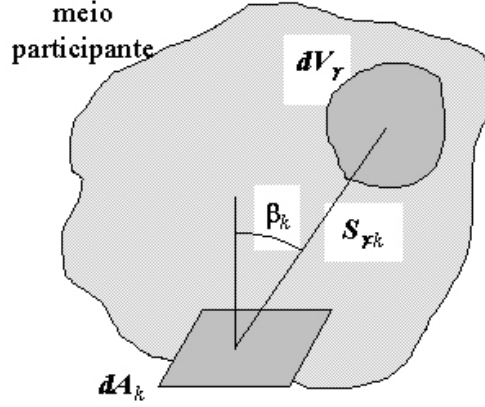


Figura 3.12 – Troca de energia radiante entre uma zona de superfície e uma zona de gás.

$$d^4Q_{\lambda,\gamma-k} = a_\lambda(T_\gamma)e_{\lambda,b}(T_\gamma)dV_\gamma d\lambda \frac{dA_k \cos \beta_k}{\pi S_{\gamma-k}^2} e \left[- \int_0^{S_{\gamma-k}} a_\lambda(S^*) dS^* \right] \quad (3.62)$$

sendo $d^4Q_{\lambda,\gamma-k}$ energia espectral hemisférica proveniente de dV_γ que atinge dA_k . Integrando em V_γ e A_k , obtém-se a taxa de energia espectral hemisférica $dQ_{\lambda,\gamma-k}$ que chega em A_k , proveniente de V_γ . Sendo assim:

$$dQ_{\lambda,\gamma-k} = d\lambda \int_{V_\gamma} \int_{A_k} \frac{a_\lambda(T_\gamma)e_{\lambda,b}(T_\gamma) \cos \beta_k}{\pi S_{\gamma-k}^2} e \left[- \int_0^{S_{\gamma-k}} a_\lambda(S^*) dS^* \right] dV_\gamma dA_k \quad (3.63)$$

A irradiação espectral $dG_{\lambda,\gamma-k}$ é dada por $dQ_{\lambda,\gamma-k}/A_k$, conforme a Equação (3.12). Como V_γ é isotérmico, $a_\lambda(T_\gamma)$ e $e_{\lambda,b}(T_\gamma)$ são constantes e podem ser retirados da integral, de

modo que

$$dG_{\lambda, \gamma-k} A_k = d\lambda a_\lambda(T_\gamma) e_{\lambda, b}(T_\gamma) \int_{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_k} \frac{\cos \beta_k}{\pi S_{\gamma-k}^2} e^{\left[- \int_0^{S_{\gamma-k}} a_\lambda(S^*) dS^* \right]} d\mathcal{V}_\gamma dA_k \quad (3.64)$$

A irradiação total hemisférica $G_{\gamma-k}$ que chega em A_k proveniente de $\mathcal{V}_\gamma$, é determinada pela integração da equação acima em todo o espectro de radiação. Utiliza-se, para tanto, o modelo da soma ponderada de gases cinzas. Divide-se o espectro de radiação em I intervalos nos quais o coeficiente de absorção é independente do comprimento de onda e observa-se que a_i não depende da temperatura, sendo constante na trajetória $S_{\gamma-k}$. Deste modo

$$e^{\left[- \int_0^{S_{\gamma-k}} a_\lambda(S^*) dS^* \right]} = e^{(-a_i S_{\gamma-k})} \quad (3.65)$$

e assim

$$G_{\gamma-k} A_k = \sum_{i=0}^I \left[C_{e,i}(T_\gamma) a_i \int_{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_k} \frac{\cos \beta_k}{\pi S_{\gamma-k}^2} e^{(-a_i S_{\gamma-k})} d\mathcal{V}_\gamma dA_k \right] \int_\lambda e_{\lambda, b}(T_\gamma) d\lambda \quad (3.66)$$

Ou depois de alguma algebra:

$$G_{\gamma-k} A_k = \sum_{i=0}^I \left[C_{e,i}(T_\gamma) \frac{a_i}{\pi} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_k} \frac{\cos \beta_k}{S_{\gamma-k}^2} e^{[-a_i S_{\gamma-k}]} d\mathcal{V}_\gamma dA_k \right] \sigma T_\gamma^4 \quad (3.67)$$

em que os termos $C_{e,i}(T_\gamma)$ são os coeficientes de ponderação da Equação (3.56), calculados a partir da Equação (3.60). Define-se como área de troca direta $(\overline{g_\gamma s_k})_i$, para cada gás cinza i

$$(\overline{g_\gamma s_k})_i = \frac{a_i}{\pi} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_k} \frac{\cos \beta_k}{S_{\gamma-k}^2} e^{[-a_i S_{\gamma-k}]} d\mathcal{V}_\gamma dA_k \quad (3.68)$$

A chamada área de fluxo direcionado $g_\gamma \vec{s}_k$ é obtida de

$$g_\gamma \vec{s}_k = \sum_{i=0}^I C_{e,i}(T_\gamma) (\overline{g_\gamma s_k})_i \quad (3.69)$$

e a irradiação $G_{\gamma-k}$ torna-se igual a

$$G_{\gamma-k} = \frac{g_{\gamma} \vec{s}_k}{A_k} \sigma T_{\gamma}^4 \quad (3.70)$$

A área de fluxo direcionado, $g_{\gamma} \vec{s}_k$, depende da temperatura da fonte emissora de energia, o que determina um sentido de $\mathcal{V}_{\gamma}$ para A_k .

3.5.2 Troca de Energia Radiante Superfície-Superfície

Considere-se, agora, a troca entre duas superfícies, A_j e A_k , conforme a Figura 3.13. Como já discutido na apresentação da Equação (3.45), a taxa de energia $d^3Q_{\lambda,j-k}$ que deixa dA_j e chega em dA_k é fornecida por

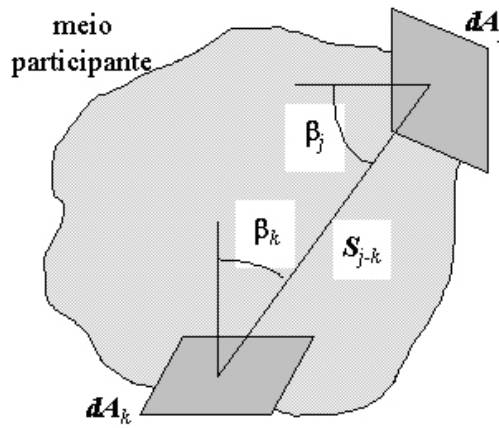


Figura 3.13 – Troca de energia radiante entre duas zona de superfície.

$$d^3Q_{\lambda,j-k} = \frac{dB_{\lambda,j}}{\pi} e \left[- \int_0^{s_{j-k}} a_{\lambda}(S^*) dS^* \right] \frac{\cos \beta_j \cos \beta_k}{S_{j-k}^2} dA_j dA_k \quad (3.71)$$

onde $dB_{\lambda,j}$ é a radiosidade espectral hemisférica da superfície A_j . Obtém-se a taxa total hemisférica de energia Q_{j-k} e, portanto, a irradiação G_{j-k} , pela integração desta equação nas áreas A_j e A_k e em todos os comprimentos de onda λ . Deste modo

$$Q_{j-k} = G_{j-k} A_k = \int_{\lambda} \int_{A_j} \int_{A_k} \frac{dB_{\lambda,j}}{\pi} e \left[- \int_0^{s_{j-k}} a_{\lambda}(S^*) dS^* \right] \frac{\cos \beta_j \cos \beta_k}{S_{j-k}^2} dA_j dA_k \quad (3.72)$$

Na avaliação da integral acima utiliza-se novamente o modelo de soma ponderada de gases cinzas de modo que

$$G_{j-k}A_k = \sum_{i=0}^I \left(\int_{A_j} \int_{A_k} e^{(-a_i S_{j-k})} \frac{\cos \beta_j \cos \beta_k}{\pi S_{j-k}^2} dA_j dA_k \int_{\Delta \lambda_i} dB_{\lambda,j} \right) \quad (3.73)$$

Admite-se que $dB_{\lambda,j}$ é diretamente proporcional a $e_{\lambda,b}(T_j)di_\lambda$, isto é,

$$dB_{\lambda,j} = cte \times e_{\lambda,b}(T_j)di_\lambda \quad (3.74)$$

onde cte é uma constante de proporcionalidade. Integrando-se os dois membros desta equação em todo o espectro de radiação, e no intervalo $\Delta_{\lambda,i}$, resulta

$$\int_{\lambda} dB_{\lambda,j} = cte \int_{\lambda} e_{\lambda,b}(T_j)di_\lambda = B_j = cte \times \sigma T_j^4 \quad (3.75)$$

e

$$\int_{\Delta \lambda_i} dB_{\lambda,j} = cte \int_{\Delta \lambda_i} e_{\lambda,b}(T_j)di_\lambda = cte \times C_{e,i}(T_j)\sigma T_j^4 \quad (3.76)$$

onde B_j é a radiosidade total hemisférica da superfície A_j e $C_{e,i}$, os mesmos coeficientes da Equação (3.56). Combinando as duas equações anteriores obtém-se:

$$\int_{\Delta \lambda_i} dB_{\lambda,j} = C_{e,i}(T_j)B_j \quad (3.77)$$

A Equação (3.74) é rigorosamente exata apenas quando a superfície A_j é negra. Neste trabalho as superfícies são assumidas cinzas, e ela constitui uma aproximação. Desse modo pode-se escrever

$$G_{j-k}A_k = \sum_{i=0}^I \left(C_{e,i}(T_j) \int_{A_j} \int_{A_k} e^{(-a_i S_{j-k})} \frac{\cos \beta_j \cos \beta_k}{\pi S_{j-k}^2} dA_j dA_k \right) B_j \quad (3.78)$$

As áreas de troca direta $(\overline{s_j s_k})_i$ e de fluxo direcionado $s_j \vec{s}_k$ podem ser escritas como

$$(\overline{s_j s_k})_i = \int_{A_j} \int_{A_k} e^{(-a_i S_{j-k})} \frac{\cos \beta_j \cos \beta_k}{\pi S_{j-k}^2} dA_j dA_k \quad (3.79)$$

e

$$s_j \vec{s}_k = \sum_{i=0}^I C_{e,i}(T_j) (\overline{s_j s_k})_i \quad (3.80)$$

Com isso G_{j-k} torna-se

$$G_{j-k} = \frac{s_j \vec{s}_k}{A_k} B_j \quad (3.81)$$

Observar que a irradiação na superfície k depende do conhecimento da radiosidade em cada superfície j e que, conforme a Equação (3.18), a radiosidade é obtida por meio do conhecimento da irradiação, que é o que se pretende determinar. Um modo de evitar esse problema é utilizar as chamadas áreas de troca direta totais [Hottel e Sarofim, 1967], que levam em conta as múltiplas reflexões e absorções que ocorrem nas superfícies. Nesse caso a energia radiante que a zona A_j envia para A_k é obtida pelo produto da área de troca direta total pelo poder emissivo do corpo negro à temperatura de A_j , σT_j^4 . Neste trabalho optou-se por manter as áreas de troca direta, não introduzindo as áreas de troca totais. As irradiações e radiosidades em cada superfície são determinadas iterativamente. A irradiação total em A_k é dada pela soma das irradiações provenientes das Γ zonas de gás e das J zonas de superfície. Sendo assim

$$G_k = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} G_{\gamma-k} + \sum_{j=1}^J G_{j-k} = \frac{1}{A_k} \left(\sum_{\gamma=1}^{\Gamma} g_{\gamma} \vec{s}_k \sigma T_{\gamma}^4 + \sum_{j=1}^J s_j \vec{s}_k B_j \right) \quad (3.82)$$

Assim a taxa líquida de energia radiante total hemisférica perdida pela superfície k , por unidade de área, é dada por

$$q_{R,k} = \frac{1}{A_k} \left(\sum_{\gamma=1}^{\Gamma} g_{\gamma} \vec{s}_k \sigma T_{\gamma}^4 + \sum_{j=1}^J s_j \vec{s}_k B_j \right) - B_k \quad (3.83)$$

onde B_k é a radiosidade da superfície k .

3.5.3 Troca de Energia Radiante Gás-Gás

Considera-se, a seguir, a troca de energia radiante entre duas zonas de gás, $\mathcal{V}_{\gamma}$ e $\mathcal{V}_{\gamma^*}$, conforme a Figura 3.14. A taxa de energia espectral emitida por $d\mathcal{V}_{\gamma^*}$, contida no ângulo sólido $d\omega_{\gamma^*-\gamma} = dA_{\gamma}/S_{\gamma^*-\gamma}^2$, é igual a $i_{\lambda,b}(T_{\gamma^*})a_{\lambda}(T_{\gamma^*})d\lambda d\omega_{\gamma^*-\gamma}d\mathcal{V}_{\gamma^*}$, de acordo com a

Equação (3.34). Assim a taxa de energia espectral hemisférica que $d\mathcal{V}_\gamma$ recebe de $d\mathcal{V}_{\gamma^*}$ vale

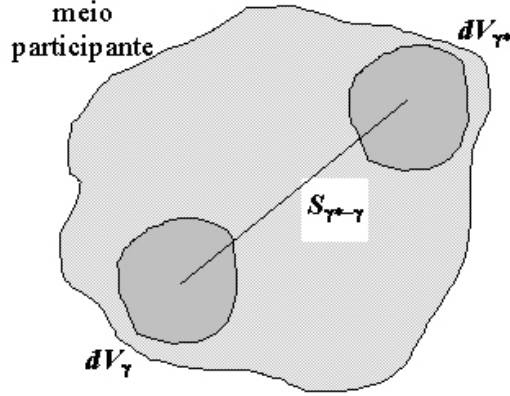


Figura 3.14 – Troca de energia radiante entre duas zonas de gás.

$$d^4Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma} = a_\lambda(T_{\gamma^*}) \frac{e_{\lambda,b}(T_{\gamma^*})}{\pi} d\lambda d\mathcal{V}_{\gamma^*} \frac{dA_\gamma}{S_{\gamma^*-\gamma}^2} e \left[- \int_0^{S_{\gamma^*-\gamma}} a_\lambda(S^*) dS^* \right] \quad (3.84)$$

Como já visto a energia espectral hemisférica absorvida por $d\mathcal{V}_\gamma$, $d^5Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma}$, é dada por

$$d^5Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma} = d^4Q_{\lambda,\gamma^*-\gamma} a_\lambda(T_\gamma) dS_\gamma \quad (3.85)$$

Substituindo a Equação (3.84) na Equação (3.85) obtém-se

$$d^5Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma} = a_\lambda(T_{\gamma^*}) e_{\lambda,b}(T_{\gamma^*}) d\lambda d\mathcal{V}_{\gamma^*} \frac{a_\lambda(T_\gamma) d\mathcal{V}_\gamma}{\pi S_{\gamma^*-\gamma}^2} e \left[- \int_0^{S_{\gamma^*-\gamma}} a_\lambda(S^*) dS^* \right] \quad (3.86)$$

pois $d\mathcal{V}_\gamma = dS_\gamma dA_\gamma$. Encontra-se a energia total emitida por $\mathcal{V}_{\gamma^*}$ e absorvida por $\mathcal{V}_\gamma$ pela integração de $d^5Q_{\lambda,a,\gamma^*-\gamma}$ em $\mathcal{V}_{\gamma^*}$, $\mathcal{V}_\gamma$ e λ . Deste modo

$$Q_{a,\gamma^*-\gamma} = \int_\lambda \int_{\mathcal{V}_{\gamma^*}} \int_{\mathcal{V}_\gamma} a_\lambda(T_{\gamma^*}) e_{\lambda,b}(T_{\gamma^*}) d\lambda \frac{a_\lambda(T_\gamma)}{\pi S_{\gamma^*-\gamma}^2} e \left[- \int_0^{S_{\gamma^*-\gamma}} a_\lambda(S^*) dS^* \right] d\mathcal{V}_{\gamma^*} d\mathcal{V}_\gamma \quad (3.87)$$

Aplicando novamente o modelo de soma ponderada de gases cinzas obtém-se

$$Q_{a,\gamma^*-\gamma} = \left[\sum_{i=0}^I C_{e,i}(T_{\gamma^*}) a_i^2 \int_{\mathcal{V}_{\gamma^*}} \int_{\mathcal{V}_{\gamma}} \frac{e^{(-a_i S_{\gamma^*-\gamma})}}{\pi S_{\gamma^*-\gamma}^2} d\mathcal{V}_{\gamma} d\mathcal{V}_{\gamma^*} \right] \sigma T_{\gamma^*}^4 \quad (3.88)$$

As áreas de troca direta $(\overline{g_{\gamma^*} g_{\gamma}})_i$ e de fluxo direcionado $g_{\gamma^*} \vec{g}_{\gamma}$ são definidas como

$$(\overline{g_{\gamma^*} g_{\gamma}})_i = a_i^2 \int_{\mathcal{V}_{\gamma^*}} \int_{\mathcal{V}_{\gamma}} \frac{e^{(-a_i S_{\gamma^*-\gamma})}}{\pi S_{\gamma^*-\gamma}^2} d\mathcal{V}_{\gamma} d\mathcal{V}_{\gamma^*} \quad (3.89)$$

e

$$g_{\gamma^*} \vec{g}_{\gamma} = \sum_{i=0}^I [C_{e,i}(T_{\gamma^*}) (\overline{g_{\gamma^*} g_{\gamma}})_i] \quad (3.90)$$

Assim a taxa de energia radiante emitida por $\mathcal{V}_{\gamma^*}$ e absorvida por $\mathcal{V}_{\gamma}$ é dada por

$$Q_{a,\gamma^*-\gamma} = g_{\gamma^*} \vec{g}_{\gamma} \sigma T_{\gamma^*}^4 \quad (3.91)$$

3.5.4 Troca de Energia Radiante Superfície-Gás

A energia radiante que o volume $\mathcal{V}_{\gamma}$ recebe de uma área A_j , conforme a Figura 3.15, provém da integração em A_k , $\mathcal{V}_{\gamma}$ e λ da energia radiante proveniente de dA_j e absorvida por $d\mathcal{V}_{\gamma}$, indicada por $d^4 Q_{\lambda,a,j-\gamma}$. Deste modo

$$d^4 Q_{\lambda,a,j-\gamma} = \frac{dB_{\lambda,j}}{\pi} e^{\left(\int_0^{S_{j-\gamma}} -a_{\lambda}(S^*) dS^* \right)} d\mathcal{V}_{\gamma} \frac{dA_j \cos \beta_j}{S_{\gamma-j}^2} a_{\lambda}(T_{\gamma}) \quad (3.92)$$

Utilizando-se o modelo de soma ponderada de gases cinzas no método das zonas chega-se a

$$Q_{a,j-\gamma} = \sum_{i=0}^I \left(C_{e,i}(T_j) \frac{a_i}{\pi} \int_{\mathcal{V}_{\gamma}} \int_{A_j} \frac{e^{(-a_i S_{j-\gamma})} \cos \beta_j}{S_{j-\gamma}^2} d\mathcal{V}_{\gamma} dA_j \right) B_j \quad (3.93)$$

onde $Q_{a,j-\gamma}$ é a energia total hemisférica proveniente de dA_j e absorvida por $d\mathcal{V}_{\gamma}$.

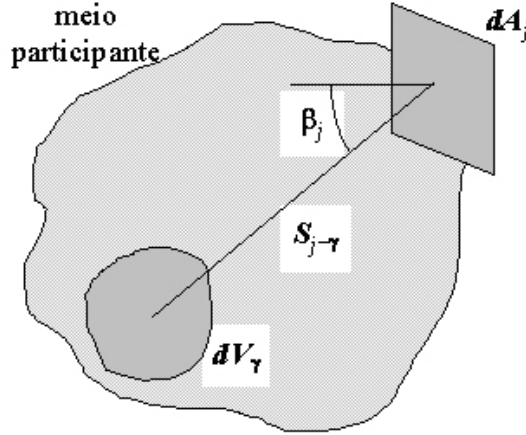


Figura 3.15 – Troca de energia radiante entre uma zona de superfície e uma zona de gás.

As áreas de troca direta $(\overline{s_j g_\gamma})_i$ e de fluxo direcionado $s_j \vec{g}_\gamma$ são obtidas de

$$(\overline{s_j g_\gamma})_i = \frac{a_i}{\pi} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \int_{A_j} \frac{e^{(-a_i S_{j-\gamma})} \cos \beta_j}{S_{j-\gamma}^2} dV_\gamma dA_j \quad (3.94)$$

e

$$s_j \vec{g}_\gamma = \sum_{i=0}^I C_{e,i}(T_j) (\overline{s_j g_\gamma})_i \quad (3.95)$$

sendo T_j a temperatura da superfície A_j . Nota-se que $(\overline{s_j g_\gamma})_i = (\overline{g_\gamma s_j})_i$, porém $g_\gamma \vec{s}_j$ e $s_j \vec{g}_\gamma$ não são necessariamente iguais. Desse modo a taxa de energia proveniente de A_j e absorvida por $\mathcal{V}_\gamma$ torna-se:

$$Q_{a,j-\gamma} = s_j \vec{g}_\gamma B_j \quad (3.96)$$

A energia total hemisférica absorvida por $\mathcal{V}_\gamma$, $Q_{a,\gamma}$, é determinada pela inclusão da contribuição de todas as Γ zonas de gás e J zonas de superfície. Sendo assim

$$Q_{a,\gamma} = \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} Q_{a,\gamma^*-\gamma} + \sum_{j=1}^J Q_{a,j-\gamma} = \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} g_{\gamma^*} \vec{g}_\gamma \sigma T_{\gamma^*}^4 + \sum_{j=1}^J s_j \vec{g}_\gamma B_j \quad (3.97)$$

As Equações (3.83) e (3.97) são obtidas apenas quando se admite a validade da

hipótese da Equação (3.74). Ainda assim elas são comumente aceitas [Modest, 1993].

A energia total hemisférica emitida por $\mathcal{V}_\gamma$, $Q_{e,\gamma}$, provém da integração da Equação (3.33) em todos os comprimentos de onda, λ , e no volume $\mathcal{V}_\gamma$. Deste modo

$$Q_{e,\gamma} = \int_{\lambda} \int_{\mathcal{V}_\gamma} 4e_{\lambda,b}(T_\gamma) a_\lambda(T_\gamma) d\mathcal{V}_\gamma d\lambda \quad (3.98)$$

Como cada volume $\mathcal{V}_\gamma$ tem propriedades uniformes

$$Q_{e,\gamma} = \int_{\lambda} 4e_{\lambda,b}(T_\gamma) a_\lambda(T_\gamma) \mathcal{V}_\gamma d\lambda = 4\mathcal{V}_\gamma \sum_{i=0}^I (C_{e,i}(T_\gamma) a_i) \sigma T_\gamma^4 \quad (3.99)$$

Assim a taxa líquida de energia radiante total hemisférica perdida por $\mathcal{V}_\gamma$, por unidade de volume, é dada por

$$q_{R,\gamma} = \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma} (Q_{e,\gamma} - Q_{a,\gamma}) \quad (3.100)$$

Deste modo, substituindo as Equações (3.97) e (3.99) na Equação (3.100), obtém-se

$$q_{R,\gamma} = -\frac{1}{\mathcal{V}_\gamma} \left[4\mathcal{V}_\gamma \sum_{i=0}^I (C_{e,i}(T_\gamma) a_i) \sigma T_\gamma^4 - \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} g_{\gamma^*} \vec{g}_\gamma \sigma T_{\gamma^*}^4 - \sum_{j=1}^J s_j \vec{g}_\gamma B_j \right] \quad (3.101)$$

A Equações (3.101) e (3.83) são usadas para calcular o termo fonte devido à radiação térmica, $\overline{S_{rad}}$, na equação de conservação de energia, Equações (2.162) e (2.164) já apresentadas no Capítulo 2.

3.6 Balanço Global de Energia Radiante

Para um gás participante cinza de coeficiente de absorção a_i , a taxa de energia radiante total hemisférica $Q_{e,\gamma}$ emitida por uma zona de volume $\mathcal{V}_\gamma$ é

$$Q_{e,\gamma} = 4\mathcal{V}_\gamma a_i \sigma T_\gamma^4 \quad (3.102)$$

Para que o equilíbrio de energia radiante seja respeitado, $Q_{e,\gamma}$ deve ser igual à soma das taxas de energia enviadas a cada uma das outras zonas de volume e de superfície, $\mathcal{V}_{\gamma^*}$ e

A_j , e que recebem de V_γ . Assim

$$Q_{e,\gamma} = \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} (\overline{g_\gamma g_{\gamma^*}})_i \sigma T_\gamma^4 + \sum_{j=1}^J (\overline{g_\gamma s_j})_i \sigma T_\gamma^4 \quad (3.103)$$

As Equações (3.102) e (3.103) são obtidas de modo análogo ao apresentado na Seção (3.5), com a diferença de que, neste caso, o coeficiente de absorção é constante e igual a a_i . Combinando as Equações (3.102) e (3.103), obtém-se,

$$4\mathcal{V}_\gamma a_i = \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} (\overline{g_\gamma g_{\gamma^*}})_i + \sum_{j=1}^J (\overline{g_\gamma s_j})_i \quad (3.104)$$

Considerando agora uma zona de superfície A_k , a aplicação do procedimento acima conduz a

$$A_k = \sum_{\gamma^*=1}^{\Gamma} (\overline{s_k g_{\gamma^*}})_i + \sum_{j=1}^J (\overline{s_k s_j})_i \quad (3.105)$$

Quando o gás real é modelado pela soma de gases cinzas, a verificação das Equações (3.104) e (3.105) para cada gás cinza garante que a energia radiante emitida por cada zona corresponda à soma das energias radiantes recebidas por todas as outras zonas e provenientes daquela. Respeita-se, desse modo, o balanço global de energia radiante. É importante observar que as Equações (3.104) e (3.105) não trazem informações novas a respeito do cálculo das áreas de troca direta. Em outras palavras, as Equações (3.104) e (3.105) devem ser verificadas quando as áreas de troca direta são avaliadas por meio das Equações (3.68), (3.79), (3.89) e (3.94).

3.7 Áreas de Troca Direta Para Cavidades Cilíndricas

O método das zonas permite um tratamento direto das trocas de energia radiante, desde que sejam conhecidas as áreas de troca direta para cada par de zonas, indicadas pelas Equações (3.68), (3.79), (3.89) e (3.94). Apresentam-se, a seguir, as expressões para o cálculo das áreas de troca direta para as zonas contidas no interior de uma cavidade cilíndrica, para a geometria de interesse deste trabalho. Essas expressões foram desenvolvidas por Sika [1991], e são vantajosas por permitirem o cálculo das áreas de troca direta para zonas axissimétricas de dimensões arbitrárias.

A Figura 3.16 mostra o interior de uma cavidade cilíndrica dividida em zonas de volume e de superfície. As extremidades da cavidade são compostas por paredes e orifícios, sendo os orifícios representados por superfícies negras, à temperatura dos reservatórios correspondentes, sendo incluídas nas trocas de energia radiante. O gás possui coeficiente de absorção a_i . Os seis tipos de pares de zonas são apresentados nas Figuras 3.17 a 3.22.

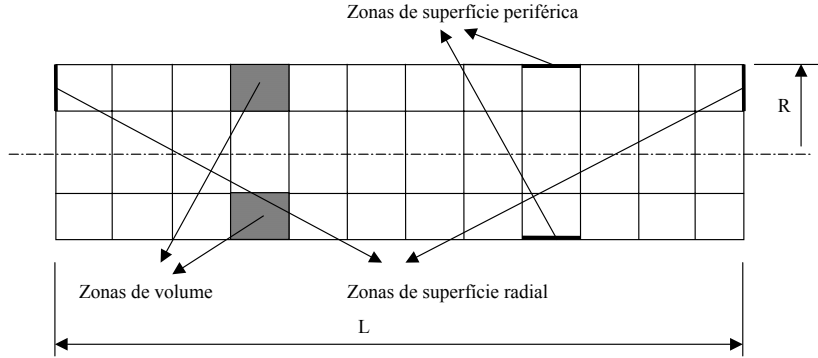


Figura 3.16 – Zonas de radiação no interior de uma cavidade cilíndrica.

A área de troca direta $(\overline{g_1 g_2})_i$ para duas zonas de gás, Figura 3.17, é calculada por

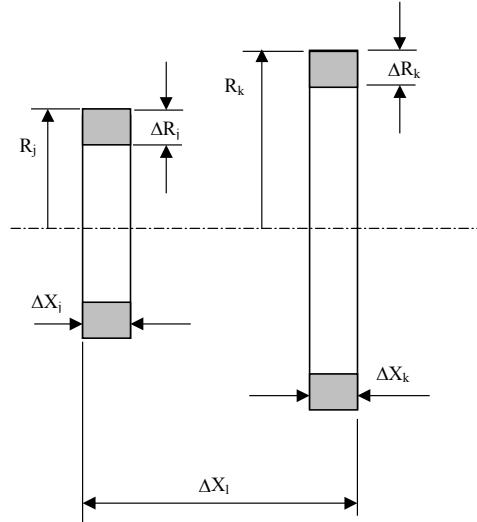


Figura 3.17 – Zonas de gás [Sika J., 1991].

$$(\overline{g_1 g_2})_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \xi_j \sum_{k=1}^2 \xi_k \sum_{l=1}^4 \xi_l \overline{g_1 g_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) \quad (3.106)$$

onde R_j é o raio do volume de gás j , R_k é o raio do volume de gás k , ΔX_l é a distância entre os volumes de gás j e k , e

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{g_1 g_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l)}{a_i^2} = & 4R_j R_k \int_{\beta=0}^{\pi} P \int_{\phi=0}^{\psi} (tg\psi - tg\phi) e^{(-a_i R / \cos \phi)} d\phi d\beta \\
 & + 2\pi R_{min}^2 \left\{ \int_{|R_j - R_k|}^{\sqrt{(R_j - R_k)^2 + \Delta X_l}} [L^2 - (R_j - R_k)^2] e^{\frac{(-a_i L)}{L}} dL \right\} \\
 & - 2\pi R_{min}^2 \left\{ \int_{|R_j - R_k|}^{\sqrt{(R_j - R_k)^2 + \Delta X_l}} \left[2\Delta X_l \sqrt{L^2 - (R_j - R_k)^2} \right] e^{\frac{(-a_i L)}{L}} dL \right\} \\
 & + 2\pi R_{min}^2 \left\{ \int_0^{\sqrt{(R_j - R_k)^2 + \Delta X_l}} (2\Delta X_l - L) e^{(-a_i L)} dL \right\} \\
 & + 2\pi R_{min}^2 \left\{ \int_{\Delta X_l}^{\sqrt{(R_j - R_k)^2 + \Delta X_l}} (\Delta X_l - L)^2 e^{\frac{(-a_i L)}{L}} dL \right\} \quad (3.107)
 \end{aligned}$$

O par da Figura 3.18 compreende uma zona de gás e outra de superfície periférica do duto. A área de troca direta $(\overline{g_1 s_2})_i$ para esse par é

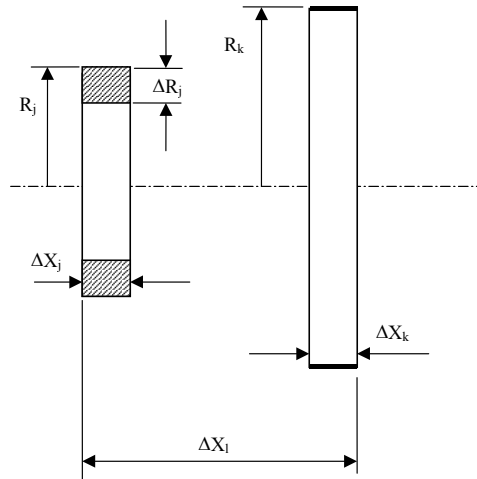


Figura 3.18 – Zonas de gás e superfície periférica [Sika J., 1991].

$$(\overline{g_1 s_2})_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \xi_j \sum_{l=1}^4 \xi_l \overline{g_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) \quad (3.108)$$

onde R_j é o raio do volume de gás j , R_k é o raio da superfície periférica k , ΔX_l é a distância entre o volume de gás j e a superfície periférica k , em que

$$\frac{\overline{g_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l)}{a_i} = 8R_j^2 R_k^2 \int_{\beta=0}^{\pi} \frac{\sin^2 \beta}{R} \int_{\phi=0}^{\psi} (tg\psi - tg\phi) \cos \phi e^{\left(\frac{-a_i R}{\cos \phi}\right)} d\phi d\beta \quad (3.109)$$

Na Figura 3.19 o par é constituído por uma zona de gás e pela superfície radial da extremidade do duto. Nesse caso, a área de troca direta $(\overline{g_1 s_2})_i$ é

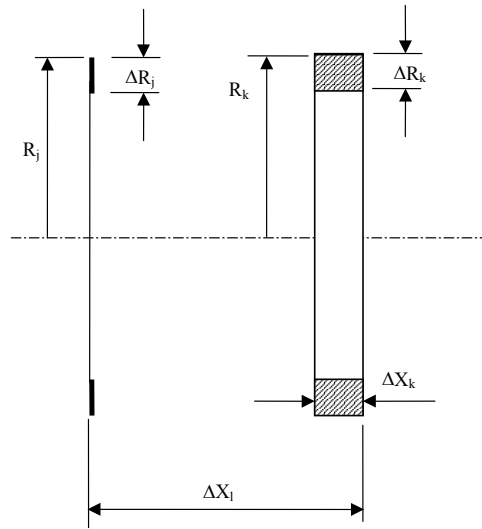


Figura 3.19 – Zonas de gás e superfície radial [Sika J., 1991].

$$(\overline{g_1 s_2})_i = \sum_{j=1}^2 \xi_j \sum_{k=1}^2 \xi_k \sum_{l=1}^2 \xi_l \overline{g_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) \quad (3.110)$$

onde R_k é o raio do volume de gás k , R_j é o raio da superfície radial j , ΔX_l é a distância

entre o volumes de gás k e a superfície radial j , sendo que

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{g_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l)}{a_i} &= \frac{R_j R_k}{2} \int_0^\pi (2PR^2 + UR_j^2 R_k^2) \left[\frac{e^{(-a_i R)}}{R^3} - \frac{e^{(-a_i \sqrt{R^2 + \Delta X_l^2})}}{\sqrt{(R^2 + \Delta X_l^2)^3}} \right] d\beta \\
 &+ \pi \frac{R_j^2 R_k^2}{R_j + R_k} \int_0^{tg^{-1}\left(\frac{\Delta X_l}{R_j + R_k}\right)} \text{sen} \beta e^{(-a_i (R_j + R_k) / \cos \beta)} d\beta \\
 &+ \pi R_{min}^2 \left[\int_0^{|R_j - R_k|} e^{(-a_i L)} dL \right] \\
 &- \pi R_{min}^2 \left[\int_{\Delta X_l}^{\sqrt{(R_j - R_k)^2 + \Delta X_l^2}} \left(1 - \frac{\Delta X_l}{L^2} \right) e^{(-a_i L)} dL \right] \quad (3.111)
 \end{aligned}$$

Para as duas zonas de superfície periférica da Figura 3.20, a área de troca direta $(\overline{s_1 s_2})_i$ é obtida de

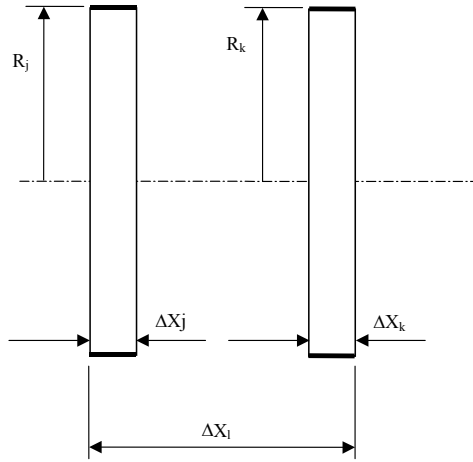


Figura 3.20 – Zonas de superfície periférica [Sika J., 1991].

$$(\overline{s_1 s_2})_i = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^4 \xi_l \overline{s_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) \quad (3.112)$$

onde R_j é o raio da superfície periférica j , R_k é o raio da superfície periférica k , ΔX_l é a

distância entre as superfícies periféricas j e k , e

$$\overline{s_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) = 2 \int_{\beta=0}^{\pi} R^2 \int_{\phi=0}^{\psi} (tg\psi - tg\phi) \cos^2 \phi e^{\left(\frac{-a_i R}{\cos \phi}\right)} d\phi d\beta \quad (3.113)$$

Para as duas zonas de superfícies radiais da Figura 3.21, a área de troca direta $(\overline{s_1 s_2})_i$ é obtida de

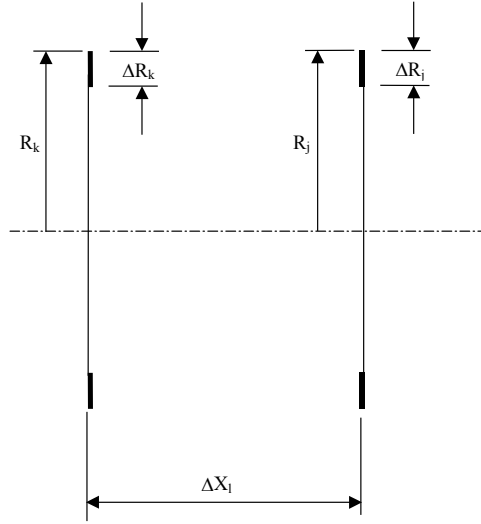


Figura 3.21 – Zonas de superfície radial [Sika J., 1991].

$$(\overline{s_1 s_2})_i = \sum_{j=1}^2 \xi_j \sum_{k=1}^2 \xi_k \overline{s_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) \quad (3.114)$$

onde R_j é o raio da superfície radial j , R_k é o raio da superfície radial k , ΔX_l é a distância entre as superfícies radiais j e k , sendo

$$\begin{aligned} \overline{s_1 s_2}_o(R_j, R_k, \Delta X_l) = & 2R_i R_j \Delta X_l^2 \int_0^{\pi} P \left[\frac{e^{\left(-a_i \sqrt{R^2 + \Delta X_l^2}\right)}}{(R^2 + \Delta X_l^2)^2} \right] d\beta \\ & + 2\pi R_{min}^2 \int_0^{tg^{-1}\left(\frac{|(R_j - R_i)|}{\Delta X_l}\right)} sen\beta \cos \beta e^{\left(\frac{-a_i \Delta X_l}{\cos \beta}\right)} d\beta \end{aligned} \quad (3.115)$$

A última combinação corresponde às zonas de superfície periférica e radial da Figura 3.22. A área de troca direta $(\overline{s_1 s_2})_i$, nesse caso, é

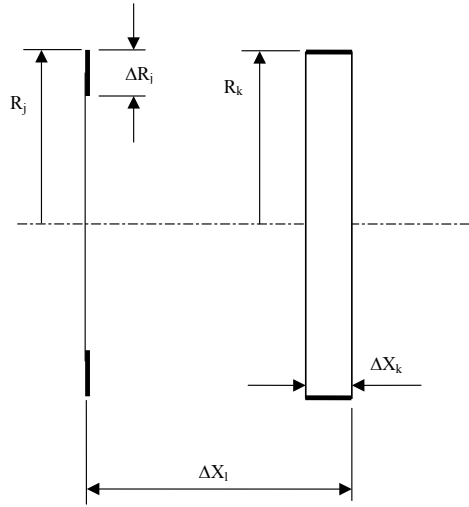


Figura 3.22 – Zonas de superfície radial e periférica [Sika J., 1991].

$$(\overline{s_1 s_2})_i = \sum_{k=1}^2 \xi_k \sum_{l=1}^2 \xi_l \overline{s_1 s_2}_o (R_j, R_k, \Delta X_l) \quad (3.116)$$

onde R_j é o raio da superfície radial j , R_k é o raio da superfície periférica k , ΔX_l é a distância entre estas superfícies, e

$$\begin{aligned} \overline{s_1 s_2}_o (R_j, R_k, \Delta X_l) &= R_j^3 R_k^3 \int_0^\pi U \left[\frac{e^{(-a_i R)}}{R^4} - \frac{e^{(-a_i \sqrt{R^2 + \Delta X_l^2})}}{(R^2 + \Delta X_l^2)^2} \right] d\beta \\ &+ \frac{2\pi R_j^2 R_k^2}{(R_j + R_k)^2} \int_0^{tg^{-1}\left(\frac{\Delta X_l}{R_j + R_k}\right)} \text{sen}\beta \cos\beta e^{\left(\frac{-a_i(R_j + R_k)}{\cos\beta}\right)} d\beta \end{aligned} \quad (3.117)$$

O parâmetro P das expressões anteriores é obtido de

$$\begin{aligned} P &= \left[R_j^2 \cos^{-1} \left(\frac{R_j - R_k \cos \beta}{R} \right) \right] \text{sen}\beta \\ &+ \left[R_k^2 \cos^{-1} \left(\frac{R_k - R_j \cos \beta}{R} \right) \right] \text{sen}\beta \\ &- [R_j R_k \text{sen}\beta] \text{sen}\beta \end{aligned} \quad (3.118)$$

onde para $R_j = R_k$

$$P = R_j^2 (\pi - \beta - \text{sen}\beta) \text{sen}\beta \quad (3.119)$$

O parâmetros U e R das expressões anteriores são:

$$U = (2\beta - \text{sen}2\beta) \text{sen}\beta \quad (3.120)$$

e

$$R = \sqrt{R_j^2 + R_k^2 - 2R_jR_k \cos \beta} \quad (3.121)$$

onde para $R_j = R_k$

$$R = 2\text{sen}\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (3.122)$$

Ainda os parâmetros ψ e R_{min} são:

$$\psi = \text{tg}^{-1}\left(\frac{\Delta X_l}{R}\right) \quad (3.123)$$

e

$$R_{min} = \min\{R_j, R_k\} \quad (3.124)$$

Na Tabela 3.2, são apresentados os argumentos das funções $\overline{g_1s_2})_o$, $\overline{g_1g_2})_o$ e $\overline{s_1s_2})_o$, bem como os coeficientes ζ .

Tabela 3.2 – Argumentos e coeficientes ζ das funções $\overline{g_1s_2})_o$, $\overline{g_1g_2})_o$ e $\overline{s_1s_2})_o$ [Sika J., 1991].

	j,k,l			
	1	2	3	4
R_j	R_1	$R_1 - \Delta R_1$	—	—
R_k	R_2	$R_2 - \Delta R_2$	—	—
ΔX_l	ΔX	$ \Delta X - \Delta X_1 $	$ \Delta X - \Delta X_2 $	$ \Delta X - \Delta X_1 - \Delta X_2 $
$\zeta_j\zeta_l\zeta_k$	+1	—1	—1	+1

Como pode ser observado, as expressões para o cálculo das áreas de troca direta são muito complexas e exigem esforço computacional intenso, principalmente se houver um

número elevado de zonas no cilindro. Além disso os cálculos devem ser repetidos para cada um dos três gases cinzas que compõem o gás oriundo da combustão. Um modo de reduzir os cálculos é pelo emprego de zonas de largura ΔX uniforme, situação usada neste trabalho.

CAPÍTULO 4

MÉTODO NUMÉRICO

Apresenta-se neste capítulo uma descrição do método numérico utilizado para resolver o conjunto de equações que descreve o processo de combustão turbulenta. O Método dos Volumes Finitos [Patankar, 1980; Versteeg e Malalasekera, 1995; Ferziger e Perić, 1997; Maliska, 2003] é aplicado para integrar as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, além da conservação de energia e de espécies químicas para os modelos SCRS – *Simple Chemically-Reacting System*, e E-A – *Eddy Breakup-Arrhenius*. Estas equações já foram apresentadas no Capítulo 2 e correspondem às Equações (2.152), (2.154), (2.157), (2.160), (2.167), (2.170), (2.162), (2.163), (2.164) e (2.165). Neste capítulo também é apresentado o detalhamento da discretização e da implementação das equações que modelam a transferência de calor por radiação. Estas equações também foram apresentadas no Capítulo 3 e compreendem as Equações (3.83) e (3.101), juntamente com as equações que determinam as áreas de troca direta, Equações (3.106), (3.108), (3.110), (3.112), (3.114) e (3.116).

4.1 O Esquema Numérico

Para a aplicação do esquema numérico é conveniente escrever as Equações (2.152), (2.154), (2.157), (2.160), (2.167), (2.170), (2.162), (2.163), (2.164) e (2.165) na forma de uma equação genérica. A forma generalizada da equação de conservação de uma variável genérica ϕ , em regime permanente, é:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \bar{\phi} \vec{V}) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \bar{\phi}) + \bar{S}^{\phi} \quad (4.1)$$

ou, em coordenadas cilíndricas axissimétricas,

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho \bar{u} \bar{\phi}) + \frac{\partial}{\partial r} (\rho \bar{v} \bar{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \right) \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial r} \right) \right) + \bar{S}^{\phi} \quad (4.2)$$

onde ϕ representa um campo de variáveis (entalpia, concentração, velocidade, energia cinética turbulenta e sua dissipação). O termo Γ é o coeficiente difusivo, que assume valores específicos para cada caso. Da mesma forma o termo fonte genérico médio, $\bar{S}^{\phi}$, se apresenta de forma diferenciada para cada equação. Para as equações de conservação de quantidade de movimento axial, radial e angular estes termos são representados pelas Equações (2.155), (2.158) e (2.161), respectivamente. Os termos fontes das equações de conservação de energia cinética turbulenta e de dissipação da energia cinética turbulenta são representados pelas Equações (2.168) e (2.171). Para o modelo SCRS a equação de conservação de espécies químicas não apresenta termo fonte, devido a uma transformação de variáveis. O termo fonte da equação de conservação de energia do modelo SCRS é $\bar{S}_{rad}$, já que com uma manipulação algébrica das equações diferenciais a entalpia total fica implícita. O termo fonte $\bar{S}_{rad}$ é modelado pelas Equações (3.83) e (3.101). No modelo E-A o termo fonte da equação de conservação de espécies químicas é obtido a partir do cálculo do valor de $\bar{R}_{\alpha}$, utilizando as Equações (2.63), (2.66), e (2.68). O termo fonte da equação de conservação de energia do modelo E-A é composto pelos termos médios $\bar{S}_{rad}$, da mesma forma que para o modelo SCRS, e por $\bar{S}_{rea}$ que é obtido a partir das taxas de reações químicas globais, Equação (2.75).

A equação (4.2) é integrada no espaço para cada volume de controle, conforme as especificidades da variável ϕ que está sendo resolvida.

A Figura 4.1 mostra o esquema de um volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional, em coordenadas cilíndricas axissimétricas.

Definindo o fluxo total médio da variável genérica como:

$$\bar{J} = (\text{Fluxo advectivo de } \bar{\phi}) + (\text{Fluxo difusivo de } \bar{\phi}) \quad (4.3)$$

assim os fluxos médios nas respectivas direções são:

$$\bar{J}_x = \rho \bar{u} \bar{\phi} - \Gamma \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \quad (4.4)$$

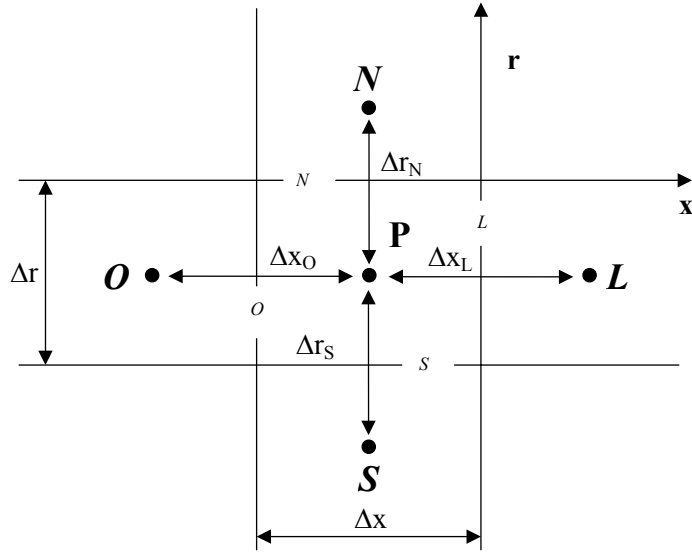


Figura 4.1 – Volume de controle genérico e seus vizinhos para situação bidimensional.

e

$$\overline{J_r} = \rho \bar{v} \bar{\phi} - \Gamma \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial r} \quad (4.5)$$

A Equação (4.2) pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\overline{J_x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\overline{J_r} r) - \overline{\dot{S}^\phi} = 0 \quad (4.6)$$

e integrando no volume de controle genérico

$$\int_n^s \int_l^o \left(\frac{\partial}{\partial x} (\overline{J_x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\overline{J_r} r) - \overline{S^\phi} \right) dx dr = 0 \quad (4.7)$$

sendo que na fronteira dos volumes adota-se a média harmônica para tratar os coeficientes difusivos das equações, e para o tratamento dos termos advectivos é adotada a função de interpolação *Power Law*, conforme Patankar [1980]. Como resultado obtém-se uma equação algébrica da seguinte forma:

$$a_P \phi_P = a_L \phi_L + a_O \phi_O + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (4.8)$$

Os coeficientes a 's são definidos como

$$a_L = \{D_{x,l}A(|P|) + \max[-F_{x,l}, 0]\} \Delta r \quad (4.9)$$

$$a_O = \{D_{x,o}A(|P|) + \max[-F_{x,o}, 0]\} \Delta r \quad (4.10)$$

$$a_N = \{D_{r,n}A(|P|) + \max[-F_{r,n}, 0]\} \Delta x \quad (4.11)$$

$$a_S = \{D_{r,s}A(|P|) + \max[-F_{r,s}, 0]\} \Delta x \quad (4.12)$$

e

$$a_P = a_L + a_O + a_N + a_S \quad (4.13)$$

onde os coeficientes D 's são

$$D_{x,l} = \frac{\Gamma_l}{\Delta x_l} \quad (4.14)$$

$$D_{x,o} = \frac{\Gamma_o}{\Delta x_o} \quad (4.15)$$

$$D_{r,n} = \frac{\Gamma_n}{\Delta r_n} \quad (4.16)$$

e

$$D_{r,s} = \frac{\Gamma_s}{\Delta r_s} \quad (4.17)$$

Os coeficientes F 's são

$$F_{x,l} = \rho u_l \quad (4.18)$$

$$F_{x,o} = \rho u_o \quad (4.19)$$

$$F_{r,s} = \rho v_s \quad (4.20)$$

$$F_{r,n} = \rho v_n \quad (4.21)$$

O termo P das Equações (4.9), (4.10), (4.11) e (4.12) é determinado da seguinte forma

$$P = \frac{F}{D} \quad (4.22)$$

Nos termos $A(|P|)$ das Equações (4.9), (4.10), (4.11) e (4.12) são inseridas as funções de interpolação que, no caso da *Power Law*, pode ser escrita para qualquer valor de P ,

$$\max [0, (1 - 0,1 |P|)^5] \quad (4.23)$$

função esta que tem um comportamento muito semelhante à solução exata da equação genérica para uma dimensão, em uma dimensão.

Para a solução do problema em questão o coeficiente a_P recebe tratamento específico, dependendo da equação que está sendo resolvida, enquanto que no termo b são inseridos os termos fontes $\overline{\dot{S}^u}$, $\overline{\dot{S}^v}$, $\overline{\dot{S}^\theta}$, $\overline{\dot{S}^h}$, $\overline{\dot{S}^\alpha}$, $\overline{\dot{S}^k}$ e $\overline{\dot{S}^\epsilon}$ já apresetados no Capítulo 2.

O algoritmo SIMPLE, *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*, é utilizado para realizar o acoplamento entre a pressão e a velocidade [Patankar, 1980].

O sistema de equações algébricas que descreve o problema foi resolvido usando o TDMA, *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*, linha por linha, fazendo ainda uso da técnica de correção em bloco, com exceção da energia cinética turbulenta e sua dissipação [Patankar, 1980]. Tanto o SIMPLE, quanto a função de interpolação *Power Law* foram usadas pelo fato de já estarem implementadas no algoritmo de propósitos gerais de Patankar, que foi usado nesta tese.

4.2 Detalhes da Implementação da Modelagem

Partiu-se do algoritmo de propósitos gerais de Patankar, alterando as rotinas de determinação das condições de contorno e propriedades termofísicas, além da adição dos termos fonte das equações apresentadas no Capítulo 2. Para estas equações, que descrevem o processo de combustão turbulenta sem a presença das forças de corpo, o coeficiente difusivo, a variável genérica ϕ e os termos fontes, para o modelo SCRS são mostrados na Tabela 4.1.

Todas as equações são resolvidas de forma acoplada a cada iteração executada pelo programa. A ordem de solução das equações é a que está apresentada na Tabela 4.1, onde

na posição NF igual a três é resolvida a correção da pressão. Esta equação é resolvida até que o programa atinja a convergência. Logo após a função de corrente assume esta posição.

Tabela 4.1 – Identificação da variável genérica ϕ , coeficiente difusivo, e termos fontes das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta, usando o modelo SCRS.

NF	ϕ	Γ	$\overline{\dot{S}\phi}$
1	$\bar{u}$	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)$
2	$\bar{v}$	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r}$
4	$\bar{h}$	$\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right)$	$\overline{S_{rad}}$
5	$\overline{r\bar{w}}$	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{2(\mu + \mu_t)}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w})$
6	k	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right)$	$\left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] - \rho \epsilon$
7	ϵ	$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right)$	$C_{1,\epsilon} \left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] \frac{\epsilon}{k} - C_{2,\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k}$
8	$\overline{f_{fx}}$	$(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	—

O mesmo procedimento se aplica para o modelo E-A. A Tabela 4.2 mostra o coeficiente difusivo, a variável genérica e os termos fontes, também sem a presença de forças de corpo, para o modelo E-A. Os termos fontes destas equações foram, quando necessário, discretizados em diferenças finitas e implementados segundo a técnica de linearização apresentada por Patankar [1980].

O calor específico da mistura, usado na obtenção da temperatura, é determinado conforme a Equação (2.73), onde o calor específico de cada componente é uma função também da temperatura, em Kelvin. As equações para a determinação do calor específico das espécies químicas envolvidas na reação química do metano foram obtidas de Van Wylen et al. [1998];

$$c_{p,CH_4} = -160,82 + 105,1 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{0,25} - 5,9452 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{0,75} + 77,408 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-0,5} \quad (4.24)$$

$$c_{p,O_2} = 8,9465 + 4,8044 \times 10^{-3} \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{1,5} - 42,679 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-1,5D0} + 56,615 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-2} \quad (4.25)$$

Tabela 4.2 – Identificação da variável genérica ϕ , coeficiente difusivo, e termos fontes das equações de conservação que modelam o processo de combustão turbulenta, usando o modelo E-A.

NF	ϕ	Γ	$\overline{\dot{S}\phi}$
1	$\bar{u}$	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)$
2	$\bar{v}$	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{\partial p^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_t \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{(\mu + \mu_t) \bar{v}}{r^2} + \frac{\rho \bar{w}^2}{r}$
4	$\bar{h}$	$(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	$\overline{S_{rad}} + \sum_{\alpha} \left[\frac{h_{\alpha}^0}{MM_{\alpha}} + \int_{\bar{T}_{ref,\alpha}}^{\bar{T}_{ref}} c_{p,\alpha} d\bar{T} \right] \overline{R_{\alpha}}$
5	$\bar{r}\bar{w}$	$(\mu + \mu_t)$	$-\frac{2(\mu + \mu_t)}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{w})$
6	k	$(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k})$	$\left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] - \rho \epsilon$
7	ϵ	$(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\epsilon}})$	$C_{1,\epsilon} \left[\mu_t \left(2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\bar{v}}{r} \right)^2 \right) \right] \frac{\epsilon}{k} - C_{2,\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k}$
8	CH_4	$(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	$\overline{R_{CH_4}}$
9	O_2	$(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	$\overline{R_{O_2}}$
10	CO_2	$(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	$\overline{R_{CO_2}}$
11	CO	$(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	$\overline{R_{CO}}$
12	H_2O	$(\rho D + \frac{\mu_t}{\sigma_t})$	$\overline{R_{H_2O}}$

$$c_{p,N_2} = 9,335 - 122,56 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right) + 256,38 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-2} - 196,08 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-3} \quad (4.26)$$

$$c_{p,CO_2} = -0,89286 + 7,2967 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{0,5} - 0,98074 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right) + 5,7835 \times 10^{-3} \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^2 \quad (4.27)$$

$$c_{p,H_2O} = 34,19 - 43,868 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{0,25} + 19,778 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{0,5} - 0,88407 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right) \quad (4.28)$$

e

$$c_{p,CO} = 16,526 - 0,16841 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{0,75} - 47,985 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-0,5} + 42,246 \left(\frac{\bar{T}}{100} \right)^{-0,755} \quad (4.29)$$

Nestas equações a unidade resultante é $cal/mol K$, sendo necessária a conversão para $J/kg K$.

O calor específico é uma propriedade volumétrica e portanto a aplicação de média harmônica sobre esta propriedade não é um procedimento adequado. Deste modo utiliza-se $\frac{\mu}{P_r}$ no lugar de $\frac{\kappa}{c_p}$ para o coeficiente de difusão da equação de conservação de energia, que é calculado através de média harmônica, conforme já mencionado. Com isso assume-se c_p constante na equação de conservação de energia. Isso não causa maiores problemas já que o coeficiente de difusão turbulenta, $\frac{\mu_t}{\sigma_t}$, é muito maior do que $\frac{\mu}{P_r}$. As equações acima são usadas para a determinação da temperatura, e também para a determinação do termo fonte da equação de conservação de energia referente às reações químicas, $\overline{S_{rea}}$. Este termo considera, além das entalpias de formação de cada espécie química, também o calor sensível devido ao aumento da temperatura. Este aumento de temperatura é computado através da integração das Equações (4.24) a (4.29) nos limites inferior, de 298,15 K, e superior obtido da temperatura local dos gases.

Para a determinação da temperatura utiliza-se um esquema explícito a partir da entalpia da mistura (Equação (2.71)) e do calor específico da mistura, Equação (2.73), de forma conjunta com as Equações (4.24) a (4.29). Sendo assim, com a magnitude da entalpia na iteração atual e o calor específico da mistura na iteração anterior, obtém-se a temperatura em cada volume de controle.

A determinação das taxas de reações químicas no modelo E-A, $\overline{R_\alpha}$, conforme já mencionado no Capítulo 2 (Equação (2.45)), é feita através da solução das Equações (Equações (2.63), (2.66) e (2.68)) para todas as espécies químicas envolvidas. De posse dos resultados faz-se uma análise, optando pelo menor valor obtido, e utiliza-se a equação que fornece este resultado para o cálculo. Este procedimento também é feito de forma explícita a cada iteração, até a convergência, sendo que a temperatura e as concentrações usadas também são as da iteração anterior. No modelo SCRS não são calculadas as taxas de reações químicas.

4.2.1 Implementação do Modelo de Radiação Térmica

Na implementação do cálculo do termo fonte da equação de conservação de energia devido à radiação térmica, $\overline{S_{rad}}$, foi utilizado o Método das Zonas acoplado ao modelo WSGGM. Cada volume de controle do domínio de cálculo, ou seja, da malha computacional corresponde a uma zona de temperatura constante, onde são levadas em consideração as trocas térmicas entre todos os volumes de controle de gás e os volumes de controle de su-

perfícies. Apenas a taxa líquida de transferência de calor por radiação é computada no termo fonte. Uma subrotina de cálculo foi desenvolvida para a determinação deste termo. Para a determinação de $\overline{S_{rad}}$ esta subrotina necessita apenas de parâmetros da malha (dimensões) e da temperatura para cada volume de controle. O cálculo deste termo fonte também é resolvido de forma explícita, utilizando os dados da temperatura obtida na iteração anterior. Utiliza-se esta técnica devido à não linearidade dos termos de quarta ordem presentes nas equações de radiação térmica.

Para a utilização do Método das Zonas é necessário o conhecimento das áreas de fluxo direcionado. Estas áreas são representadas, para caso de um cilindro e meio participante (Figura 3.16), pelas Equações (3.106), (3.108), (3.110), (3.112), (3.114) e (3.116). Estas equações foram implementadas utilizando-se o Método de Quadratura Gaussiana, com 10 pontos, segundo França [1995]. O resultado desta implementação são funções dependentes dos coeficientes de absorção do gás (a_i) e das características geométricas dos volumes de controle, de superfície e de gás. Estas equações são resolvidas para quatro valores diferentes do coeficiente de absorção. Estes valores já foram apresentados na Tabela 3.1.

Para tornar mais precisos os valores fornecidos pelas funções que determinam as áreas de troca direta, fatores de correção foram determinados a partir do balanço global de energia, Seção 3.6, Capítulo 3. Para volumes de controle de gás os fatores de correção são:

$$f g_{i,j} = \frac{4a_i \mathcal{V}}{\sum_{k,l} g_{ij} \vec{g}_{k,l} + \sum_{k,l} g_{ij} \vec{s}_k + \sum_k g_{ij} \vec{r}_k} \quad (4.30)$$

Para volumes de controle de superfície:

$$f s_j = \frac{A}{\sum_{kl} s_j \vec{g}_{k,l} + \sum_k s_j \vec{s}_k + \sum_k s_j \vec{r}_k} \quad (4.31)$$

Estes fatores de correção multiplicam as áreas de troca direta apresentadas no Capítulo 3, tornando os valores mais precisos.

Como no modelo WSGGM leva-se em conta quatro coeficientes de absorção, as equações acima são calculadas também quatro vezes, uma para cada coeficiente (coeficientes de absorção a_0 , a_1 , a_2 e a_3 , para uma mistura de CO_2 , H_2O e N_2 nas pressões parciais de 0,1 atm, 0,2 atm e 0,7 atm, respectivamente, conforme mostra a Tabela 3.1). Fazendo uma análise do valor obtido para as áreas de troca direta, a partir destes coeficientes, verifica-se

que as mesmas apresentam erros de ordem de grandeza inferior a 2 % para os coeficientes a_0 , a_1 e a_2 . Para o coeficiente a_3 , que possui valor mais elevado, este erro se torna maior principalmente entre as zonas mais distantes, próximo de 20 %, sendo que para esta situação são desconsideradas as áreas de fluxo direcionado. Isso não implica em maiores erros na solução do problema, pois são os valores obtidos entre as zonas mais próximas que fornecem os resultados mais significativos em termos de magnitude. Uma rotina de análise numérica foi desenvolvida para avaliar a magnitude dos valores destas áreas e realizar este procedimento, onde as áreas de fluxo direcionado são calculadas e analisadas, e quando o valor obtido é muito pequeno, comparado com valor máximo, este é assumido como zero.

Com as devidas correções nas áreas de fluxo direcionado, Equações (3.69), (3.80), (3.90) e (3.95), Seção 3.5, as Equações (3.83) e (3.101) são resolvidas e o resultado é computado no termo fonte de cada volume de controle. Para as zonas de superfície são realizados balanços de energia, levando em conta a convecção entre os gases e estas superfícies, além do fluxo de calor para o exterior da câmara, quando este está presente. Deste modo

$$Q_{rad} + Q_{adv} + Q_{conv} = 0 \quad (4.32)$$

onde Q_{conv} é o fluxo de calor por convecção entre os gases quentes e as paredes da câmara, Q_{adv} é o fluxo de calor por advecção entre as paredes e o exterior da câmara e Q_{rad} é o fluxo de calor por radiação entre os gases quentes e as paredes da câmara. Quando se assume isolamento térmico ou temperatura prescrita na parede da câmara, Q_{adv} é zero.

Abrindo os termos da Equação (4.32) para as paredes radiais da câmara de combustão, e considerando que a câmara esteja imersa em água, tem-se

$$\bar{T}_p = \left[\left(\overline{S_{rad}} + \frac{\kappa}{\Delta l} \bar{T} \right) + \frac{T_{inf}}{\left(\frac{1}{h_{inf}} + \frac{e}{\kappa_{Fe}} \right)} \right] \left[\frac{\kappa}{\Delta l} + \frac{1}{\left(\frac{1}{h_{inf}} + \frac{e}{\kappa_{Fe}} \right)} \right]^{-1} \quad (4.33)$$

onde $\bar{T}_p$ e e são, respectivamente, a temperatura e a espessura da parede de aço da câmara de combustão, e Δl é a distância entre a parede e o primeiro volume de controle interno da câmara.

As radiosidades das superfícies são calculadas através de um cálculo iterativo, do tipo *Gauss Seidel*, dentro de uma mesma iteração. Também uma subrotina foi desenvolvida para realizar estes cálculos.

4.3 Teste de Independência de Malha

Foram realizados testes de independência de malha a fim de verificar o número de volumes sugerido por Magel et al. [1996a], e Nieckele et al. [2002]. Nestes trabalhos são usados 30 volumes na direção radial e 60 volumes na direção axial, para a simulação da câmara de combustão cilíndrica analisada no caso de teste do *First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, organizado pela ERCORTAC – *European Research Community On Flow Turbulence And Combustion*, em outubro de 1994 [Garréton e Simonin, 1994]. Foram realizados testes com 15 por 30 volumes, 20 por 45 volumes, 25 por 50 volumes, 30 por 60 volumes e 35 por 70 volumes nas direções radial e axial, respectivamente. Para verificar os resultados apresentados com as diferentes malhas, devido à questão de tempo computacional excessivo, não se considerou a presença de trocas de calor por radiação térmica. As Figuras 4.2 e 4.3 mostram os resultados do perfil de temperatura ao longo do raio da câmara para as posições axiais de 0,313 m e 1,313 m da entrada, respectivamente. Verifica-se que os resultados são praticamente os mesmos a partir da malha de 30 por 60 volumes, comprovando que a malha sugerida, de 30 por 60 volumes, é suficientemente boa.

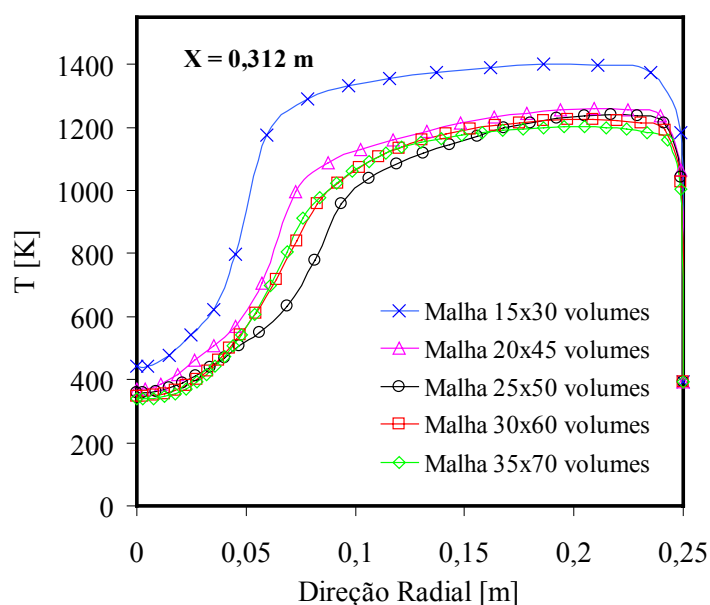


Figura 4.2 – Teste de independência de malha: Perfis de temperaturas ao longo do raio da câmara para a posição axial de 0,313 m da entrada, utilizando diferentes malhas.

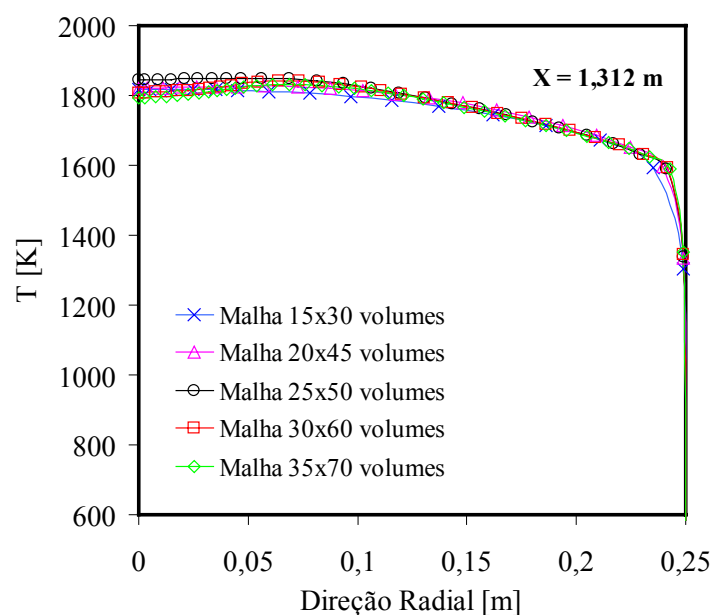


Figura 4.3 – Teste de independência de malha: Perfis de temperaturas ao longo do raio da câmara para a posição axial de 1,313 m da entrada, utilizando diferentes malhas.

Refinamentos de malha na direção radial são aplicados na região que compreende o queimador e o bocal de saída. Junto à parede também é aplicado refinamento de malha a fim de capturar possíveis efeitos da camada limite. Maiores detalhes destes refinamentos usados na malha podem ser encontrados no Capítulo 5.

CAPÍTULO 5

VALIDAÇÃO DA MODELAGEM MATEMÁTICA

No Capítulo 2 as equações de conservação foram utilizadas para modelar o processo de combustão levando em conta equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. Para simular a turbulência foi adotado o modelo k - ϵ padrão. Dois modelos de combustão foram utilizados; o modelo de reações químicas instantâneas, SCRS –*Simple Chemically-Reacting System* [Spalding, 1979], e o modelo de taxas finitas de reações químicas, E-A –*Eddy-Breakup Arrhenius* [Spalding, 1971; Magnussen e Hjertager, 1977; Kuo, 1986; Turns, 2000]. No Capítulo 3, completando a modelagem de processos de combustão, foi apresentado o modelo de transferência de calor por radiação. Emprega-se o Método das Zonas e o Modelo da Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) para a determinação das áreas de troca direta, e a taxa líquida de transferência de calor por radiação.

No presente capítulo o problema físico a ser abordado para validação da modelagem é descrito e resolvido. Apresentam-se então a geometria do domínio, as condições de contorno, as propriedades termofísicas dos materiais envolvidos, e os detalhes da solução numérica utilizada, além da análise dos resultados obtidos com a presente modelagem.

Devido à dificuldade de realização de experimentos deste tipo, a validação dos resultados aqui apresentados será feita através da comparação com resultados obtidos na simulação de uma situação semelhante a apresentada na literatura.

5.1 O Problema Abordado

Utilizou-se a mesma câmara de combustão analisada por Magel et al. [1996a] e Magel et al. [1996b]. Esta câmara foi usada como caso de teste no *First Workshop on Aerodynam-*

ics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces, organizado pela ERCORTAC – *European Research Community On Flow Turbulence And Combustion*, em outubro de 1994 [Garréton e Simonin, 1994]. Nele são apresentados dados experimentais de temperatura e concentração de espécies químicas para várias posições no interior da câmara. Foram também utilizados os resultados de Nieckele et al. [2002], que faz uma análise numérica da mesma câmara. A geometria da câmara de combustão é cilíndrica, com comprimento de 1700 cm, e 50 cm de diâmetro, como mostra a Figura 5.1. Esta câmara de combustão é abastecida com gás natural (GN) através do bico injetor cilíndrico de um queimador situado na sua linha de simetria axial. O queimador abastece a câmara de combustão com as quantidades necessárias de ar e gás natural. Utilizou-se um excesso de combustível de 5%, resultando num fluxo mássico de combustível de 0,0125 kg/s com uma temperatura de 313,15 K, e num fluxo mássico de ar de 0,186 kg/s com uma temperatura de 323,15 K. O combustível entra na câmara de combustão através de um duto cilíndrico de 6 cm de diâmetro, e o ar por um anel adjacente com 2 cm de vão anular, externo à este duto. Para estes fluxos, as velocidades de injeção foram de aproximadamente 7,76 m/s e 36,29 m/s, para o combustível e para o ar, respectivamente. Neste problema não é calculada a velocidade angular média $\overline{r\omega}$. O número de Reynolds médio na região de entrada da câmara ficou em 17900, caracterizando escoamento turbulento.

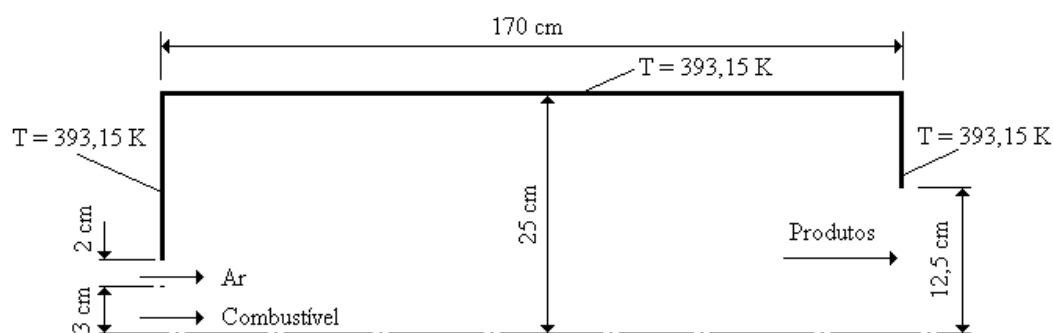


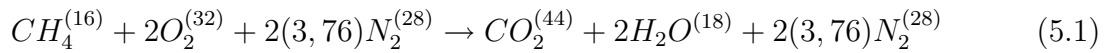
Figura 5.1 – Esboço em corte de uma câmara de combustão de um gerador de vapor (Garréton e Simonin, 1994).

Considera-se para o modelo E-A que a composição do ar de entrada seja de 23% de oxigênio (O_2), 76% de nitrogênio (N_2) e 1% de vapor d'água (H_2O). Para o modelo SCRS, onde o nitrogênio é assumido como o único componente dos produtos da combustão,

considera-se o ar de entrada como sendo composto de 23,15% de oxigênio e 76,85% de nitrogênio. Para ambos os modelos, assume-se o gás natural como sendo composto de 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio, conforme sugerido por Garréton e Simonin [1994], portanto livre de umidade. No Anexo A está apresentado uma comparação entre algumas propriedades do metano e do gás natural, mostrando que, sem maiores erros, é possível usar as propriedades do metano para representar o gás natural.

Considerando a axissimetria, assume-se o domínio de cálculo como sendo apenas uma fração angular representativa da câmara (1 radiano). Tanto o ventilador como os demais componentes externos à câmara de combustão não fazem parte do domínio de cálculo, mas são considerados na solução, já que fornecem as condições de entrada na câmara. Assume-se ainda que o processo de combustão ocorre em regime permanente, não levando-se em conta as condições iniciais de operação. A potência do queimador utilizado é de aproximadamente 400 kW. Para ambos os modelos são desprezadas as forças de empuxo devidas a variação de densidade. Esta hipótese é razoável pelo fato do escoamento ser principalmente governado pelas forças de inércia devido às altas velocidades impostas pelo queimador.

Para o modelo SCRS assume-se que a reação química ocorra instantaneamente, em uma única etapa. Deste modo

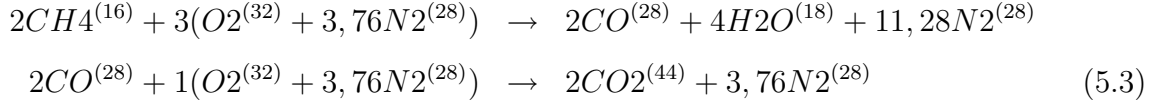


Na Equação (5.1), considerando o ar composto apenas de oxigênio e nitrogênio, pode-se observar a reação química de combustão estequiométrica para o metano, onde se consideram que o nitrogênio presente na reação se mantém inerte. Como o SCRS não é capaz de determinar as frações de dióxido de carbono e o vapor d'água da reação acima, e ainda considerando que o principal componente dos produtos da combustão seja o nitrogênio, já que o mesmo existe em maior proporção, assume-se a mistura de gases como sendo

$$\text{Mistura} = \text{CH}_4 + \text{O}_2 + \text{N}_2 \quad (5.2)$$

No modelo E-A, que considera o processo de combustão governado por taxas finitas de reações químicas, duas situações são analisadas. A primeira assume que o processo de combustão ocorra em uma única etapa global, conforme a Equação (5.1), e a segunda con-

sidera duas etapas globais de reação química. Deste modo, a equação de reação química em duas etapas para o metano é



onde a Equação (5.1) mostra a reação em uma única etapa também para este modelo. Nenhum outro tipo de reação química, além das reações representadas pelas Equações (5.1) e (5.3), está sendo considerada neste trabalho. Deste modo, com o nitrogênio também inerte, tem-se a seguinte mistura

$$Mistura = CH_4 + O_2 + CO_2 + H_2O + N_2 \quad (5.4)$$

Da mesma forma para o caso de reação química em duas etapas,

$$Mistura = CH_4 + O_2 + CO_2 + H_2O + CO + N_2 \quad (5.5)$$

Verifica-se na Equação (5.3), reação química em duas etapas, que é possível capturar dois efeitos importantes do processo de combustão: propagação $\leftrightarrow$ terminação (primeira etapa da reação), e oxidação do CO (segunda reação).

O problema então é; dada a geometria da câmara, calcular a distribuição de temperaturas e de concentrações, além da análise do escoamento, para fins de comparação com resultados experimentais. O modelo $k-\epsilon$ simula a turbulência através do cálculo de uma viscosidade turbulenta μ_t , propriedade do escoamento. Em termos matemáticos isso vai requerer a solução das equações desenvolvidas nos Capítulos 2 e 3, para as quais é necessário definir as condições de contorno. Além disso as propriedades termofísicas do ar e do combustível são necessárias para o fechamento do problema.

5.2 Condições de Contorno

Nas paredes da câmara é imposta a condição de não deslizamento e impermeabilidade, sendo a viscosidade nestas regiões determinada através de funções de parede acopladas ao modelo de turbulência $k-\epsilon$ (ver Capítulo 2). Assume-se no eixo de simetria que a componente radial da velocidade é nula, e prescreve-se derivada nula para as componentes axial e angular

da velocidade. Este procedimento também é adotado para a energia cinética turbulenta e sua dissipação, temperatura (entalpia) e concentrações. As temperaturas das paredes da câmara de combustão são prescritas em 393,15 K , conforme Garréton e Simonin [1995].

Na seção de entrada considerou-se escoamento uniforme na direção axial, com perfil de concentração também uniforme em cada região de entrada (combustível e ar), segundo geometria do queimador. Considerou-se a energia cinética turbulenta $k = \frac{3}{2}(u_{in}I)^2$, onde I é a intensidade de turbulência. Para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta especificou-se $\epsilon = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}}k^{\frac{3}{2}}}{l}$, onde l é o comprimento característico da escala de turbulência. A intensidade de turbulência na entrada foi prescrita em 6% para o oxidante e em 10% para o combustível. Para a dissipação da energia cinética turbulenta prescreveu-se o comprimento característico de 0,04 m para o oxidante e de 0,03 m para o combustível. Estes valores foram obtidos de Nieckele et al. [2002]. Nas paredes da câmara assume-se valor zero para a energia cinética turbulenta, e prescreve-se sua dissipação fazendo $\epsilon = \frac{C_\mu k^{1,5}}{0,4C_\mu^{0,25}}$, onde o valor de k é tomado do primeiro volume de controle interno da câmara, resultado do problema.

Assume-se que na saída da câmara de combustão as distribuições de energia cinética turbulenta e de sua dissipação, as distribuições de temperaturas e de concentrações, assim como a componente de velocidade radial v , e angular rw sejam localmente parabólicas. Segundo Garréton e Simonin [1994] deve-se assumir a emissividade das paredes igual a 0,6. Da mesma forma, a emissividade dos gases na entrada e saída da câmara foi definida como sendo igual a 1,0. Para o cálculo das trocas de calor por radiação nos gases de saída da câmara considerou-se a temperatura da mistura. Esta temperatura pode ser calculada da seguinte forma,

$$\bar{T}_{bulk} = \frac{\int \rho \bar{u} \bar{T} c_p}{\int \rho \bar{u} c_p} \quad (5.6)$$

onde $\bar{T}_{bulk}$ é a temperatura da mistura, e c_p é o calor específico da mistura a pressão constante.

Para determinar a condição de contorno da velocidade axial $\bar{u}$, a jusante da saída da câmara, o perfil de velocidades foi calculado de modo a conservar a massa e evitar contra-fluxos. Deste modo, é determinado um coeficiente de correção, ADD , que é adicionado à velocidade axial do volume imediatamente anterior ao volume de saída da câmara, $\bar{u}_{ant}$. Este coeficiente é determinado através da integração dos fluxos de massa ao longo da superfície

de saída da câmara. Deste modo obtém-se a seguinte relação

$$\sum_{i=1}^{R_{bocal}} \rho_{sai}(i) \bar{u}_{sai}(i) A_{sai}(i) = ADD \sum_{i=1}^{R_{bocal}} \rho_{ant}(i) \bar{u}_{ant}(i) A_{ant}(i) \quad (5.7)$$

onde R_{bocal} é o raio do bocal de saída da câmara de combustão, A_{sai} é a área transversal do volume de saída da câmara, A_{ant} é a área transversal do volume imediatamente anterior ao volume de saída da câmara, $\bar{u}_{sai}$ é a velocidade axial no volume de saída da câmara, ρ_{sai} é a massa específica da mistura dos gases na saída da câmara e ρ_{ant} é a massa específica desta mistura na região imediatamente anterior à saída da câmara.

Respeitando a equação de conservação de massa,

$$\sum_{i=1}^{R_{bocal}} \rho_{sai}(i) \bar{u}_{sai}(i) A_{sai}(i) = \sum_{i=1}^{R_{dif}} \rho_{entra}(i) \bar{u}_{entra}(i) A_{entra}(i) \quad (5.8)$$

onde, R_{dif} raio do queimador que abastece a câmara combustão, A_{entra} é a área transversal do volume de entrada da câmara, $\bar{u}_{entra}$ é a velocidade na entrada da câmara e ρ_{entra} é a massa específica da mistura dos gases na entrada da câmara. Substituindo a Equação (5.8) na Equação (5.7) pode-se, de forma acoplada, determinar o fator ADD . Deste modo

$$ADD = \frac{\sum_{i=1}^{R_{dif}} \rho_{entra}(i) \bar{u}_{entra}(i) A_{entra}(i)}{\sum_{i=1}^{R_{bocal}} \rho_{ant}(i) \bar{u}_{ant}(i) A_{ant}(i)} \quad (5.9)$$

Ainda, para evitar possíveis contra-fluxos com temperatura desconhecida devido à recirculações na região de saída da câmara, deve-se corrigir o fator ADD , multiplicando a velocidade $\bar{u}_{ant}$, da equação acima, pelo módulo da menor velocidade desta região.

5.3 Propriedades Termofísicas

Nesta seção são apresentadas todas as constantes e propriedades termofísicas utilizadas na solução do problema. Para as constantes presentes nas equações, e propriedades termofísicas dos gases envolvidos, os valores foram compiladas de várias fontes e estão apresentados na Tabela 5.1. Dentre as propriedades utilizadas, assume-se que a viscosidade absoluta da mistura e a condutividade térmica da mistura sejam constantes, com os seguintes valores: $\mu = 2,97 \times 10^{-5} \text{ Ns/m}^2$, e $\kappa = 0,0454 \text{ W/(mK)}$.

A regra de mistura para a difusão de massa multicomponente é baseada na hipótese de mistura diluída, sendo o coeficiente de difusão igual ao coeficiente de difusão do nitrogênio, $D = 2,88 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. Considera-se que todas as propriedades termofísicas presentes no

Tabela 5.1 – Propriedades termofísicas [Diversas fontes].

Propriedades	Magnitude	Propriedades	Magnitude
$\overline{MM}_{CO}$ (kg/kmol)	28	$\overline{MM}_{O_2}$ (kg/kmol)	32
$\overline{MM}_{comb}$ (kg/kmol)	16	$\overline{MM}_{N_2}$ (kg/kmol)	28
$\overline{MM}_{CO_2}$ (kg/kmol)	44	$\overline{MM}_{H_2O}$ (kg/kmol)	18
κ (W/mK)	$45,4 \times 10^{-3}$	D (m ² /s)	$2,88 \times 10^{-5}$
α (m ² /s)	$73,9 \times 10^{-6}$	μ (Ns/m ²)	$2,97 \times 10^{-5}$
$\overline{R}$ (kJ/kmolK)	8,3145	H^{comb} (J/kg)	$3,4 \times 10^7$
ε_{Fe} (-)	0,6	$C_{1,\epsilon}$ (-)	1,44
$C_{2,\epsilon}$ (-)	1,92	C_μ (-)	0,09
σ_k (-)	1,0	σ_ϵ (-)	1,3
Λ (-)	0,4	Ψ (-)	5,5
$(\mu/\rho)(\kappa/c_p\rho)^{-1} = \text{Pr}$ (-)	0,719	$(\mu/\rho)(D)^{-1} = \text{Sc}$ (-)	0,997
$h_{CH_4}^0$ (J/kg)	$7,49 \times 10^7$	$h_{O_2}^0$ (J/kg)	0
$h_{CO_2}^0$ (J/kg)	$3,94 \times 10^8$	$h_{N_2}^0$ (J/kg)	0
$h_{H_2O}^0$ (J/kg)	$2,42 \times 10^8$	h_{CO}^0 (J/kg)	$1,11 \times 10^8$
K_1 (-)	4	K_2 (-)	0,5
$\sigma_t = \text{Pr}_t$ (-)	0,9	$\sigma_t = \text{Sc}_t$ (-)	0,9
$Le = \text{Sc}_t/\text{Pr}_t$ (-)	1	ν (m ² /s)	$51,8 \times 10^{-6}$

problema sejam mantidas constantes, para cada substância, com exceção do calor específico dos gases usado para a obtenção da temperatura (CH₄, O₂, H₂O, CO₂, CO e N₂).

Na Tabela 5.2 são listados os valores do calor específico a pressão constante, como função da temperatura obtidos a partir das equações integrais retiradas de Van Wylen et al. [1998] e apresentadas na Seção 4.2, Capítulo 4. O calor específico da mistura foi obtido a partir de uma média ponderada nas frações em massa de cada espécie, conforme Equação (2.73).

Tabela 5.2 – Calor específico à pressão constante como função da temperatura em J/kgK [Van Wylen et al., 1998].

Temperatura [K]	c_{p,CH_4}	c_{p,O_2}	c_{p,N_2}	c_{p,H_2O}	c_{p,CO_2}
300	2226	914	1045	1858	846
600	3256	1005	1075	2020	1075
1000	4475	1084	1164	2275	1234
1500	5408	1360	1239	2601	1326
2000	5904	1175	1283	2833	1371
2500	6165	1215	1314	2996	1397

Na Tabela 5.3 estão compilados os parâmetros das equações de reações químicas para o modelo E-A.

Tabela 5.3 – Parâmetros das equações de reações químicas do modelo E-A [Turns, 2000; Nieckele et al., 2002]

Reação/Etapa	E_k	A_k	β_k	γ_{CH_4}	γ_{O_2}	γ_{CO}	γ_{CO_2}	γ_{H_2O}
Reação 1/Etapa 1	$1,0 \times 10^8$	$1,0 \times 10^{12}$	0	1	1	—	—	—
Reação 2/Etapa 1	$2,03 \times 10^8$	$2,8 \times 10^{12}$	0	-0,3	1,3	—	—	—
Reação 2/Etapa 2	$1,67 \times 10^8$	$2,91 \times 10^{15}$	0	—	0,25	1	—	—

Considera-se ainda, para ambos os casos, que o comportamento dos gases dentro da câmara de combustão apresente características de gás perfeito. Esta é uma boa aproximação, pois a pressão de operação é pouco superior à pressão atmosférica [Spalding, 1979].

5.4 Método Numérico

O sistema de equações diferenciais parciais constituindo-se da conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia, de espécies químicas, e do modelo de turbulência k - ϵ é elíptico, para as velocidades de interesse. Esquemas numéricos têm sido empregados, onde o domínio discretizado e as equações diferenciais são aproximadas por equações algébricas. No

presente trabalho, as equações diferenciais são integradas pelo Método dos Volumes Finitos, conforme descrito por Patankar [1980], Versteeg e Malalasekera [1995], Maliska [2003], e por Ferziger e Perić [1997], gerando um sistema de equações algébricas a ser resolvido. As equações de conservação de espécies químicas, de energia e de quantidade de movimento são acopladas com o modelo de turbulência k - ϵ . A forma generalizada da equação de conservação, Equação (4.1), foi apresentada no Capítulo 4.

Devido à não linearidade do sistema, são empregadas sub-relaxações para evitar divergência na solução. Para os resultados numéricos que estão presentes na Seção 5.5, os valores dos fatores de sub-relaxações usados na solução das equações de energia, de espécies químicas, de quantidade de movimento, de energia cinética turbulenta e de dissipação da energia cinética turbulenta foram de 0,1. Para o termo fonte de radiação, a fim de evitar a divergência da solução, foi utilizada uma subrelaxação de 0,01. Foi utilizado também um coeficiente de sub-relaxação para a correção da pressão, para a massa específica, para o termo fonte de reação química e para a viscosidade turbulenta, também de 0,1. O sistema de equações algébricas que descreve o problema foi resolvido usando o TDMA – *Tri-Diagonal Matrix Algorithm*, linha por linha, fazendo ainda uso da técnica de correção em bloco, com exceção da energia cinética turbulenta e sua dissipação.

O esquema *Power-Law* foi selecionado para avaliar os fluxos nas faces dos volumes de controle, sendo o acoplamento pressão-velocidade é realizado através do algoritmo SIMPLE – *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*, conforme Patankar [1980].

Os termos fonte das equações de conservação foram linearizados, e quando necessário discretizados em Diferenças Finitas.

Partiu-se do algoritmo de propósitos gerais de Patankar, alterando as rotinas de determinação das condições de contorno e propriedades termofísicas, além da adição dos termos fonte das equações apresentadas no Capítulo 2. O código foi escrito e implementado em Fortran 90. Também uma nova subrotina foi desenvolvida para a determinação da transferência de calor por radiação. Nesta subrotina são calculados os fatores de forma para uma cavidade cilíndrica com meio participante através do Método das Zonas, assim como as áreas de troca direta levando em conta o Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM). Esta subrotina fornece como resultado um termo fonte com unidades de W/m^3 , compatível com os demais termos da equação de energia implementada no programa

principal. Para o cálculo deste termo foram necessários parâmetros geométricos da malha, e as temperaturas na iteração anterior (cálculo explícito). As radiosidades das paredes da câmara foram determinadas iterativamente, nesta mesma subrotina.

Foram realizados testes de independência de malha, chegando-se a 30 volumes na direção radial, e 60 volumes na direção axial, da mesma forma que Nieckele et al. [2002] e Magel et al. [1996a]. Refinamentos radiais sobre a região de entrada e parede periférica da câmara foram também usados. Esta malha possibilitou um bom comportamento entre a qualidade da solução e o tempo computacional. Ela é mostrada parcialmente na Figura 5.2. Verifica-se na Figura 5.2, no canto superior esquerdo, um detalhe mostrando o refinamento no

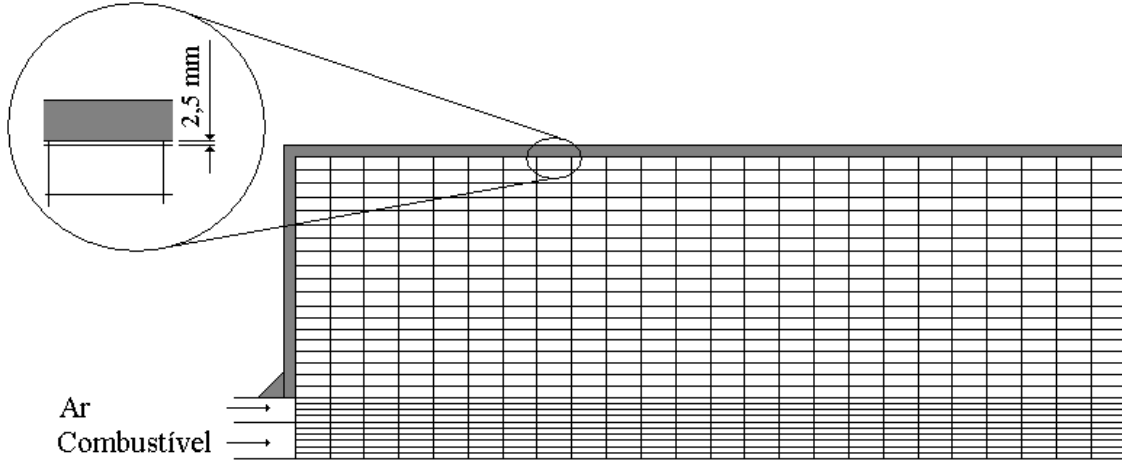


Figura 5.2 – Vista parcial em corte da malha bidimensional sobre a câmara de combustão (30x60) volumes.

último volume imediatamente anterior à parede. Este refinamento é aplicado para capturar os efeitos da camada limite que se forma sobre nesta região. Para determinar este refinamento utilizou-se a seguinte equação:

$$Y_p = \sqrt{\frac{\nu x_l}{\overline{u_\infty}}} \quad (5.10)$$

onde Y_p é a distância do centro do volume até a parede, x_l um comprimento característico e $\overline{u_\infty}$ a velocidade média do escoamento não perturbado, próximo à parede. Na Equação (5.10) a viscosidade cinemática é calculada como:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (5.11)$$

A parede mostrada na Figura 5.2 é apenas representativa não fazendo parte da solução do problema. Sua influência é computada apenas como condição de contorno.

As soluções foram consideradas convergidas quando o somatório dos resíduos normalizados de todas as equações foram inferiores a 10^{-9} , e os resíduos normalizados da entalpia inferiores a 10^{-7} .

5.5 Resultados

São apresentados resultados comparativos com dados obtidos na literatura para campos de temperatura, assim como perfis axiais de temperatura e concentrações de espécies químicas sobre a linha de centro da câmara, além de algumas posições radiais ao longo da extensão desta câmara, de forma a descrever o comportamento do processo de combustão. A Figura 5.3 apresenta uma comparação da distribuição de temperatura dos gases no interior da câmara de combustão, obtida no presente trabalho para os modelos E-A, com uma e duas etapas de reação química global para o metano. Também é mostrado nesta figura o resultado para o modelo SCRS, com uma reação química instantânea global, e a obtida em um trabalho semelhante desenvolvido por Nieckele et al. [2002], que utilizam o modelo E-A com reação química em duas etapas globais, da mesma forma que um dos casos aqui apresentados, porém com o modelo DTRM (*Discrete Transfer Radiation Model*) para o cálculo da radiação térmica, ver Seção 3.4.3, o qual não calcula os fatores de forma para a determinação das taxas líquidas de transferência de calor por radiação. Na Figura 5.3-a estão apresentados os resultados obtidos por Nieckele et al. [2002]. A Figura 5.3-b apresenta os resultados obtidos com o presente trabalho para o modelo E-A, assumindo duas etapas globais de reação química para o metano. A Figura 5.3-c apresenta os resultados obtidos com o presente trabalho também para o modelo E-A, porém assumindo uma única etapa global de reação química para o metano. Na Figura 5.3-d, da mesma forma que nas anteriores, estão apresentados os resultados da distribuição de temperatura obtidos com o modelo SCRS.

Observando os resultados é possível verificar que em termos da magnitude das temperaturas todos os modelos apresentam aproximadamente os mesmos níveis, como temperatura máxima de aproximadamente 1750 K . Verifica-se também que o resultado mais próximo do resultado de Nieckele et al. [2002] é o da Figura 5.3-b, que utiliza a mesma modelagem para o processo de reação química de combustão. Observa-se também, em termos quali-

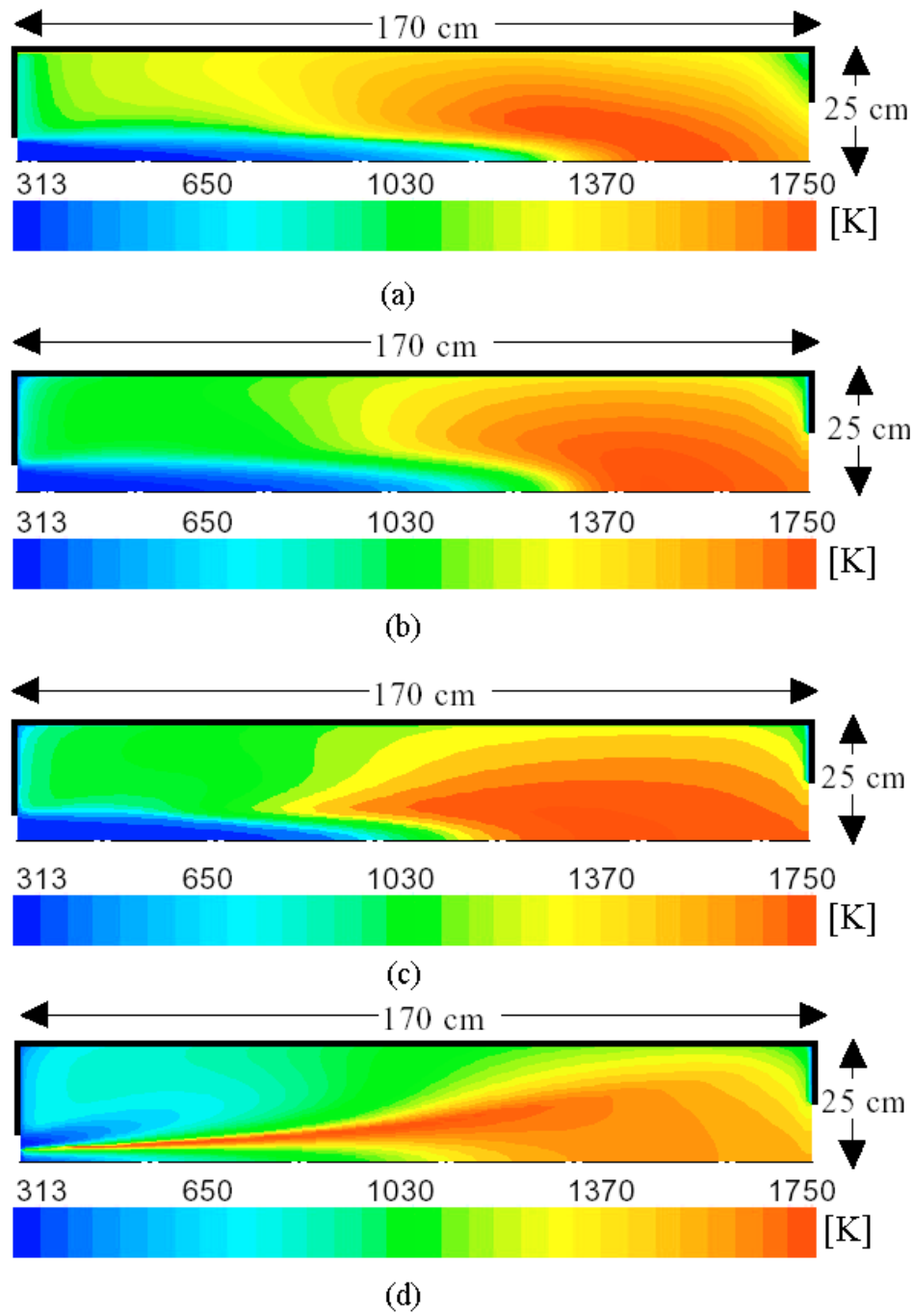


Figura 5.3 – Distribuição de temperatura sobre a câmara de combustão: (a) Modelo E-A com duas etapas de reação química - Nieckele et al. (2002); (b) Modelo E-A com duas etapas de reação química - presente trabalho; (c) Modelo E-A com uma etapa de reação química - presente trabalho; (d) Modelo SCRS - presente trabalho.

tativos, que existe uma boa concordância entre os resultados das Figuras 5.3-b e 5.3-c, os quais foram obtidos a partir do modelo E-A, porém com cinética química diferente. Pode-se verificar ainda que existem regiões bastante características. Nas Figuras 5.3-a, 5.3-b, e 5.3-c observa-se claramente uma região central próxima da linha de simetria correspondente ao jato frio de entrada de combustível e de ar. As reações químicas nesta região são governadas pela cinética química de Arrhenius, resultando num número de Damköler menor do que um. Para as Figuras 5.3-a e 5.3-b estes jatos são praticamente idênticos, se estendendo da região de entrada até pouco mais de um terço da câmara. Nesta região ocorre a mistura dos gases e o início da queima do combustível, pré-aquecendo os gases, resultando num aumento gradual da temperatura até atingir as mais altas magnitudes próximo da região de saída, onde a chama deixa de ser anelar e ocupa praticamente toda a seção transversal da câmara. A pequena diferença existente no formato da chama entre estes dois resultados ocorre provavelmente devido à transferência de calor por radiação, que no presente trabalho é resolvido de forma mais detalhada.

Com relação aos dados da Figura 5.3-c, este jato possui as mesmas características, porém mais curto, com o início da reação de combustão ocorrendo antes, se comparado aos casos anteriores. Na Figura 5.3-d pode-se verificar os jatos relativamente frios de gás natural e ar na entrada, que neste caso ficam bem delimitados pelo fato do modelo assumir reação química instantânea, de modo que na interface entre os fluidos, ar e combustível, inicia-se a reação de combustão. A mistura do ar e do combustível também ocorre a jusante da região de entrada. A chama corresponde à região de alta temperatura, que se estende e intensifica ao longo do comprimento da câmara, da mesma forma que para os casos anteriores, porém de forma mais abrupta. Sua forma até cerca de 0,8 m da entrada é anelar, entretanto mais para o final da câmara ela ocorre também junto à linha de simetria. Este fato está associado às concentrações de combustível e ar, que diminuem (ver Figuras 5.6-b e 5.7-a), atenuando as reações químicas, dando lugar aos gases quentes oriundos do processo de combustão. A cerca da metade do comprimento da câmara, próximo à linha de centro, também pode-se verificar uma região de temperaturas mais baixas, correspondente ao jato frio da entrada com alta velocidade. Para este caso o jato frio possui temperaturas mais elevadas que para os casos anteriores. Isso pode ser explicado pelo fato do modelo SCRS não prever as taxas de reação devido à cinética química, ao contrário da modelagem anterior, onde as reações

químicas são mais lentas.

A Figura 5.4-a mostra as isolinhas de função de corrente obtidas com o modelo E-A. Pode-se observar na Figura 5.4-a a existência de um escoamento secundário na forma de

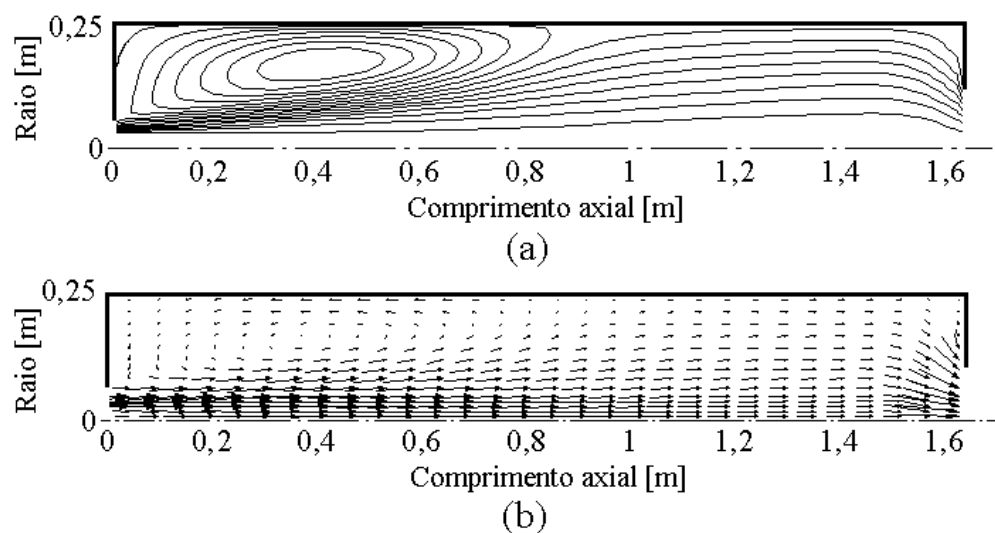


Figura 5.4 – (a) Função de Corrente para o modelo E-A; (b) Vetores velocidade para o modelo E-A.

uma grande recirculação, situada na parte superior esquerda. Isso ocorre devido à elevada velocidade de injeção de ar e de combustível pelo queimador, situado logo abaixo desta recirculação, na entrada da câmara. Forma-se uma região de baixa pressão no canto superior esquerdo, fazendo uma inversão do fluxo, formando um vórtice que se mantém devido à tensão de cisalhamento com o escoamento principal. Observando a Figura 5.5-b é possível constatar a existência de uma região da maior energia, que coincide com o escoamento principal, onde predominam as maiores velocidades. A Figura 5.4-b mostra o comportamento dos vetores velocidade devido à presença dos fluxos de ar e de combustível. Por comparação entre as escalas dos vetores velocidade, as maiores velocidades no interior da câmara são de aproximadamente 37 m/s , e as menores cerca de 2 m/s . Deste modo pode-se verificar que as maiores velocidades, devidas ao decréscimo da massa específica dos gases decorrente do aumento de temperatura, estão localizadas mais ao centro da câmara de combustão (linha de simetria), e na região de saída. Nesta região o aumento da velocidade deve-se a diminuição da seção de passagem do escoamento. As velocidades mais baixas podem ser encontradas no

interior da recirculação, e próximo às paredes. Os resultados obtidos nas simulações com os modelos E-A e SCRS apresentam praticamente as mesmas características e magnitudes.

As Figuras 5.5-a e 5.5-b mostram respectivamente os campos da viscosidade efetiva ($\mu + \mu_t$), e os campos da energia cinética turbulenta obtidas na simulação com o modelo E-A, e duas etapas de reação química. Na Figura 5.5-a é possível observar que nas regiões

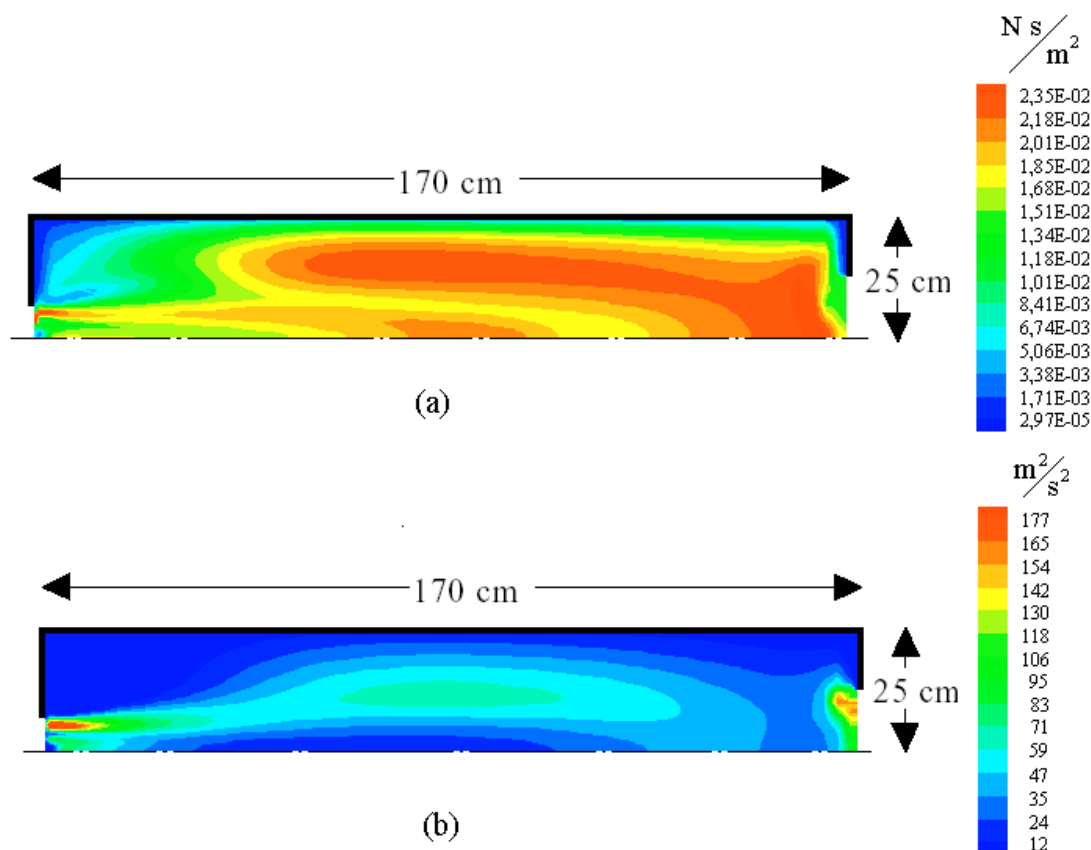


Figura 5.5 – (a) Viscosidade efetiva ($\mu + \mu_t$) ; (b) Energia cinética turbulenta.

próximas às paredes da câmara predominam as menores magnitudes da viscosidade. Devido às tensões de cisalhamento junto à parede o escoamento se torna mais lento, resultando numa região de menor energia (ver Figura 5.5-b), fazendo com que a viscosidade nesta região seja praticamente a viscosidade do fluido. Verifica-se também que a região com maior viscosidade se encontra sobre o escoamento principal, região em torno da linha de simetria da câmara, como esperado. Conforme a Figura 5.5-b, esta região coincide com a região do escoamento que contém maior energia, mostrando que a turbulência é principalmente originada dos jatos

de entrada. Na Figura 5.5-b verifica-se que as maiores magnitudes de energia do escoamento aparecem no jato de ar, e na região de saída da câmara, onde, segundo a Figura 5.4-b, predominam as maiores velocidades. Os resultados obtidos nas demais simulações também apresentam praticamente as mesmas características e magnitudes.

A Figura 5.6-a mostra os perfis de temperatura dos gases quentes sobre a linha de simetria da câmara de combustão para os resultados experimentais de Garréton e Simonin [1994], e também da solução com o presente modelamento com o modelo SCRS e com o modelo E-A, com uma e duas etapas globais de reação química. Pode-se observar nesta figura que o perfil de temperatura dos gases obtido com o modelo E-A, com duas etapas globais de reação química, possui boa concordância com os dados experimentais. Para o caso do modelo E-A com uma etapa global de reação química verifica-se que existe concordância qualitativa. Para estes dois resultados observa-se que os perfis são coincidentes entre si, e com os dados experimentais até cerca de 0,6 *m* da região de entrada onde, na situação que se tem uma única etapa global de reação química, o processo de combustão inicia-se antes, mostrando de forma mais intensificada o aumento de temperatura dos gases. Por assumir reação química instantânea, o SCRS inicia o processo de combustão imediatamente após a injeção dos fluidos na câmara, aquecendo os gases e aumentando de forma prematura as suas temperaturas, ocasionando a discrepância verificada entre os resultados. Por outro lado verifica-se que os perfis voltam a se aproximar na região de saída.

Na Figura 5.6-b é possível observar a distribuição da concentração de combustível ao longo da linha de simetria. Pode-se verificar nesta figura que os perfis obtidos para as duas situações resolvidas com o modelo E-A são coincidentes, e um pouco afastados dos dados experimentais até cerca de 0,8 *m* da entrada, da mesma forma que o modelo SCRS, mas este em desvio para o lado oposto. Comparando os resultados obtidos com o modelo SCRS e o modelo E-A, pode-se dizer que para o modelo E-A o consumo de combustível é maior imediatamente após região de entrada. Isto pode ser verificado pela declividade mais acentuada no perfil de concentração de combustível obtida com este modelo. Nesta região existe uma grande quantidade de oxigênio para reagir com o combustível que está sendo injetado, que intensifica as taxas de reação química, aumentando o consumo de combustível. Ao longo do comprimento da câmara esta vai se atenuando devido à inexistência de quantidades suficientes de combustível e oxidante, tornando as taxas de reações químicas mais

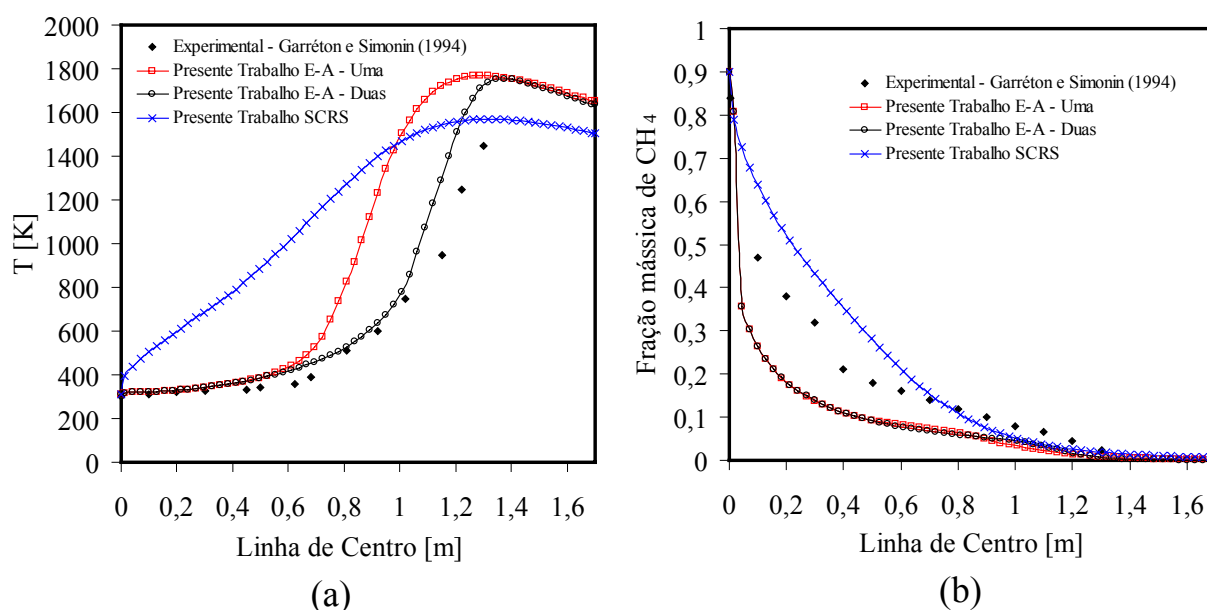


Figura 5.6 – (a) Temperatura ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de combustível ao longo da linha de simetria.

lentas. Esta atenuação pode ser explicada ao se verificar as concentrações de oxigênio sobre a linha de simetria apresentadas na Figura 5.7-a. Nesta figura pode-se verificar um grande aumento na concentração de oxigênio logo após a entrada, que se intensifica até atingir seu pico próximo a $0,4\text{ m}$, e depois começa a diminuir até atingir sua extinção. Esta diminuição da concentração de oxigênio, juntamente com a diminuição da concentração de combustível causam a redução nas taxas de reações químicas.

Na Figura 5.6-b verifica-se também que o modelo SCRS apresenta uma melhor concordância quantitativa em relação aos dados experimentais. Verifica-se também que a declividade do perfil do consumo de combustível é mais suave se comparado aos perfis obtidos com o modelo E-A.

As Figuras 5.7-a e 5.7-b mostram os resultados numéricos e experimentais dos perfis de concentração de oxigênio e de dióxido de carbono ao longo da linha de simetria, respectivamente. O modelo SCRS assume valor zero para a concentração de oxigênio em toda a extensão da câmara nesta posição. Isso ocorre pelo fato do modelo assumir reação química instantânea e considerar que oxigênio e combustível não coexistem em uma mesma posição. Como o modelo apresenta um perfil de concentração de combustível sobre a linha de simetria

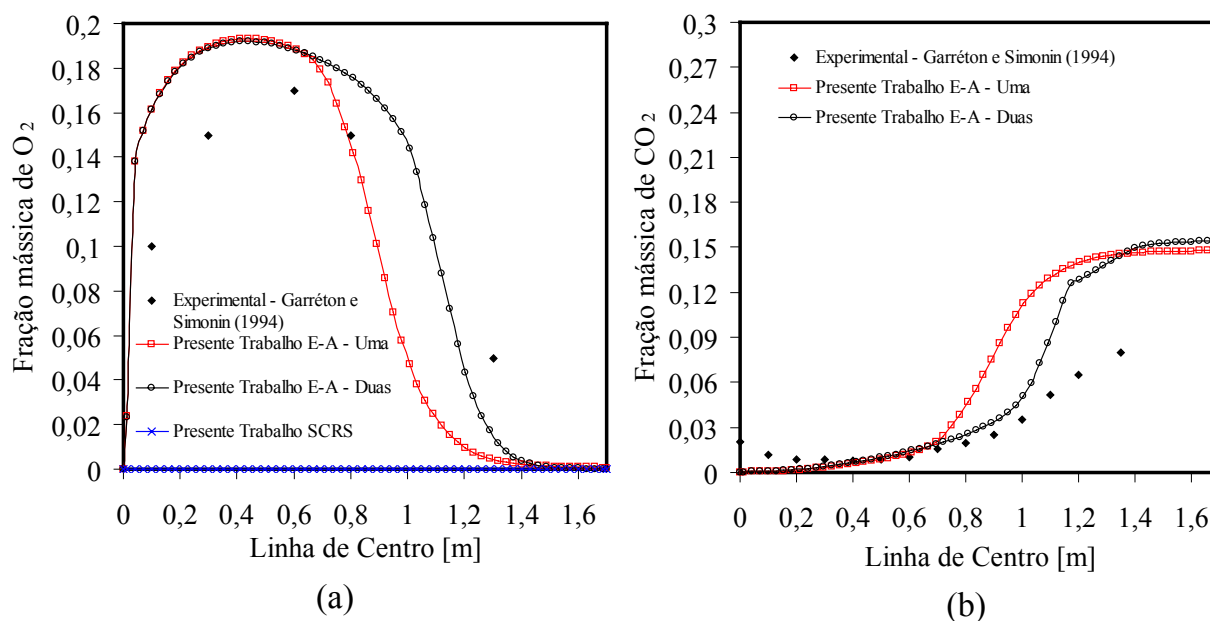


Figura 5.7 – (a) Concentração de oxigênio ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de dióxido de carbono ao longo da linha de simetria.

(Figura 5.6-b) não pode apresentar valor diferente de zero para a concentração de oxigênio nesta posição. O modelo SCRS também não é capaz de apresentar perfis de concentração de dióxido ou monóxido de carbono, pelo fato de assumir o nitrogênio como único componente dos produtos da combustão. Observa-se também nesta figura que existe concordância qualitativa com os resultados experimentais para ambos os casos resolvidos com o modelo E-A. A concentração de oxigênio aumenta ao longo da linha de centro porque a entrada de ar não é alinhada com o eixo central. Com o início do processo de combustão, a concentração de oxigênio diminui, ocorrendo um aumento da temperatura, conforme mostra a Figura 5.6-a e, no caso da reação em duas etapas, também da concentração de monóxido de carbono, que é criada pela primeira reação global representativa do processo de combustão, já apresentada acima (ver Figura 5.8-a, que mostra o perfil da concentração de monóxido de carbono sobre a linha de simetria). No caso de reação química em uma única etapa global é possível observar que o consumo de oxigênio pelo processo de combustão ocorre antes, concordando também com o aumento antecipado na concentração de dióxido de carbono, conforme esperado. Ambos os perfis apresentam resultados com níveis pouco acima das concentrações de oxigênio

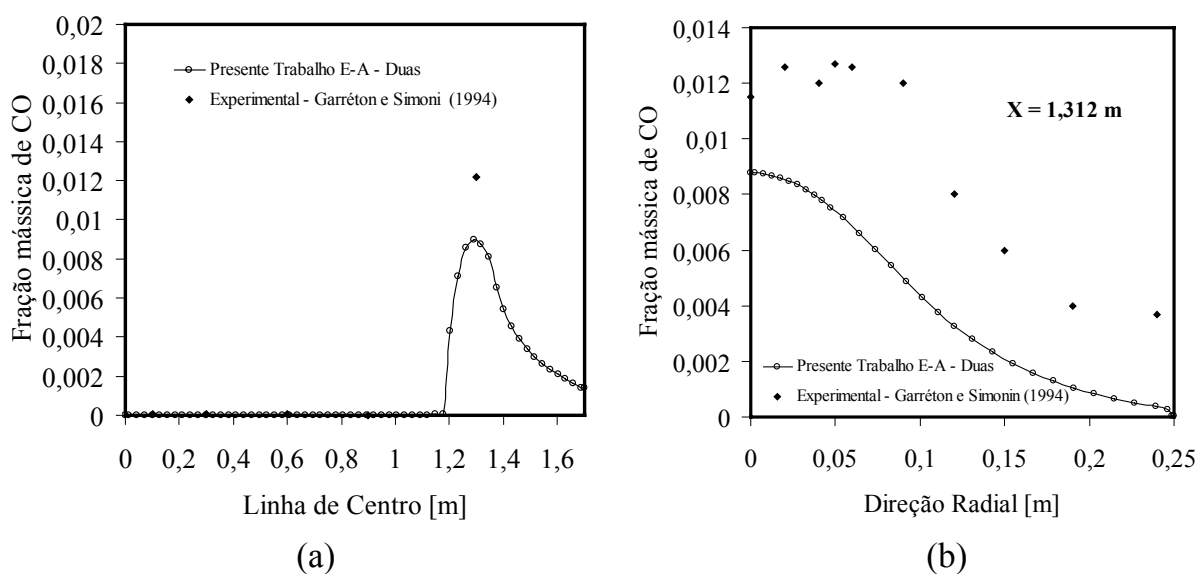


Figura 5.8 – (a) Concentração de monóxido de carbono ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de monóxido de carbono sobre a posição radial a 1,312 m da entrada.

e dióxido de carbono obtidos nos experimentos, porém, de forma qualitativa verifica-se que os dois casos apresentam uma boa concordância em relação a estes dados. Também pode-se dizer que o caso com reação em duas etapas apresenta melhores resultados. Outra vantagem da reação em duas etapas é a capacidade de prever a distribuição de monóxido de carbono, como pode-se observar nas Figuras 5.8-a e 5.8-b, que embora não tenham atingido os mesmos níveis das medições, apresentam concordância qualitativa. Isso está associado à super-predição das concentrações de CO_2 descritas acima, restando menor quantidade de carbono para a formação do CO. Na Figura 5.8-b está apresentado o perfil de concentração de monóxido de carbono sobre a posição radial a 1,312 m da entrada. Embora sub-preditos, apresentam a mesma tendência, se comparados aos dados experimentais. Isso ocorre pelo mesmo motivo já mencionado para o caso do perfil de CO na linha de centro.

As Figuras 5.9-a, 5.9-b e 5.9-c mostram uma comparação entre dados experimentais e os perfis de temperatura ao longo do raio da câmara de combustão para as posições axiais iguais a 0,312 m , 0,912 m e 1,312 m a partir da entrada, respectivamente, obtidos com os modelos E-A e SCRS. Observa-se na Figura 5.9-a que ambos os resultados obtidos com o modelo E-A apresentam excelente concordância com os dados experimentais. Até a posição

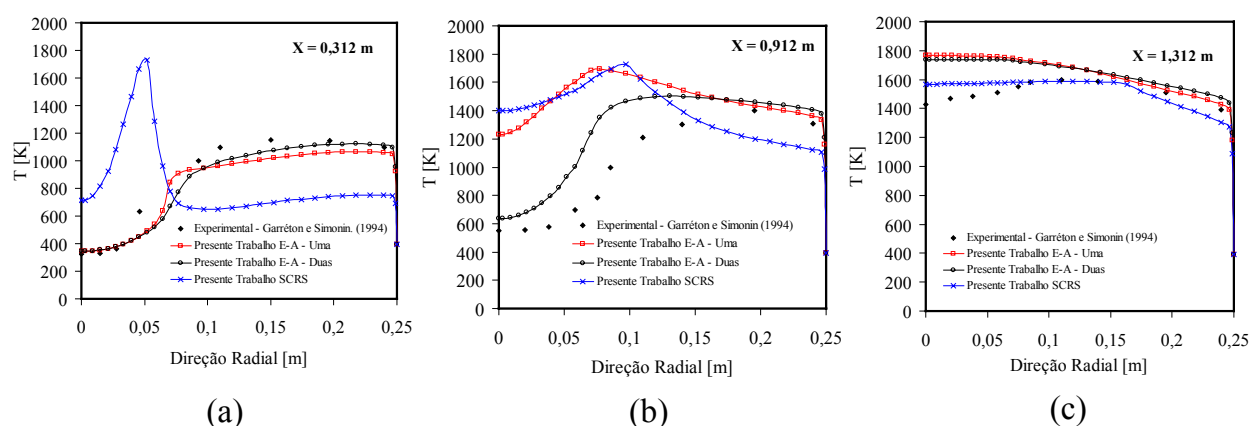


Figura 5.9 – Distribuição de temperatura sobre posições radiais: (a) 0,312 *m* da entrada; (b) 0,912 *m* da entrada; (c) 1,312 *m* da entrada.

radial igual à 0,03 *m* os gases apresentam praticamente a mesma temperatura de entrada, caracterizando o jato frio dos gases de entrada, já mostrado nas Figuras 5.3-b 5.3-c. A partir desta posição verifica-se um aumento gradual da temperatura, iniciando por um pré-aquecimento até atingir temperaturas da ordem de 1000 *K*, caracterizando o fim do processo de combustão, e também mostrando que a chama é anelar nesta posição. Verifica-se também que na região próxima à parede cilíndrica da câmara, raio aproximadamente igual à 0,24 *m*, ocorre uma queda de temperatura. Isso está associado à transferência de calor para o exterior da câmara, devida à condição de temperatura prescrita de 393,15 *K*, sugerida por Garréton e Simonin [1994] para representar o experimento, menor que a temperatura dos gases quentes no interior da câmara. Para esta posição não foram encontrados outros dados experimentais na literatura, a fim de se realizar comparações.

No modelo SCRS pode-se observar que os resultados não apresentam boa concordância para a posição radial apresentada nesta figura. Efetivamente o modelo SCRS é pobre ao descrever a gama de concentrações ao longo da qual ocorre a combustão. Assumindo reações químicas instantâneas, ele é muito abrupto, e desta forma a chama anelar ocorre antes, raio igual a 0,05 *m*, e se extingue prematuramente, predominando a partir desta região as temperaturas dos produtos da combustão, que retrocedem da região de temperaturas mais altas devido à presença de uma recirculação no escoamento, por consequência da expansão que existe na região de entrada, conforme mostram as Figuras 5.4-a e 5.4-b.

Como a escala tempo mecânico devido à turbulência é grande comparada ao tempo químico das reações químicas, combustível em excesso foi consumido, no lugar de uma reação mais suave e progressiva, conforme mostram os resultados experimentais e ambos os resultados do modelo E-A, que utilizam taxas finitas de reação química. Verifica-se também na região próxima à parede cilíndrica da câmara, a mesma queda de temperatura apresentada para os resultados obtidos com o modelo SCRS, pelos mesmos motivos.

Na Figura 5.9-b observa-se que os resultados do modelo E-A com duas etapas globais de reação química se apresentam melhores que os obtidos com uma única reação global, e também que os obtidos com o modelo SCRS. As mesmas características dos resultados mostrados na posição radial de $0,312\text{ m}$ são apresentadas também para esta posição. A Figura 5.9-b mostra um comportamento semelhante ao apresentado na Figura 5.9-a para os resultados obtidos com o modelo SCRS, não havendo boa concordância, com este modelo.

Na Figura 5.9-c pode-se observar que ambos os resultados obtidos com o modelo E-A são praticamente coincidentes nesta posição. Verifica-se de um modo geral uma boa concordância qualitativa entre estes resultados e os dados experimentais, existindo também uma boa concordância quantitativa a partir da posição radial igual a $0,15\text{ m}$. Entretanto, se comparados aos resultados do modelo E-A, uma melhor concordância qualitativa e também quantitativa pode ser verificada para os resultados obtidos com o modelo SCRS. Novamente verifica-se que muito próximo à parede existe a influência da transferência de calor para o exterior da câmara, diminuindo a temperatura dos gases.

Nas Figuras 5.10-a e 5.10-b estão apresentados os campos de concentração de oxigênio para os modelos SCRS, e E-A com reação química em duas etapas. Pode-se verificar nestas figuras que a maior concentração de oxigênio ocorre na região de entrada de ar do queimador, como esperado. Na Figura 5.10-a verifica-se que não existe oxigênio próximo da linha de centro da câmara, conforme já mencionado. Para ambos os modelos verifica-se também a mesma concentração de oxigênio na região de saída da câmara, já que ambos os modelos apresentam o mesmo consumo de combustível nesta posição (ver Figura 5.6-b). Na Figura 5.10-b, ao contrário do modelo SCRS, é possível notar que a difusão de oxigênio segue para o centro da câmara, formando a mistura de oxigênio e combustível, condição necessária para o início da reação de combustão. Os resultados do modelo E-A, com uma etapa de reação química, são muito semelhantes aos apresentados na Figura 5.10-b.

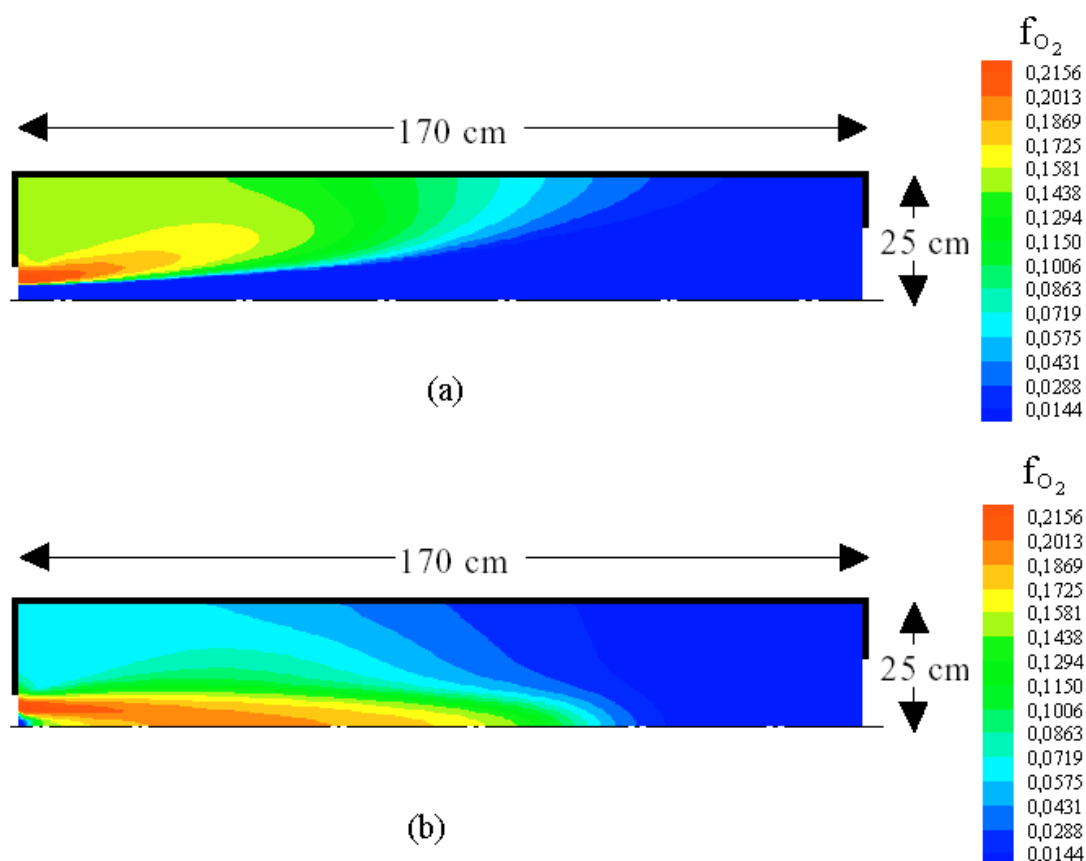


Figura 5.10 – Distribuição de oxigênio na câmara de combustão: (a) Modelo SCRS; (b) Modelo E-A, com duas etapas de reação química.

Nas Figuras 5.11-a e 5.11-b estão apresentados os campos de concentração de dióxido e monóxido de carbono, respectivamente, para o modelo E-A com duas etapas de reações químicas. Verifica-se nestas figuras que a maior concentração de monóxido de carbono possui a mesma ordem de grandeza da menor concentração de dióxido de carbono. Verifica-se também que a formação de monóxido de carbono aparece principalmente na periferia do jato principal (ver Figura 5.11-b), com seu pico de concentração na ponta deste jato. Nestas regiões existe pouco oxigênio para abastecer a reação química gerando combustão incompleta. Pode-se observar que o monóxido de carbono se forma como uma casca sobre o jato principal de entrada, tendo o início da sua geração na parte interna desta casca, seguida de um aumento e de uma diminuição da concentração, até ser destruído, ou consumido pela reação química, quase por completo formando o dióxido de carbono, conforme mostra a Figura 5.11-a. Os

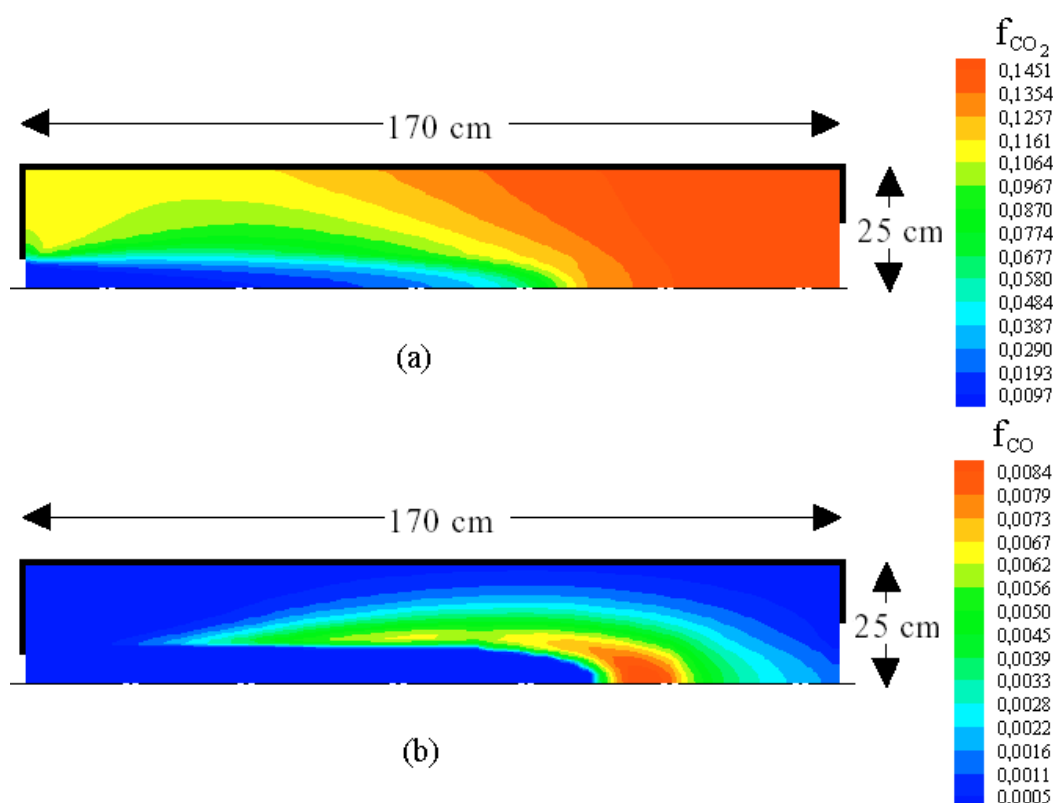


Figura 5.11 – (a) Distribuição de dióxido de carbono na câmara de combustão; (b) Distribuição de monóxido de carbono na câmara de combustão.

resultados da distribuição de dióxido de carbono do modelo E-A, com uma etapa de reação química, também são muito semelhantes aos apresentados na Figura 5.11-a.

As Figuras 5.12-a, 5.12-b e 5.12-c mostram a comparação dos modelos E-A e SCRS, com os dados experimentais obtidos na literatura, da variação radial da concentração de oxigênio para as posições axiais iguais a 0,312 m, 0,912 m e 1,312 m da entrada. Novamente os resultados do modelo E-A com a reação em duas etapas se apresentam melhores. Porém nota-se uma maior discrepância nas concentrações de oxigênio obtidas em regiões mais próximas da região de saída da câmara, para os menores raios. Os resultados obtidos com o modelo SCRS não apresentam bons resultados em nenhuma das posições.

As Figuras 5.13-a, 5.13-b e 5.13-c mostram a comparação entre os resultados obtidos com os dois casos simulados com o modelo E-A, e os dados experimentais obtidos na literatura, da variação radial da concentração de dióxido de carbono para as posições axiais

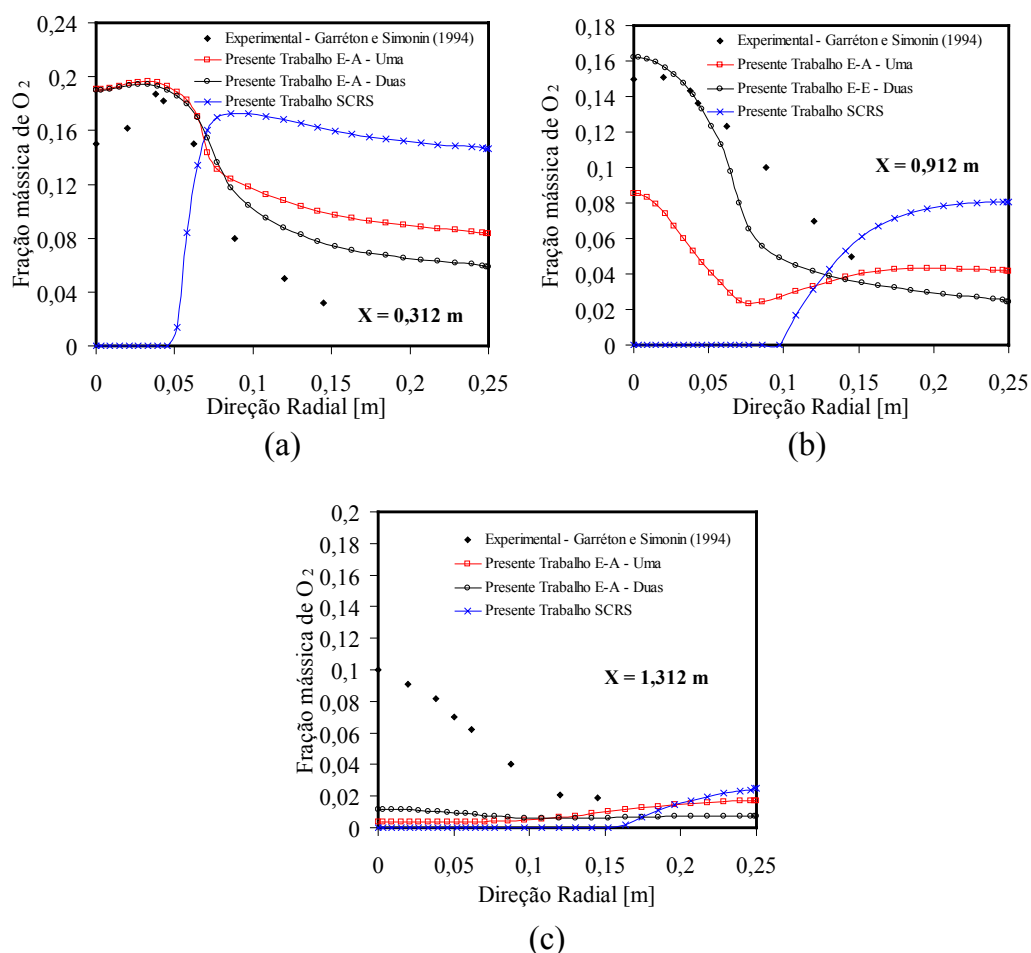


Figura 5.12 – Concentração de oxigênio sobre posições radiais: (a) 0,312 m da entrada; (b) 0,912 m da entrada; (c) 1,312 m da entrada.

iguais a 0,312 m, 0,912 m e 1,312 m da entrada, respectivamente. Da mesma forma o modelo com a reação em duas etapas apresenta-se melhor, sendo que as maiores diferenças em relação aos dados experimentais são obtidas também próximas da saída da câmara. Pelos mesmos motivos já descritos, não são apresentados resultados da concentração de dióxido de carbono para o modelo SCRS.

Supõe-se que os dados experimentais aqui apresentados contenham incertezas de ordem menor do que os resultados numéricos obtidos.

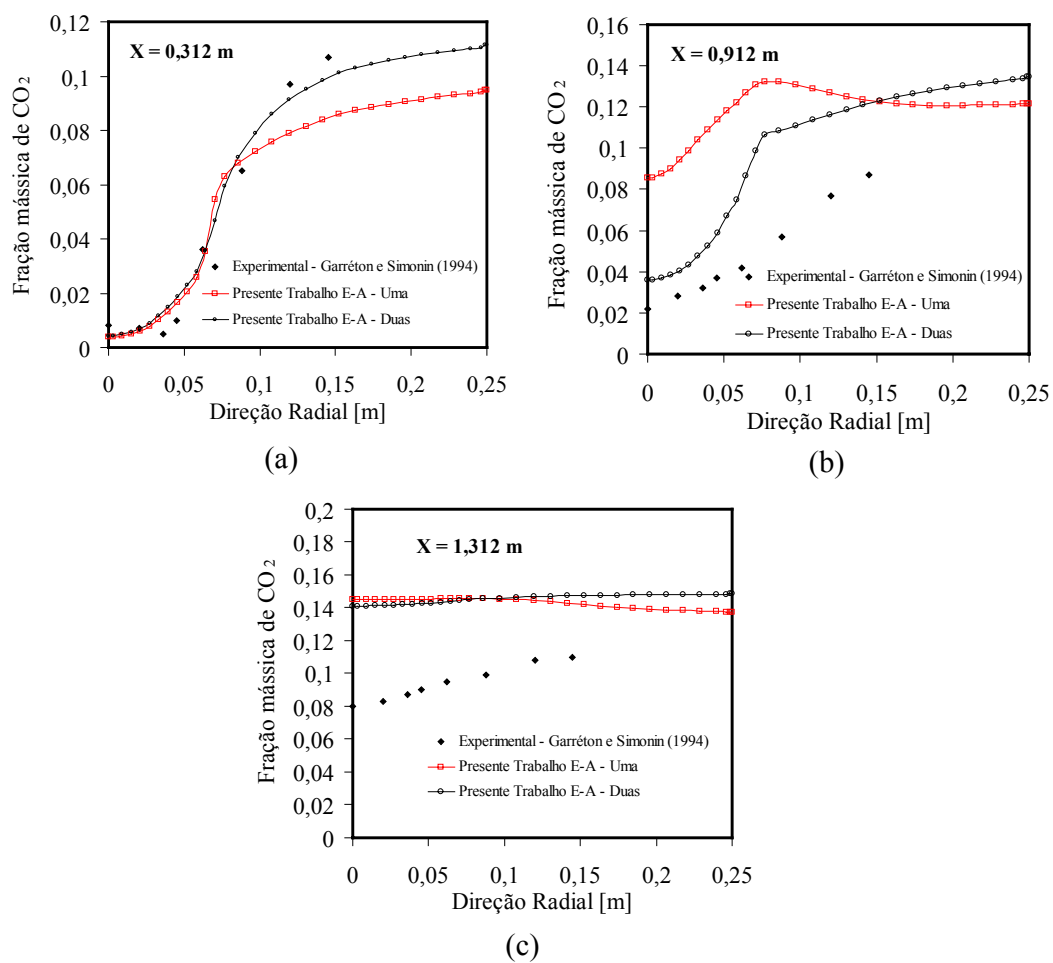


Figura 5.13 – Concentração de dióxido de carbono sobre posições radiais: (a) 0,312 m da entrada; (b) 0,912 m da entrada; (c) 1,312 m da entrada.

CAPÍTULO 6

ANÁLISE DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO NO PROCESSO DE COMBUSTÃO NUMA CÂMARA CILÍNDRICA

O procedimento numérico descrito na Seção 5.4, Capítulo 5, assim como as propriedades termofísicas apresentadas anteriormente na Seção 5.3, são usados para obter a solução do processo de combustão numa câmara cilíndrica. As equações de conservação apresentadas no Capítulo 2 novamente foram utilizadas para modelar o processo de combustão turbulenta sem pré-mistura, sendo a turbulência aproximada através das Médias de Reynolds (RANS), e a viscosidade turbulenta através do modelo k - ϵ padrão. Como já verificado no Capítulo 5 o modelo que melhor representou o processo de combustão foi o modelo de taxas finitas generalizadas de Arrhenius-Magnussen, E-A, assumindo duas reações químicas globais para a oxidação do gás natural (metano). Neste capítulo esta mesma modelagem foi usada para representar o processo de combustão numa câmara cilíndrica imersa em água (câmara de combustão de uma caldeira), de modo que se possa fazer uma análise do efeito da transferência de calor por radiação sobre o processo de combustão. A modelagem de transferência de calor por radiação utilizada já foi apresentada no Capítulo 3, e assume o Método das Zonas e modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas, WSGGM, para a determinação das taxas líquidas de transferência de calor por radiação entre os gases quentes e as superfícies da câmara.

No presente capítulo está apresentado o problema a ser investigado, as condições de contorno, assim como os resultados comparativos de temperatura e de concentração de espécies químicas para duas situações: com radiação térmica e sem radiação térmica. Uma análise térmica levando em consideração as taxas de transferência de calor por radiação e convecção também é apresentada.

6.1 Observações Gerais

Para todos os casos é de fundamental importância verificar as trocas de calor entre os gases quentes oriundos do processo de combustão e o ambiente externo à câmara. Ainda, como análise dos resultados, deve-se verificar o campo de temperaturas e de concentrações de espécies químicas no interior desta câmara, observando as características do escoamento dos gases e a eficiência de queima com relação a presença ou não de trocas de calor por radiação na modelagem. Da mesma forma que no capítulo anterior considerou-se o problema em regime permanente.

Os resultados são expostos de modo que se possa analisar o efeito da radiação térmica no processo de combustão. Foram feitos gráficos em duas dimensões mostrando isoregiões de temperatura e de taxa líquida de transferência de calor por radiação, e de concentração de espécies químicas. As distribuições de temperatura e concentrações de espécies químicas sobre algumas posições de interesse na câmara foram analisadas em detalhe.

O tempo computacional requerido para os casos aqui estudados é da ordem de grandeza de alguns minutos para a situação em que a radiação não está sendo calculada, e de pouco mais de dois dias quando se leva em conta a radiação térmica. A solução foi considerada convergida para ambos os casos quando o somatório dos resíduos normalizados de todas as equações foi menor que 10^{-9} , e o resíduo normalizado da entalpia foi menor que 10^{-6} .

A malha usada para a solução deste problema tem o mesmo número de volumes da malha usada na solução apresentada no capítulo anterior, 30×60 , já que a mesma se apresentou suficientemente boa. Ela é mostrada parcialmente na Figura 6.1. Refinamentos são usados na região de entrada, sendo que vinte e quatro dos trinta volumes aplicados na direção radial estão dispostos de zero à $12,5\text{ cm}$, compreendendo a região ocupada pelo queimador e o bocal de saída, com diferentes espaçamentos. Na região próxima à parede radial também é aplicado um refinamento de malha para que se possa capturar os efeitos da camada limite.

A fim de representar a presença de um estator no queimador a equação média da conservação de quantidade de movimento angular, $\overline{r\omega}$ (Equação (2.160)), é resolvida. Para isso assume-se que a turbulência seja isotrópica e que a viscosidade turbulenta, calculada a partir das velocidades $\overline{u}$ e $\overline{v}$, seja a mesma para a dissipação desta quantidade de movimento.

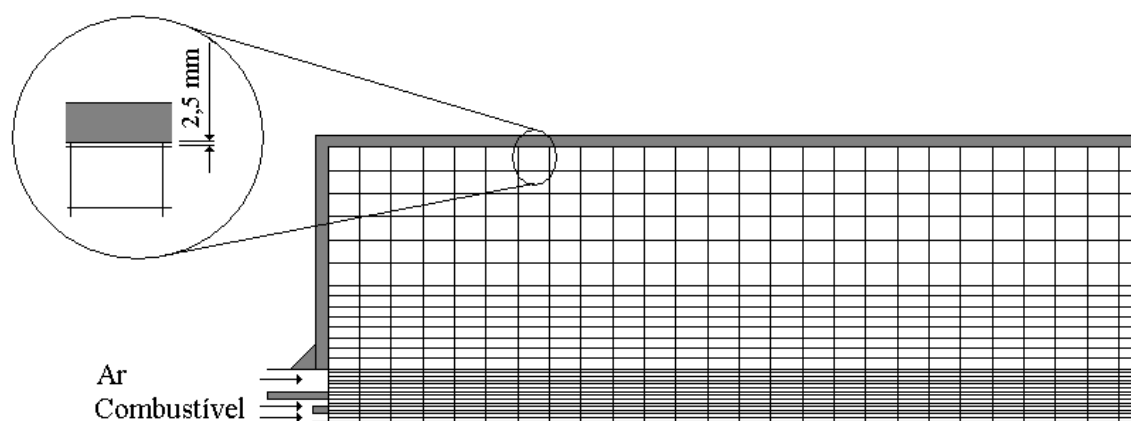


Figura 6.1 – Vista parcial em corte da malha bidimensional sobre a câmara de combustão (30x60) volumes.

6.2 O Problema

Assume-se uma câmara de combustão cilíndrica, com comprimento L de 1700 cm , e diâmetro D_c de 50 cm , como mostra a Figura 6.2. Esta câmara de combustão é abastecida

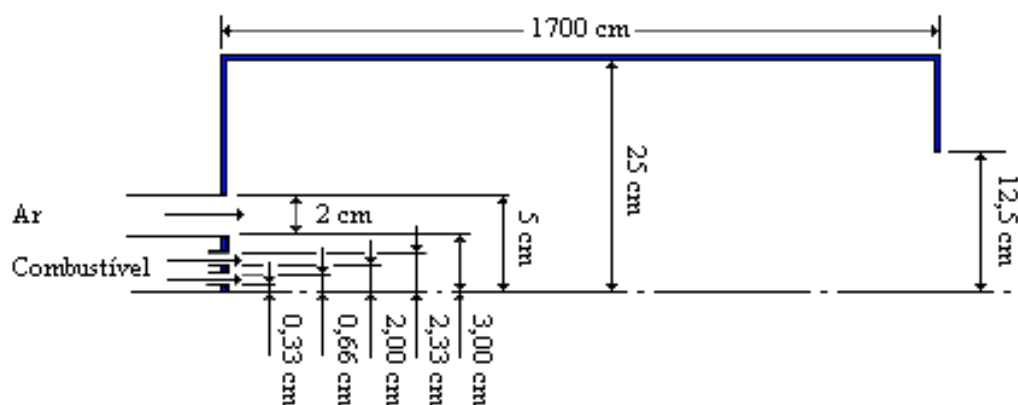


Figura 6.2 – Esboço em corte de uma câmara de combustão cilíndrica.

com gás natural e ar, através dos injetores de um queimador situado na sua linha de simetria axial. Utilizou-se um excesso de combustível de 5%, resultando num fluxo mássico de combustível igual a 0,0125 kg/s para uma temperatura de 313,15 K , e num fluxo mássico de ar igual a 0,186 kg/s para uma temperatura de 323,15 K . As velocidades de injeção do combustível e do ar foram de aproximadamente 15,21 m/s e 36,29 m/s , respectivamente. O

número de Reynolds médio na região de entrada da câmara ficou em 20000, também caracterizando escoamento turbulento. Considerou-se a velocidade tangencial de entrada, devido à existência de um estator no queimador (Figura 6.3), igual a 20 % da velocidade axial de entrada.

Existem vários tipos de queimadores a gás natural disponíveis no mercado, sendo uma configuração freqüente a composta por um estator e diversos bicos injetores, concentrados em um único dispositivo (Figura 6.3).

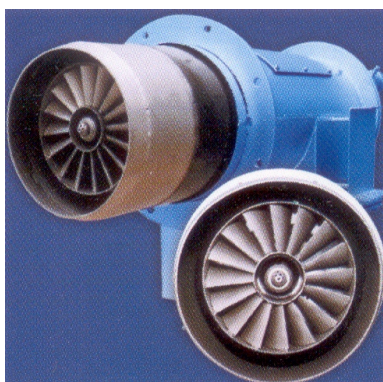


Figura 6.3 – Queimador comercial a gás natural [Kei-Tek, 1998].

Adota-se a aproximação de que o combustível seja injetado por orifícios anulares, ao invés de vários bicos injetores dispostos de forma circular. Deste modo foram implementados dois orifícios concêntricos anulares de vão $0,33\text{ cm}$ cada, para injetar o combustível, $O_{c_{in}}$ e $O_{c_{ex}}$, e um orifício, também anular, com vão igual a 2 cm , externamente aos dois primeiros, para insuflar o ar, $O_{c_{Ar}}$. Na Figura 6.4 pode-se verificar a configuração do queimador implementado na solução do problema.

As principais dimensões do bico injetor apresentado na Figura 6.4 estão condensadas na Tabela 6.1.

Considera-se que a composição do ar de entrada seja de 23% de oxigênio (O_2), 76% de nitrogênio (N_2) e 1% de vapor d'água (H_2O). Assume-se o gás natural como sendo composto de 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio, e também livre de umidade.

Considerando novamente a axissimetria assume-se o domínio de cálculo como sendo apenas uma fração angular representativa da câmara, de 1 radiano. Tanto o ventilador como os demais componentes externos à câmara de combustão não fazem parte do domínio

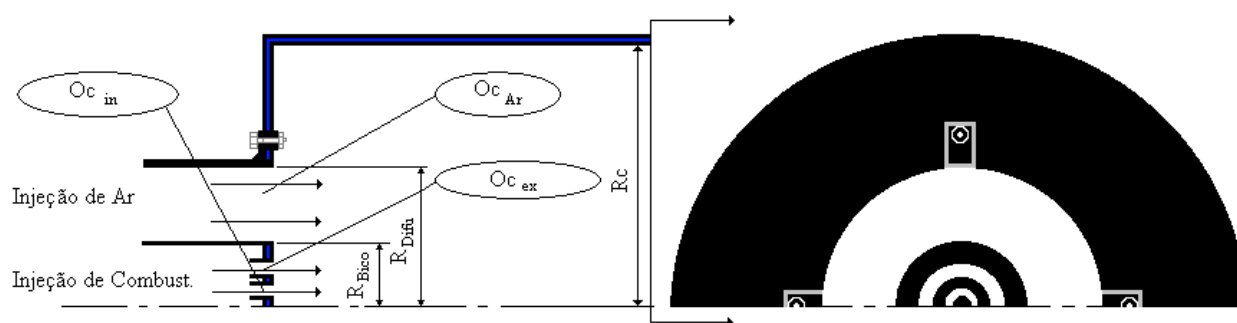


Figura 6.4 – Queimador usado na solução do problema.

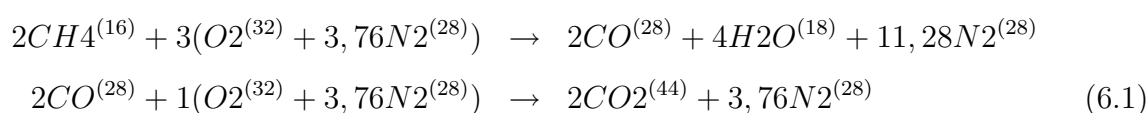
Tabela 6.1 – Principais dimensões do bico injetor e do bocal de saída.

Variável	Valor	Variável	Valor
R_{bico}	3 cm	R_{dif_u}	5 cm
R_{bocal}	12,5 cm	$O_{c_{Ar}}$	2 cm
$O_{c_{in}}$	0,33 cm	$O_{c_{ex}}$	0,33 cm

de cálculo, mas são considerados na solução, já que fornecem as condições de entrada na câmara.

Assume-se ainda que o processo de combustão ocorra em regime permanente. A potência do queimador utilizado é de aproximadamente 400 kW. Pelo mesmo motivo já descrito anteriormente na Seção 5.1, também são desprezadas as forças de empuxo devido a variação de densidade.

Assumindo a composição do gás natural descrita acima, e a cinética química do processo de combustão ocorrendo em duas etapas globais, tem-se:



Com o nitrogênio mantendo-se inerte nas reações a mistura pode ser escrita da seguinte forma:

$$Mistura = CH_4 + O_2 + CO_2 + H_2O + CO + N_2 \tag{6.2}$$

Para simular a câmara de combustão de uma caldeira de paredes d'água, implementa-se às paredes desta câmara uma condição de contorno de terceira espécie (coeficiente de transferência de calor h_{inf} e temperatura T_{inf} constantes). Assume-se que esta câmara de combustão tenha paredes de aço com $12,7 \text{ mm}$ ($1/2''$) de espessura, e condutividade térmica constante e igual a $\kappa_{Fe} = 60,5 \text{ W/mK}$. Considera-se também que a água esteja na temperatura de saturação $433,15 \text{ K}$, para uma pressão de 7 atm , e seu coeficiente de transferência de calor seja também constante e igual a $500 \text{ W/m}^2\text{K}$. A Tabela 6.2 mostra de forma resumida as condições de contorno utilizadas, onde a concentração $\bar{f}_\alpha$ é válida para cada componente da mistura. Para as partes fechadas do bico injetor são implementadas condição de

Tabela 6.2 – Condições de contorno, onde as propriedades termodinâmicas sem sub-índice são as da mistura.

$x = 0$ O_{cin} e O_{cex}	$x = 0$ $R_{bico} \leq r = R_{dif}$	$x = 0$ $R_{dif} < r \leq Rc$	
$\bar{u} = u_{in,comb}$ $\bar{v} = 0$ $\bar{r}\bar{w} = 0$ $\bar{h} = c_p T_{in,comb}$ $\bar{f}_\alpha = f_{in,comb}$ $k = \frac{3}{2} (u_{in,comb} I)^2$ $\epsilon = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}}{l}$	$\bar{u} = u_{in,ar}$ $\bar{v} = 0$ $\bar{r}\bar{w} = 0, 2\bar{u}$ $\bar{h} = c_p T_{in,ar}$ $\bar{f}_\alpha = f_{in,ar}$ $k = \frac{3}{2} (u_{in,ar} I)^2$ $\epsilon = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}}{l}$	$\bar{u} = 0$ $\bar{v} = 0$ $\bar{r}\bar{w} = 0$ $\kappa \frac{\partial \bar{h}}{\partial x} = h_{inf} c_p (T - T_{inf})$ $\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial x} = 0$ $k = 0$ $\epsilon = \frac{C_\mu k^{1,5}}{0,4 C_\mu^{0,25}}$	
$x = L$ $0 \leq r = R_{bocal}$	$x = L$ $R_{bocal} < r \leq Rc$	$r = 0$ $0 \leq x \leq L$	$r = Rc$ $0 \leq x \leq L$
$\bar{u} = u_{ant} + ADD$ $\frac{\partial \bar{v}}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial \bar{r}\bar{w}}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial \bar{h}}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial k}{\partial x} = 0$ $\frac{\partial \epsilon}{\partial x} = 0$	$\bar{u} = 0$ $\bar{v} = 0$ $\bar{r}\bar{w} = 0$ $\kappa \frac{\partial \bar{h}}{\partial x} = h_{inf} c_p (T - T_{inf})$ $\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial x} = 0$ $k = 0$ $\epsilon = \frac{C_\mu k^{1,5}}{0,4 C_\mu^{0,25}}$	$\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} = 0$ $\bar{v} = 0$ $\bar{r}\bar{w} = 0$ $\frac{\partial \bar{h}}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial k}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial \epsilon}{\partial r} = 0$	$\bar{u} = 0$ $\bar{v} = 0$ $\bar{r}\bar{w} = 0$ $\kappa \frac{\partial \bar{h}}{\partial r} = h_{inf} c_p (T - T_{inf})$ $\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial r} = 0$ $k = 0$ $\epsilon = \frac{C_\mu k^{1,5}}{0,4 C_\mu^{0,25}}$

isolamento térmico, não deslizamento e impermeabilidade, sendo a emissividade igual a 1. Na região de saída e nos gases de entrada também é utilizado emissividade igual a 1. A emissividade das paredes da câmara é 0,6 [Garréton e Simonin, 1994].

Para se obter o fechamento do problema são usadas as mesmas propriedades termodinâmicas do ar e do combustível já apresentadas anteriormente na Seção 5.3.

6.3 Resultados e Discussões

São apresentados resultados comparativos para campos de temperatura, assim como perfis axiais de temperatura e concentrações de espécies químicas sobre a linha de centro da câmara de combustão, além de algumas posições radiais ao longo da sua extensão. A Figura 6.5 apresenta uma comparação da distribuição de temperatura dos gases no interior da câmara, obtida no presente trabalho para o modelo E-A, com duas etapas de reação química global para o metano, com e sem a presença de transferência de calor por radiação. Também é mostrado nesta figura a distribuição das taxas líquidas de transferência de calor por radiação, para o caso em que a radiação térmica está sendo resolvida, e a distribuição do número de Damköler, que é definido da seguinte forma:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_{ch}} \quad (6.3)$$

onde τ_t é o tempo característico da turbulência e τ_{ch} é o tempo característico das reações químicas. Neste trabalho o número de Da foi obtido da razão entre as taxas de reações químicas calculadas com os modelos de Arrhenius e de Magnussen.

É possível verificar, comparando as Figuras 6.5-a e 6.5-b, que a magnitude de temperatura alcançada para ambas as situações é a mesma, aproximadamente 1750 K. Por outro lado, analisando a região onde predominam as temperaturas desta ordem, verifica-se, no caso em que se resolve a radiação térmica, que o gradiente de temperatura é diferente e a região ocupada pelos gases de maior temperatura é menos rombuda. Quando a radiação térmica está sendo resolvida existe um acréscimo na taxa de transferência de calor das regiões de temperaturas mais elevadas para as regiões de temperaturas mais baixas que, no caso de temperaturas desta ordem, passa a ser importante. A Figura 6.5-c mostra este fenômeno. Esta figura mostra a distribuição da taxa líquida de transferência de calor por radiação, em

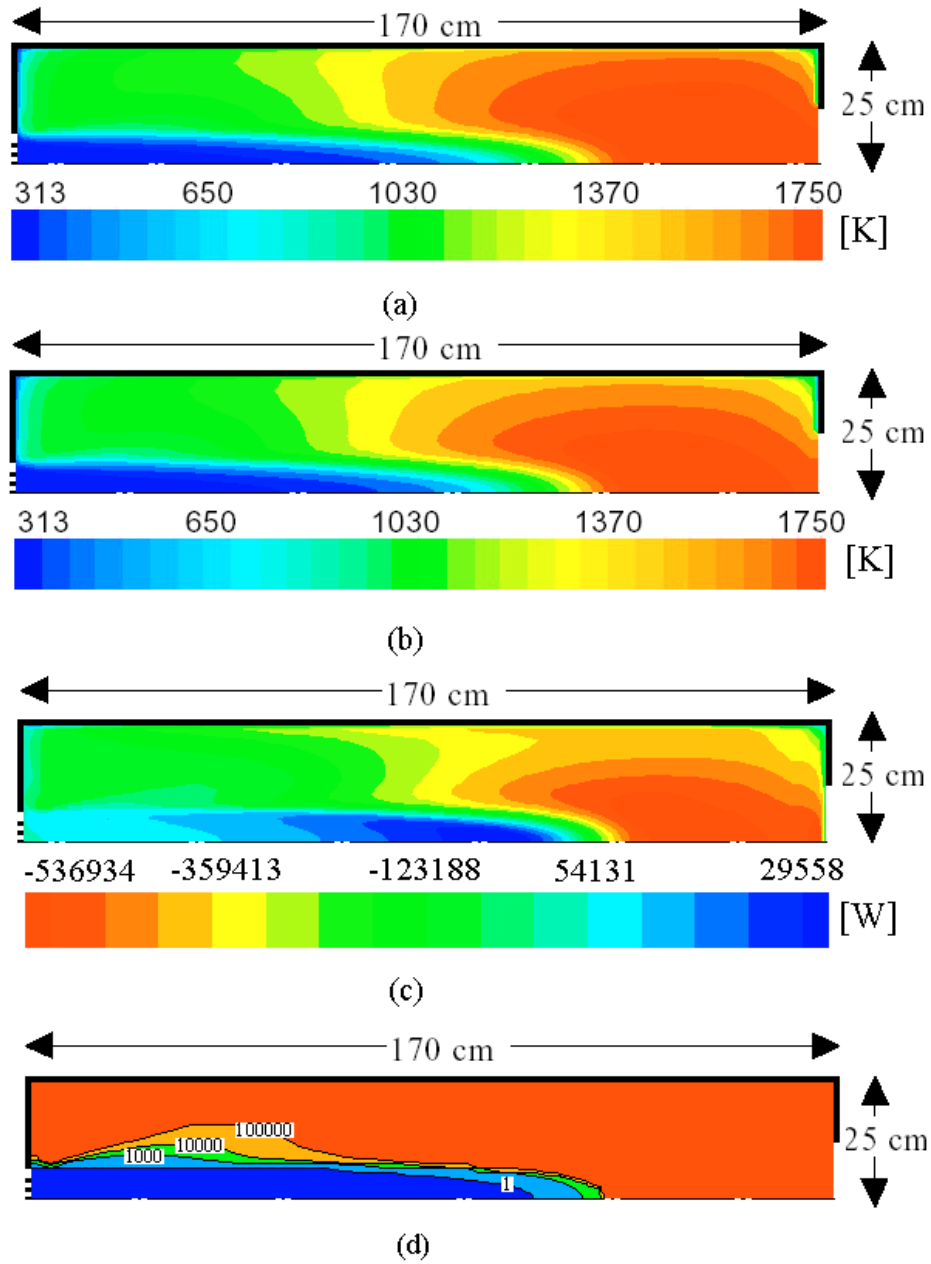


Figura 6.5 – (a) Distribuição de temperatura na câmara de combustão sem radiação térmica; (b) Distribuição de temperatura na câmara de combustão com radiação térmica; (c) Distribuição das taxas líquidas de transferência de calor por radiação (Positivo $\rightarrow$ emite mais energia do que recebe; Negativo $\rightarrow$ recebe mais energia do que emite); (d) Distribuição do número de Damköhler.

Watt (W), integrada em cada volume de controle no interior da câmara. Nessa figura é possível observar as regiões que mais emitem e as que mais absorvem energia por radiação. O sinal negativo caracteriza emissão de energia maior do que absorção, e o sinal positivo o contrário. Comparando as Figuras 6.5-b e 6.5-c é possível verificar a coerência dos resultados: as regiões que mais emitem são as regiões de temperaturas mais elevadas, e as que mais absorvem são as de temperaturas mais baixas. Fazendo um balanço de energia, levando em conta volumes e superfícies de controle, verifica-se que a diferença entre a quantidade de energia emitida por radiação e a quantidade de energia recebida por radiação é da ordem de 0,89 %, comprovando a correção da formulação. No caso da Figura 6.5-a a transferência de calor é governada apenas por advecção e condução e, como a advecção é dominante e ocorre no sentido do escoamento, não é possível que o calor seja transferido da região de temperatura mais alta, região de saída da câmara, para a região à montante com temperaturas mais baixas. Observa-se também, próximo às paredes, que existe um aumento na transferência de calor para o exterior da câmara. Isso ocorre pelo mesmo motivo já descrito. Além disso, quando a radiação está sendo resolvida, existe uma taxa de transferência de calor da região de temperatura mais alta, região de saída, para as paredes da câmara. Verifica-se também que a região central ocupada pelo jato de entrada, próxima da região de temperaturas mais altas, tem sua temperatura levemente modificada pela presença de transferência de calor por radiação, sendo esta pequena alteração suficiente para modificar as taxas de reações químicas. Isto pode ser verificado mais adiante ao se analisar os campos de concentração de espécies químicas.

Na Figura 6.5-d verificam-se quatro isoregiões do número de Damköler: $Da = 1$, $Da = 1 \times 10^3$, $Da = 1 \times 10^4$ e $Da = 1 \times 10^5$. Com esta figura é possível verificar onde o processo de combustão é governado pela cinética química e onde ele é governado pela mecânica do escoamento. Quando as taxas de reação química são altas em comparação com as taxas de mistura do fluido, $Da \gg 1$, tem-se o regime de reações químicas instantâneas. Consequentemente, quando as taxas de reação são baixas em comparação com as taxas de mistura, $Da \ll 1$, tem-se o processo governado pela cinética química [Turns, 2000]. Com esta definição é possível verificar que a região central ocupada pelo jato frio de entrada (Damköler $\ll 1$) é resolvida pela equação de Arrhenius, cinética química, e todas as outras regiões imediatamente afastadas, pelo modelo de Magnussem, reações químicas instantâneas.

Como a cinética química, representada pela equação de Arrhenius, é função da temperatura tem-se na região do jato frio de entrada as menores taxas de reação química e como resultado um aumento gradual da temperatura, gerando um pré aquecimento dos gases, para na parte posterior, onde também a turbulência é intensificada, queimarem de forma mais intensa.

A Figura 6.6-a mostra uma comparação entre os perfis de temperatura dos gases quentes sobre a linha de simetria da câmara de combustão para os resultados obtidos com o modelo E-A, com duas etapas globais de reação química, levando em consideração duas situações: sem transferência de calor por radiação; com transferência de calor por radiação. Pode-se observar nesta figura que os perfis de temperatura são praticamente coincidentes até

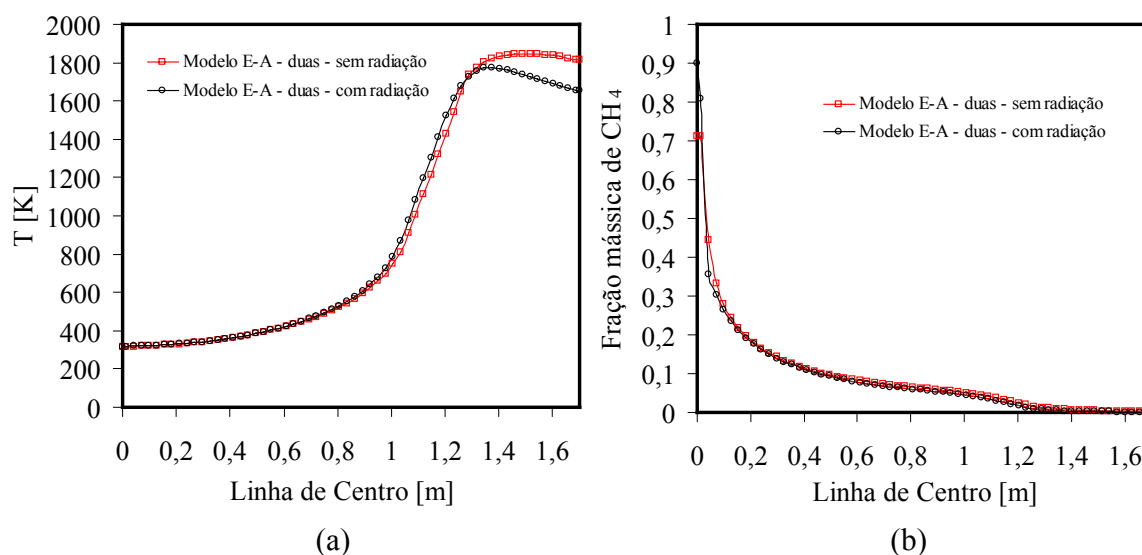


Figura 6.6 – Comparação de resultados com e sem a presença da radiação térmica: (a) Temperatura ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de combustível ao longo da linha de simetria.

1,2 m da entrada. A partir desta posição os perfis deixam de ser coincidentes, aparecendo uma queda no perfil de temperatura para o caso em que a transferência de calor por radiação é calculada. Na região anterior a 0,9 m a temperatura dos gases é baixa, tornando a influência da troca de calor por radiação também baixa, praticamente insignificante. Na região de temperaturas mais elevadas, a partir de 1,2 m, o efeito da radiação térmica passa a ser importante, aumentando a transferência de calor e baixando o temperatura dos gases. Na

Figura 6.6-b está apresentado o perfil de concentração de combustível para a mesma situação apresentada acima. Não se verifica praticamente nenhuma influência da presença ou não de radiação térmica no consumo de combustível sobre a linha de simetria.

As Figuras 6.7-a e 6.7-b mostram, respectivamente, os resultados dos perfis de concentração de oxigênio e de dióxido de carbono ao longo da linha de simetria, com e sem a presença da troca de calor por radiação. Na Figura 6.7-a verifica-se que a presença de trans-

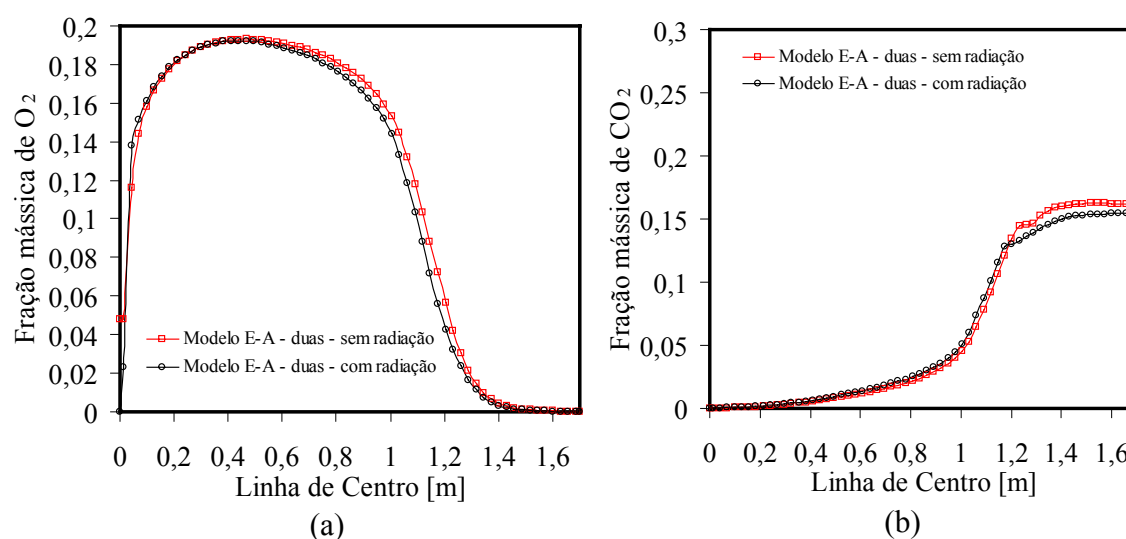


Figura 6.7 – Comparação de resultados com e sem a presença da radiação térmica: (a) Concentração de oxigênio ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de dióxido de carbono ao longo da linha de simetria.

ferência de calor por radiação térmica causa um pequeno aumento no consumo de oxigênio, que começa a partir de 0,65 m da entrada. Situação inversa ocorre com relação aos perfis de concentração de dióxido de carbono que, a partir da distância de 1,2 m, apresentam uma diminuição de concentração. Esta diminuição na concentração de dióxido de carbono está associada à queda de temperatura nesta região, conforme mostrado na Figura 6.6-a. Já o aumento do consumo de oxigênio ocorre devido a um pequeno aumento na temperatura, respectivo a esta posição e pouco pronunciado na Figura 6.6-a devido à escala, causado pela absorção do calor emitido por radiação térmica dos gases com temperatura mais alta da região de saída, conforme já visto na Figura 6.5-c. Verifica-se também, quando radiação

térmica está sendo calculada, um pequeno aumento na produção de dióxido de carbono de $0,65\text{ m}$ até $1,2\text{ m}$ da entrada. Este pequeno aumento está associado ao aumento no consumo de oxigênio apresentado nesta posição. Estas variações nos perfis de concentração, mesmo com um pequeno aumento na temperatura dos gases é justificável. Lembre-se que o modelo de Arrhenius, utilizado para calcular as taxas de reação química nesta região do escoamento, apresenta forte dependência com a temperatura.

Nas Figuras 6.8-a e 6.8-b são apresentadas comparações entre os perfis de concentração de monóxido de carbono, com e sem a presença de troca de calor por radiação. Verifica-se na Figura 6.8-a, quando radiação térmica é calculada, que houve um significativo

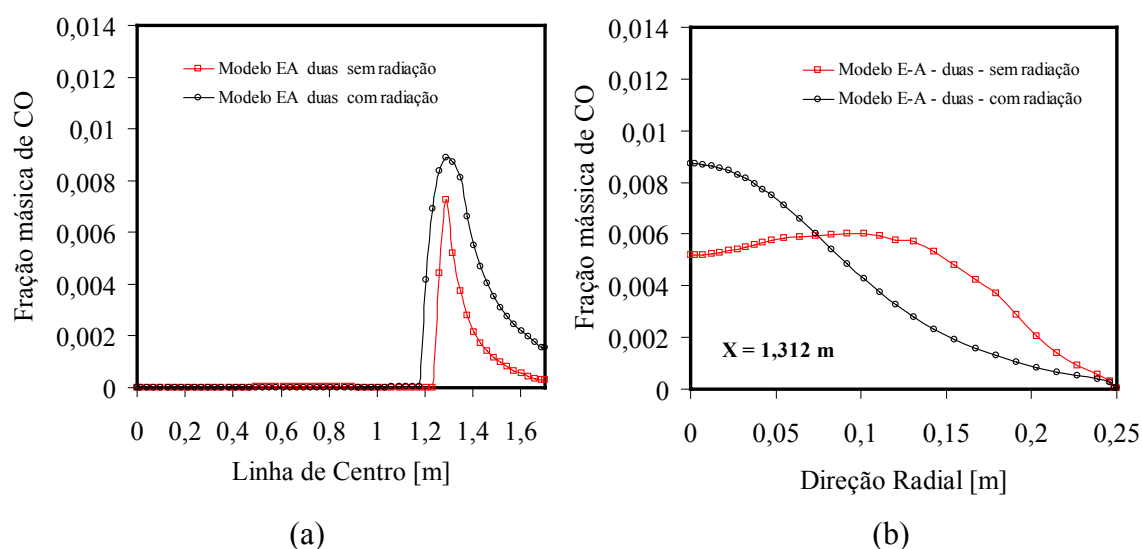


Figura 6.8 – Comparação de resultados com e sem a presença da radiação térmica: (a) Concentração de monóxido de carbono ao longo da linha de simetria; (b) Concentração de monóxido de carbono sobre a posição radial a $1,312\text{ m}$ da entrada.

aumento da concentração de monóxido de carbono sobre região que apresenta as temperaturas mais altas. Isto está associado à presença de combustão incompleta nesta região. Com a diminuição da magnitude de temperatura (ver Figura 6.6-a), devida à emissão de calor por radiação, ocorre também uma diminuição na concentração de dióxido de carbono (ver Figura 6.7-b), e com isso um aumento na concentração de CO. Isso afeta as taxas de

reações químicas, que por sua vez tendem a diminuir. Na Figura 6.8-b isto também pode ser verificado. Porém aparece uma inversão nos perfis, causada pelo mesmo fenômeno. Observando as Figuras 6.5-a e 6.5-b verifica-se que existe também uma diferença entre os níveis de temperatura também no sentido radial da câmara, pelo mesmo motivo já comentado.

Para melhor ilustrar a diferença existente entre as duas situações analisadas nas Figuras 6.8-a e 6.8-b, nas Figuras 6.9-a e 6.9-b são apresentadas as distribuições de concentração de monóxido de carbono, com e sem a presença de radiação térmica. Na Figura 6.9-a tem-se o campo de concentração de CO quando a radiação térmica está sendo resolvida. O caso contrário é mostrado na Figura 6.9-b. Verificam-se as mesmas características para as duas situações, entretanto a região ocupada pelo monóxido de carbono é menor para o caso sem radiação térmica.

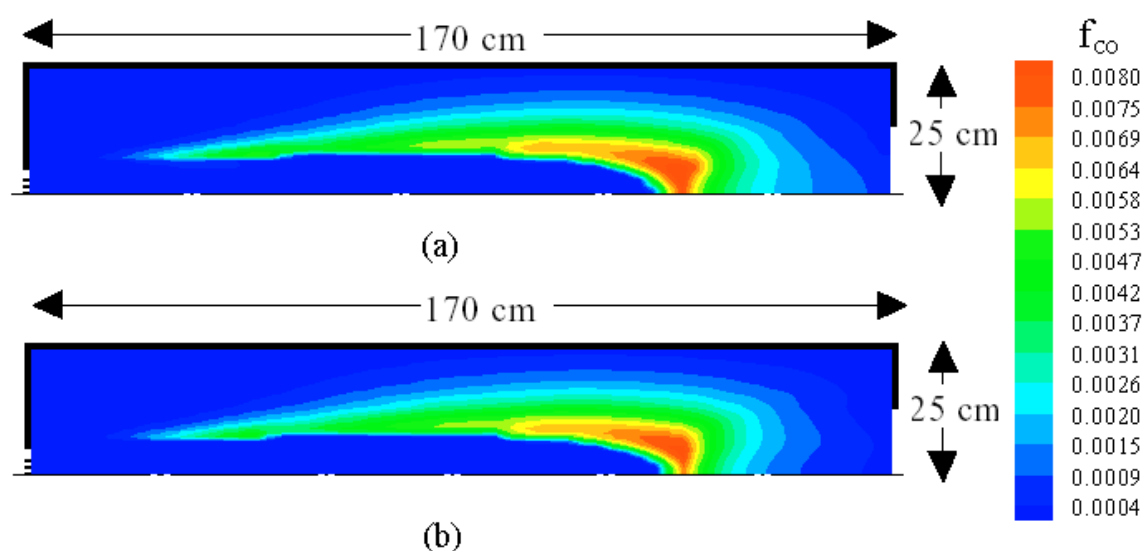


Figura 6.9 – Distribuição da concentração de monóxido de carbono na câmara de combustão: (a) Com radiação térmica; (b) Sem radiação térmica.

As Figuras 6.10-a, 6.10-b e 6.10-c mostram uma comparação entre os perfis de temperatura, com e sem transferência de calor por radiação térmica, ao longo do raio da câmara de combustão. Observa-se na Figura 6.10-a que houve um significativo aquecimento dos gases no interior da câmara do raio 0,025 m até 0,19 m, para o caso em que a troca de calor por radiação é calculada, onde a partir daí ocorre uma inversão nos perfis. Este

aquecimento deve-se à absorção do calor que é emitido da região de temperaturas mais altas, na saída da câmara. Analisando os dois casos para o raio de $0,1\text{ m}$ tem-se um aumento de aproximadamente 500 K . Também, no caso em que se considera a radiação térmica, a magnitude das temperaturas é menor a medida que se aproxima das paredes da câmara, como era esperado. Quando se considera a radiação térmica tem-se um aumento da transferência de calor dos gases quentes para as paredes da câmara, e desta para o exterior. Na Figura 6.10-b observa-se o mesmo comportamento apresentado na Figura 6.10-a. Na Figura 6.10-c

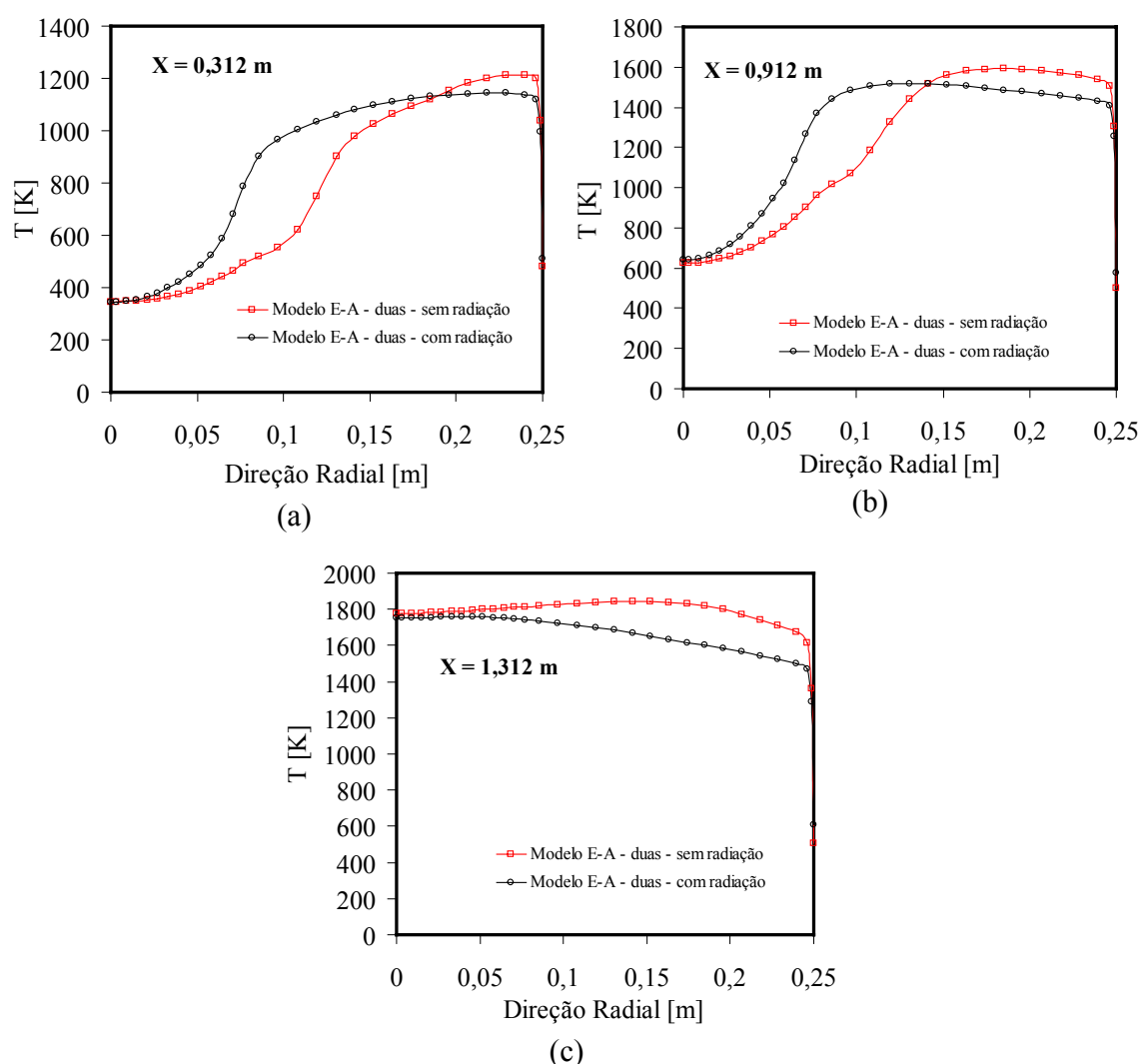


Figura 6.10 – Análise do efeito da radiação térmica na distribuição de temperatura sobre posições radiais: (a) $0,312\text{ m}$ da entrada; (b) $0,912\text{ m}$ da entrada; (c) $1,312\text{ m}$ da entrada.

verifica-se um comportamento diferente. Sobre a posição axial $1,312\text{ m}$ está a região das mais altas temperaturas no interior da câmara. Esta região está emitindo energia por radiação para os gases à montante, perdendo mais energia, baixando a temperatura dos gases.

Nas Figuras 6.11-a, 6.11-b e 6.11-c estão apresentadas comparações entre os perfis de concentração de oxigênio, com e sem transferência de calor por radiação térmica, ao longo do raio da câmara de combustão para as mesmas posições axiais das Figuras 6.10-a, 6.10-b e 6.10-c, obtidos com o mesmo modelo. Analisando a Figura 6.11-a verifica-se que houve um

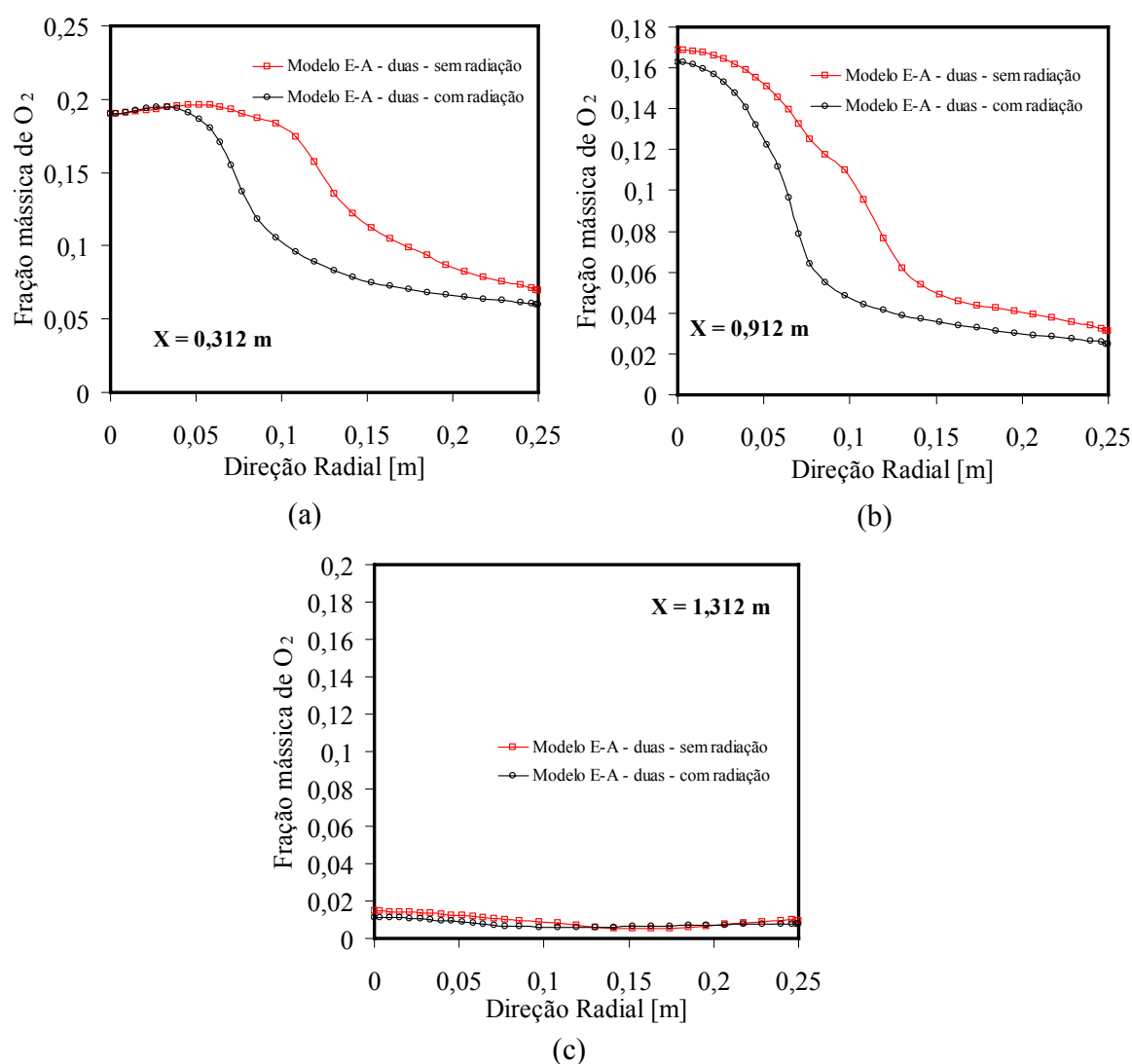


Figura 6.11 – Análise do efeito da radiação térmica na concentração de oxigênio sobre posições radiais: (a) $0,312\text{ m}$ da entrada; (b) $0,912\text{ m}$ da entrada; (c) $1,312\text{ m}$ da entrada.

aumento no consumo de oxigênio quando se considera troca de calor por radiação térmica. Isto pode ser justificado pelo aumento na temperatura dos gases nesta região, seguido também de um aumento da turbulência e por conseqüência das taxas de reações químicas, que por sua vez também aumentam a temperatura dos gases, melhorando a eficiência de queima no progresso de combustão. Na Figura 6.11-b verifica-se um comportamento semelhante ao apresentado na Figura 6.11-a. Entretanto na Figura 6.11-c ocorre uma pequena diminuição na concentração de oxigênio quando se considera radiação térmica, que praticamente não altera os resultados. Isso está associado ao aumento do consumo de oxigênio nas regiões que antecedem esta posição, resultando numa menor quantidade desta espécie química para abastecer a reação. Esta pequena diminuição na concentração de oxigênio é responsável também pela diminuição das taxas de reação química, pela diminuição da temperatura e pelo aumento na concentração de monóxido de carbono, apresentada na Figura 6.8-b, originado da combustão incompleta do metano.

As Figuras 6.12-a, 6.12-b e 6.13 mostram uma comparação entre os perfis de concentração de dióxido de carbono, com e sem transferência de calor por radiação térmica, ao longo do raio da câmara de combustão. Verifica-se, quando existe troca de calor por radiação

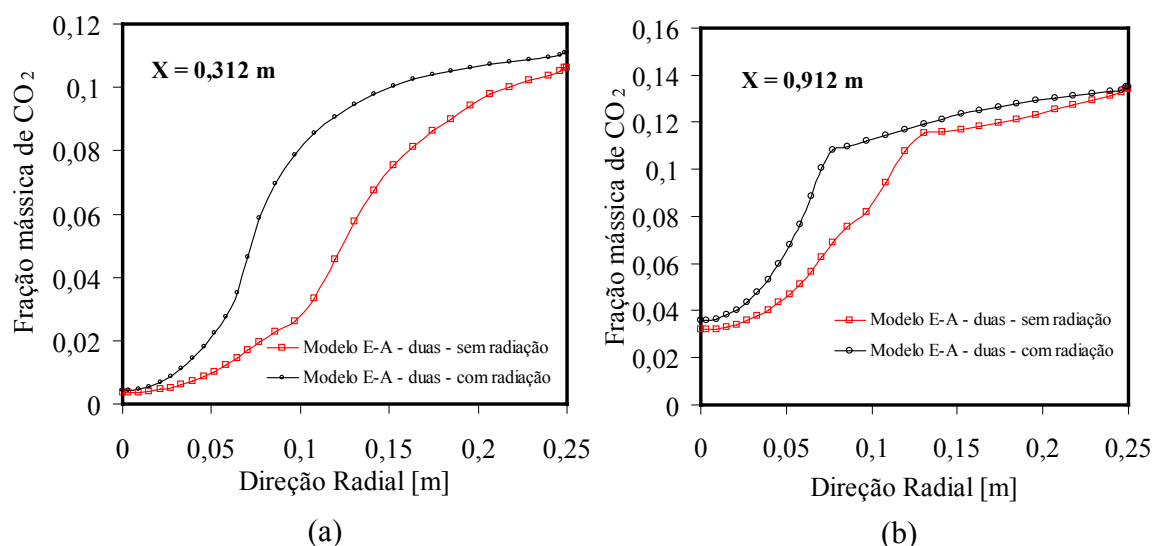


Figura 6.12 – Análise do efeito da radiação térmica na concentração de dióxido de carbono sobre posições radiais: (a) 0,312 m da entrada; (b) 0,912 m da entrada.

térmica, também um aumento na concentração de CO_2 para as posições axiais de 0,312 m e 0,912 m da entrada, assim como uma diminuição nesta concentração para a posição 1,312 m da entrada. O aumento na concentração de dióxido de carbono está associado ao aumento de temperatura, e por consequência à alterações nos níveis de turbulência do escoamento ($\rho(T, f_\alpha), \mu_t(\rho)$) e das taxas de reações químicas, assim como no aumento do consumo de oxigênio. A situação em que se tem diminuição na concentração de CO_2 , Figura 6.13 (caso com radiação térmica), pode ser relacionada também à modificação da magnitude de temperaturas, porém neste caso diminuição devido à emissão de calor, além da diminuição da concentração de oxigênio, que foi consumido antes. Conforme a Figura 6.6-b o consumo de

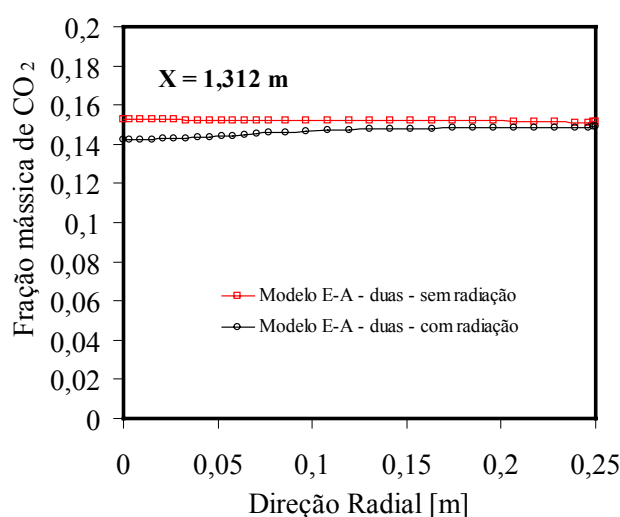


Figura 6.13 – Análise do efeito da radiação térmica na concentração de dióxido de carbono sobre a posição radial a 1,312 m da entrada.

combustível não é alterado, e na falta de oxigênio para abastecer a reação química surge a combustão incompleta, e como resultado o aumento na geração de monóxido de carbono, conforme já mencionado.

Fazendo um balanço energético sobre a câmara de combustão, para a situação em que radiação térmica não está sendo considerada, tem-se um fluxo energético na entrada de aproximadamente 1340,1 kW/rd , referentes à entalpia do combustível na temperatura de 313,15 K , mais 10383,5 kW/rd , referentes à entalpia do ar na temperatura de 323,15 K , e mais 89373,4 kW/rd , referentes à entalpia de combustão do gás natural. Isso resulta

num total de $101096,9 \text{ kW/rd}$. Na saída tem-se, devido a quantidade de combustível não queimado, um fluxo energético de $1355,8 \text{ kW/rd}$, mais um fluxo de gases quentes oriundos da combustão com $84770,9 \text{ kW/rd}$, e mais os fluxos de energia pelas paredes da câmara de $12500,8 \text{ kW/rd}$, resultando num total de $98627,6 \text{ kW/rd}$. Com esta análise é possível verificar que a perda de energia para o exterior através das paredes da câmara representa cerca de 14,51 % da energia total gerada na combustão. A diferença entre a quantidade de energia que entra e a que sai, cerca de 2,44 %, é resultante do critério de convergência usado.

Fazendo o mesmo para a situação de combustão com a consideração da presença de trocas de calor por radiação térmica nos cálculos da combustão tem-se um fluxo energético na entrada de aproximadamente $1340,1 \text{ kW/rd}$, referentes à entalpia do combustível na temperatura de $313,15 \text{ K}$, mais $10383,5 \text{ kW/rd}$, referentes à entalpia do ar também na temperatura de $323,15 \text{ K}$, e mais $89373,3 \text{ kW/rd}$, referentes à entalpia de combustão do gás natural. Isso resulta num total de $101096,9 \text{ kW/rd}$. Na saída tem-se, novamente devido a quantidade de combustível não queimado, um fluxo energético de $925,5 \text{ kW/rd}$, mais um fluxo de gases quentes com $74514,2 \text{ kW/rd}$, e mais os fluxos de energia pelas paredes da câmara de $24546,1 \text{ kW/rd}$, resultando num total de $99985,9 \text{ kW/rd}$. Verifica-se novamente, analisando o balanço, que a perda de energia para o exterior através das paredes representa, cerca de 24,55 % da energia total gerada na combustão, é cerca de 96 % maior do que no caso sem radiação. A diferença entre a quantidade de energia que entra e a que sai, cerca de 1,10 %, assim como na situação anterior é resultante do critério de convergência. A Tabela 6.3 mostra, de forma resumida, os principais fluxos de calor citados acima.

Tabela 6.3 – Análise dos fluxos de calor sobre a câmara de combustão

Entrada [W/rd]		Saída [W/rd]		
			Sem radiação	Com radiação
Entalpia do comb.	1340,1	Comb. não queimado	1355,8	925,5
Entalpia do ar	10383,5	Entalpia de saída	84770,9	74514,2
Energia do comb.	89373,4	Paredes	12500,8	24546,1
Total	101096,9	Total	98627,6	99985,9

Analisando a eficiência de queima verifica-se que, para o caso de combustão sem

a consideração de transferência de calor por radiação térmica, a eficiência de queima ficou em aproximadamente 98,48 %. No caso oposto, quando se considera radiação térmica, a eficiência praticamente não se altera, ficando em 98,96%. Ao analisar as duas situações verifica-se que a quantidade de energia desperdiçada com o combustível não queimado é pequena, e que a troca de calor por radiação praticamente não afeta o consumo de combustível, conforme já visto ao se analisar a Figura 6.6-b. Mas é importante na homogeneização do campo de temperaturas e na taxa total de transferência de calor, influenciando nas taxas de reações químicas e nas concentrações dos produtos da combustão. A diferença apresentada entre as duas situações pode também estar associada aos critérios de convergência usados na solução do problema.

Fazendo uma análise dos fluxos de calor apresentados nota-se que a quantidade de calor perdido pelas paredes da câmara para o exterior são bastante significativas com relação a quantidade de calor perdida nos gases de saída da câmara. Isso está associado às condições externas de temperatura e ao coeficiente de troca de calor adotado. Verifica-se também que a transferência de calor por radiação aumenta bastante a taxa de transferência de calor pelas paredes da câmara.

As Figuras 6.14-a, 6.14-b e 6.14-c mostram o efeito da transferência de calor por radiação através das paredes da câmara. Nestas figuras a linha com marcadores retangulares representa o fluxo total de calor para o exterior a câmara (convecção + radiação). Na Figura 6.14-a verifica-se que os fluxos de calor por convecção e radiação se alternam e apresentam as mesmas magnitudes. Na Figura 6.14-c verifica-se que, até a distância de 60 *cm* da entrada, os fluxos de calor por radiação e convecção são praticamente coincidentes e apresentam as mesmas características. A partir desta posição os fluxos de calor por radiação que chegam na parede periférica da câmara começam a ser mais importantes. Estas paredes, além de apresentar característica geométrica adequada à recepção da radiação térmica, estão envolvendo a região onde estão presentes os gases com os maiores níveis de temperatura, o que tende a amplificar as trocas térmicas. A distância entre os gases quentes e as paredes também é responsável por isso. Os fluxos de calor mostrados na Figura 6.14-b apresentam as mesmas características da mostradas dos fluxos de calor apresentados na Figura 6.14-a.

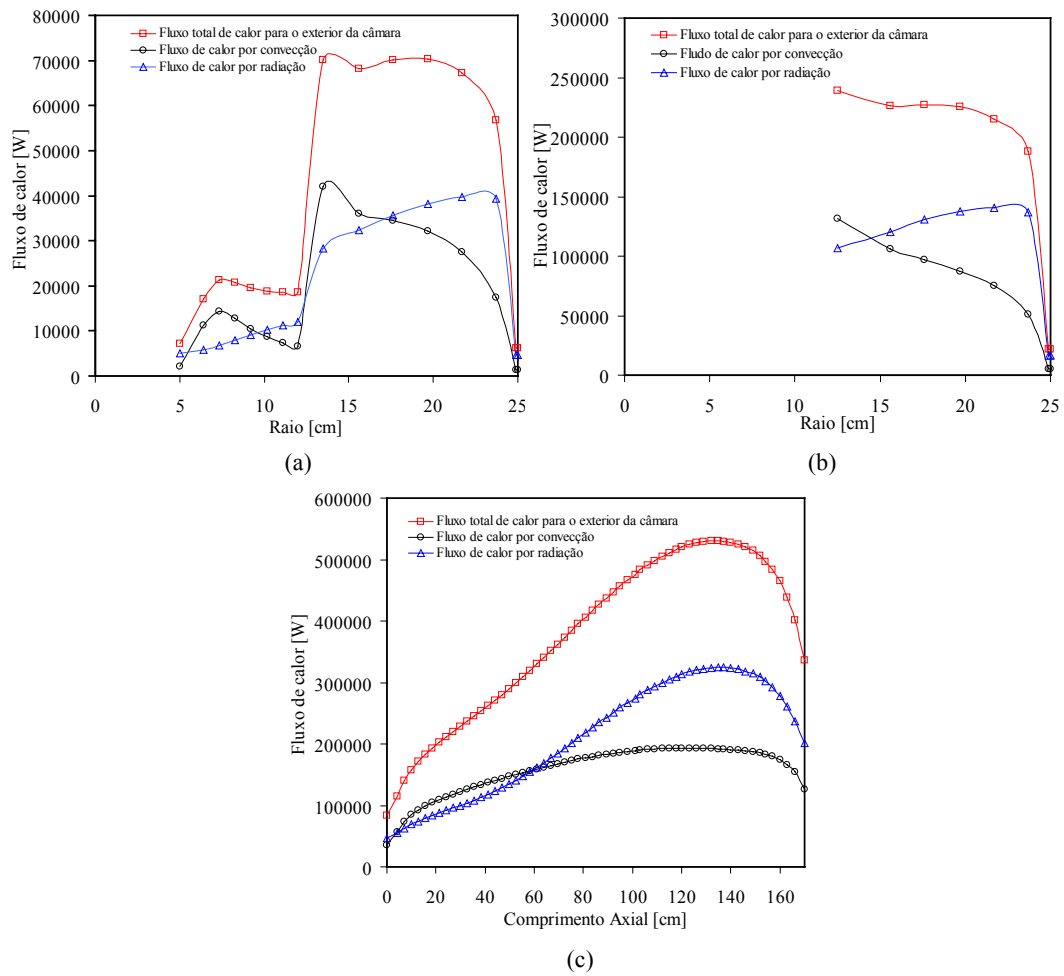


Figura 6.14 – Fluxos de calor sobre as paredes da câmara: (a) Parede radial na região de entrada; (b) Parede periférica da câmara; (c) Parede radial na região de saída.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES FINAIS E PROPOSTAS PARA CONTINUAÇÃO DO TRABALHO

7.1 Conclusões

O desenvolvimento de modelagens matemáticas para fluxos reativos entre combustíveis e oxidantes possui um papel muito importante na compreensão dos processos de combustão. O presente estudo foi desenvolvido para obter uma modelagem detalhada da combustão turbulenta de combustíveis gasosos em câmaras cilíndricas, a fim de se obter um maior entendimento dos fenômenos de transporte envolvidos. A modelagem desenvolvida foi fundamentada nas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento, de energia e de espécies químicas. O modelo k - ϵ padrão foi utilizado para representar a turbulência presente no escoamento dos gases. As taxas de reações químicas foram determinadas através de dois modelos diferentes: o modelo SCRS – *Simple Chemically-Reacting Systems*, que assume taxas instantâneas de reações químicas, e o modelo E-A – *Eddy Breakup - Arrhenius*, que considera taxas finitas de reações. A radiação térmica foi modelada através do Método das Zonas, sendo o modelo da soma ponderada de gases cinzas, WSGGM, usado na determinação do espectro de emissão e absorção dos gases no processo de combustão. Para a solução destas equações diferenciais, juntamente com os modelos de turbulência, de reações químicas e radiação térmica, fez-se o uso do Método dos Volumes Finitos.

A validação da modelagem apresentada foi feita através de comparação dos resultados obtidos com a presente modelagem e dados experimentais encontrados na literatura, para um processo de combustão numa câmara cilíndrica. A câmara de combustão usada foi a mesma abordada no *First Workshop on Aerodynamics of Steady State Combustion Cham-*

bers and Furnaces, organizado pela ERCORTAC - *European Research Community On Flow Turbulence And Combustion* [Garréton e Simonin, 1994]. Utilizou-se o gás natural como combustível e o ar atmosférico como oxidante. O processo de combustão sem pré-mistura foi resolvido para a condição de excesso de combustível de 5 % para ambos os modelos, onde o gás natural foi injetado por um duto circular central, e o ar atmosférico por um orifício anular externo a esse duto, no mesmo plano. Como o modelo SCRS assume taxas instantâneas de reações químicas, um processo de combustão não estagiada, com apenas uma etapa global de reação química, foi assumido. Para o modelo E-A duas situações foram resolvidas: combustão não estagiada, com uma etapa global de reação química; e reação química estagiada, com duas etapas globais. As forças de empuxo não foram consideradas neste trabalho, já que o problema resolvido foi assumido como sendo convectivo dominante.

Os resultados obtidos com o modelo SCRS para a distribuição de temperaturas, em termos de tendências gerais, são razoáveis. Já as concentrações de espécies químicas não apresentam resultados satisfatórios. Apenas a distribuição da concentração de combustível sobre a linha de simetria da câmara apresenta bons resultados. Este modelo, além de não ser capaz de prever as concentrações de vapor d'água, dióxido e monóxido de carbono, também não é capaz de prever corretamente as concentrações de oxigênio, pois assume que somente uma destas espécies pode ocupar um mesmo volume de controle, anulando a outra. Deste modo na região central da chama, próximo à linha de simetria, onde deveria existir uma mistura destas espécies químicas, o modelo SCRS apresenta dados inconsistentes e não realísticos para a fração mássica desta espécie química. Na região central, junto à linha de simetria, o modelo SCRS também não consegue prever de forma correta a distribuição de temperaturas. No centro da chama as taxas de reações químicas são mais baixas e governadas por cinética química. Como o SCRS assume $Da \gg 1$ para todo o campo, as reações químicas nesta posição não são determinadas de forma correta, portanto mais altas do que deveriam ser, causando um aumento abrupto e exagerado na temperatura dos gases, tornando a superfície de reação química, ou superfície de chama, muito delgada. Nos resultados dos perfis radiais de temperatura calculados com o SCRS existe, de forma concentrada, a produção de uma grande quantidade de energia na região ocupada pela chama anelar, que é fina, causando picos de temperatura nestas posições. À medida que o raio aumenta estes picos se atenuam, apresentando níveis de temperatura inferiores aos

dados experimentais, já que a maior parte da energia gerada na combustão foi consumida antes. Na região próxima da saída da câmara, onde praticamente não mais existe reações químicas, os resultados de temperatura obtidos com o SCRS são melhores que os obtidos com o modelo E-A, apresentando uma melhor concordância com os dados experimentais.

Para o modelo E-A os resultados apresentam boa concordância com os dados experimentais, principalmente para a situação em que o processo de combustão foi assumido em duas etapas globais de reação química. Verificou-se que os resultados obtidos com o modelo E-A apresentaram praticamente as mesmas tendências dos dados experimentais. Para este modelo, como as reações químicas ocorrem a taxas finitas, a superfície da chama é mais espessa, representando de forma mais realística o processo de combustão. Quando duas etapas globais de reações químicas foram consideradas, os resultados obtidos para a distribuição de temperaturas, principalmente junto à linha de simetria, concordaram muito bem com os dados experimentais. Os resultados da distribuição da concentração de dióxido de carbono também apresentaram boa concordância. Já os resultados da distribuição de monóxido de carbono, tanto sobre a linha de simetria quanto ao longo do raio na posição axial, a 1,313 *m* da entrada, ficaram um pouco sub-preditos, porém com as mesmas tendências apresentadas nos dados experimentais. Ainda com o modelo E-A, quando se assume apenas uma etapa global de reações químicas, o jato central da chama, onde acontece o pré-aquecimento dos gases, se extingue antes aumentando de forma prematura a temperatura destes gases, e também o consumo das espécies químicas reagentes (oxigênio e metano). Por este motivo, embora apresentando as mesmas tendências gerais, a distribuição das frações de dióxido de carbono ficou sobre-predita. Nesta situação assumiu-se combustão completa, logo não foi possível determinar as concentrações de monóxido de carbono.

A fim de verificar o grau de importância da transferência de calor por radiação no processo de combustão foram realizadas simulações de fluxos reativos turbulentos de gás natural e ar atmosférico, sem pré-mistura, com e sem a presença da radiação térmica. Para verificar o papel desempenhado pela radiação térmica dos gases de combustão no processo de transferência de calor assumiu-se uma câmara de combustão cilíndrica com paredes d'água. A injeção do combustível e do oxidante foi feita através de um queimador central, semelhante ao usado para validar a modelagem, porém com dois orifícios concêntricos para injeção de combustível. Nesta situação o efeito do *swirl* (20 % da velocidade axial de entrada) sobre

a injeção de ar foi computado através da condição contorno da equação de conservação da quantidade de movimento angular. Para esta análise apenas o modelo E-A, com duas etapas de reações químicas, foi considerado, já que o mesmo apresentou os melhores resultados. Verificou-se que a presença da radiação térmica funciona como um agente homogeneizador do campo de temperatura dos gases no interior da câmara, baixando-a nas regiões originalmente de picos, e aumentando-a nas regiões originalmente mais baixas. Com isso verificou-se também alterações nas taxas de reações químicas, modificando a magnitude das frações dos reagentes, principalmente oxigênio, e também dos produtos da combustão (dióxido e monóxido de carbono). Além disso, quando a radiação térmica foi considerada, surgiram efeitos de extinção local da chama nas regiões de temperaturas mais altas, diminuindo o consumo de oxigênio e aumentando a produção de monóxido de carbono, caracterizando assim uma combustão incompleta. Em algumas situações, a montante da chama, obteve-se uma variação de temperatura de até 500 K . A radiação térmica também aumentou a taxa de transferência de calor dos gases quentes para as paredes da câmara, e desta para o seu exterior. Em determinadas situações os fluxos de calor por radiação térmica, dos gases quentes no interior da câmara para as paredes, se mostrou mais importante do que os fluxos de calor por convecção. A presença da transferência de calor por radiação não afetou o consumo de combustível sobre a linha de simetria (região central do jato de entrada), mantendo inalterada a eficiência de queima do processo de combustão.

O modelamento matemático do transporte de calor, de massa, e de quantidade de movimento em processos de combustão, e sua relevante importância no desenvolvimento de procedimentos ótimos de queima, foram revisados e discutidos neste trabalho. Constatou-se, a partir dos resultados apresentados, que os modelamentos teóricos são bastante úteis na predição do comportamento dos fenômenos presentes na combustão. Mostrou-se também que a radiação térmica não pode ser desconsiderada em processos de combustão deste tipo.

O modelamento apresentado pode também ser estendido ao estudo de processos de combustão em câmaras cilíndricas de diferentes dimensões, para diferentes tipos de combustíveis gasosos e para diferentes processos de queima, chamas difusivas ou chamas pré-misturadas.

7.2 Propostas para Continuação do Trabalho

Alguns fenômenos físicos associados aos processos de combustão de diferentes tipos de combustíveis ainda permanecem não resolvidos. Ao longo desta pesquisa verificou-se que a maioria dos trabalhos apresenta nível de detalhamento elevado na determinação das taxas de reações químicas, porém o escoamento dos gases e o transporte das espécies químicas não são bem resolvidos. De forma oposta outros trabalhos apresentam bom nível de detalhamento no escoamento dos gases e pouco enfoque com relação às reações químicas. Outros ainda apresentam razoável detalhamento para as duas situações mas desconsideram, ou calculam de forma grosseira, a transferência de calor por radiação. Deste modo verifica-se que existe uma grande perspectiva quanto ao surgimento de novas modelagens capazes de abordar o problema de forma mais detalhada em todos os fenômenos presentes. Com certeza o surgimento de computadores mais rápidos contribuirá para isso. Sendo assim algumas propostas relativas à continuação deste trabalho são apresentadas a seguir:

1. Testar a modelagem desenvolvida para processos de combustão com pré-mistura;
2. Verificar a influência das forças de empuxo sobre o escoamento;
3. Verificar a influência do turbilhonamento sobre as taxas de reações químicas, já que o mesmo tende a melhorar a taxa de mistura dos fluidos e intensidade de turbulência;
4. Fazer uma análise da sensibilidade dos parâmetros usados nas equações de reações químicas do modelo E-A, a fim de verificar a influência destes nos resultados;
5. Implementar modelos de turbulência mais sofisticados;
6. Resolver processos de combustão com outros combustíveis, tais como o GLP;
7. Testar outros modelos de reações químicas, tais como modelos de escoamentos turbulentos reativos, que são capazes de resolver de forma mais detalhada a cinética química do processo de combustão;
8. Utilizar a modelagem para câmaras de combustão de diferentes tamanhos e diferentes razões de ar e combustível, a fim de extrair possíveis correlações que possam ser usadas, juntamente com modelagens algébricas (como as apresentadas no Anexo B), em softwares como o IHT, IT, IPSEpro, etc.;

9. Finalmente, utilizar a modelagem apresentada para aplicações práticas.

ANEXO A

PROCESSOS DE COMBUSTÃO

Os principais problemas mundiais de geração de energia e emissão de poluentes na atmosfera são oriundos principalmente da queima de combustíveis fósseis em câmaras de combustão [Carvalho et al., 1993]. Deste modo, o aperfeiçoamento nos projetos, e melhorias nas condições de operação da câmara de combustão, podem resultar em soluções importantes com relação ao consumo de energia e a redução da emissão de poluentes, incluindo CO_2 . Para alcançar estes objetivos, um melhor entendimento dos fenômenos físicos presentes em câmaras de combustão se faz necessário. Porém a multiplicidade de interações entre estes fenômenos físicos, principalmente a turbulência, a combustão, a cinética química, a transferência de calor, e os fluxos multifásicos, constituem um grande desafio para a compreensão e solução do problema. O modelamento matemático de câmaras de combustão levando em conta todos estes fenômenos é possível [Carvalho et al., 1993], e o sucesso dos resultados deste modelamento depende principalmente da maneira com que se trata o problema. Quando se resolve o problema levando em conta um número grande de equações representativas dos fenômenos presentes na combustão, tem-se também a necessidade de utilização de programas computacionais sofisticados. Muitas vezes isso se torna demasiadamente oneroso e demorado, não atendendo às necessidades de um engenheiro projetista, por exemplo. Deste modo, o desenvolvimento de modelos mais simplificados e que representem de forma realista o fenômeno se torna importante. Para que os modelos forneçam bons resultados, estes devem ser corretamente ajustados, com base em dados obtidos experimentalmente, ou com soluções obtidas através de simulações empregando modelos mais completos.

Neste capítulo estão apresentados alguns princípios da combustão, além de um modelamento simplificado, obtido através de balanços globais de massa e de energia numa

câmara de combustão genérica. Este modelamento é fundamentalmente representado por equações algébricas, solúveis através de métodos iterativos ou diretos, utilizados por diversos softwares comerciais disponíveis no mercado, tais como o TRANSYS [Klein, 1994b], EES [Klein, 1994a], IHT [Intellipro, 1996], IT [Intellipro, 1999], o MATLAB [MathWorks, 1999], o IPSEpro [SimTech, 2000], dentre outros.

A.1 Princípios da Combustão

A nível industrial combustão pode ser definida como a reação química na qual um oxidante (oxigênio) reage com um determinado redutor (combustível), liberando energia.

Combustíveis à base de hidrocarbonetos são constituídos principalmente por hidrogênio (H) e carbono (C). A combustão completa destes elementos produz principalmente gás carbônico (CO_2) e água (H_2O), além de quantidades pequenas de monóxido de carbono (CO). Alguns reagentes de combustão parcial também podem ser formados, tais como os NO_x , oriundos da oxidação do nitrogênio. A maioria dos combustíveis convencionais também contém pequenas quantidades de enxofre (S). Este enxofre também é oxidado durante a combustão formando dióxido de enxofre (SO_2) ou trióxido de enxofre (SO_3). Os combustíveis podem conter ainda substâncias não oxidantes como matéria mineral (cinza), água e gases inertes.

A combustão depende basicamente de: (1) da taxa de reação química dos componentes do combustível com o oxigênio, (2) da taxa na qual é provido oxigênio ao combustível (mistura de ar e combustível), e (3) da temperatura e da pressão da região de combustão [Babcock e Wilcox, 1972]. A taxa de reação química dos componentes do combustível com o oxigênio é fixada pelo combustível selecionado através de suas propriedades, sendo que um aumento na taxa de mistura ou na temperatura destes gases aumenta esta taxa de reação [ASHRAE, 2000]. A variação destes parâmetros pode influenciar diretamente na eficiência do processo de queima do combustível. Com a combustão completa de combustíveis à base de hidrocarbonetos, em condições de estequiometria ou excesso de ar, todo o hidrogênio e o carbono são oxidados formando H_2O e CO_2 . Em uma idealização do processo de combustão, a chamada combustão estequiométrica, o combustível reage com a quantidade exata de oxigênio exigida para oxidar todo o carbono, hidrogênio, e enxofre no combustível, obtendo CO_2 , H_2O e SO_2 [Kuo, 1986; ASHRAE, 2000]. Deste modo, o gás produzido pela combustão

estequiométrica teoricamente não contém componentes do combustível incompletamente oxidados, e nenhum oxigênio que não tenha reagido. A percentagem de CO_2 contida em produtos da combustão estequiométrica é o máximo atingível. A combustão estequiométrica é raramente realizada na prática, devido à misturas imperfeitas e taxas de reação química finitas. Para segurança e economia, a maioria dos equipamentos de combustão devem operar com algum excesso de ar. Isso assegura que não seja desperdiçado combustível, e que a combustão seja completa apesar de variações nas propriedades do combustível e na taxa de fornecimento de combustível e ar.

A combustão incompleta além de possuir baixa eficiência por desperdiçar combustível, é também bastante perigosa, principalmente por causa da produção de monóxido de carbono (CO), substância tóxica e poluente. As condições que promovem combustão incompleta incluem (1) insuficiente mistura do ar e do combustível, (2) provisão insuficiente de ar para a chama, (3) tempo insuficiente de residência dos reagentes na chama, (4) incidência da chama em uma superfície fria e (5) temperatura da chama muito baixa [Babcock e Wilcox, 1972]. Fica claro que a combustão incompleta é de forma alguma desejável quando o objetivo é obter energia térmica.

A.2 Reações de Combustão

A reação do oxigênio com os elementos e compostos do combustível acontece de acordo com princípios químicos que incluem:

1. Mecanismos de reação química;
2. Lei da conservação de massa: A massa de cada elemento nos produtos da reação tem que se igualar à massa daquele elemento nos reagentes;
3. Lei de combinação das massas: compostos químicos são formados por combinação de elementos em relações de massa fixas;
4. Taxas de reação química: Frequências em que ocorrem determinadas reações químicas no processo.

O oxigênio para a combustão é obtido do ar, que pode ser considerado uma mistura de nitrogênio, oxigênio, quantias pequenas de vapor d'água, gás carbônico, e gases inertes.

Para cálculos práticos de combustão, pode-se considerar o ar seco padrão, que consiste em 21% de oxigênio e 79% de gases inertes (principalmente o nitrogênio, e argônio) em volume, ou 23,15% de oxigênio e 76,85% de gases inertes em massa [Kuo, 1986; ASHRAE, 2000]. Para fins de cálculo aproximado de liberação de energia, pode-se assumir que o nitrogênio atravessa o processo de combustão sem sofrer nenhuma alteração, além do seu aquecimento. Algumas tabelas contendo as exigências de oxigênio e ar, e produtos obtidos com a combustão estequiométrica de algumas substâncias podem ser encontradas em Fryling [1967], Babcock e Wilcox [1972] e ASHRAE [2000].

A.3 Cálculos Práticos de Combustão

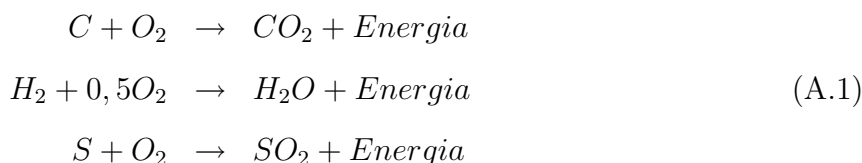
Freqüentemente se faz necessário desenvolver cálculos da quantidade de ar requerido para a combustão, e a quantidade de produtos (gás de exaustão) gerados durante o processo. O objetivo usualmente é dimensionar componentes de sistemas ou ainda, para cálculos de eficiência. Outros cálculos, como valores para ar de excesso, e CO_2 teórico, que é a quantidade de dióxido de carbono produzida na combustão estequiométrica de um combustível fóssil, também são úteis no cálculo do desempenho de sistemas de combustão.

Na sequência desta seção será apresentada uma metodologia prática para se analisar e calcular processos de combustão. Esta metodologia baseia-se principalmente em equações algébricas de balanço de massa sobre as reações químicas presentes no processo de combustão. Como será visto posteriormente neste capítulo, este tipo de modelagem é bastante útil quando se deseja analisar processos de combustão de maneira direta, ou fazendo o uso de softwares algébricos, que utilizam *solvers* de solução de equações através de métodos iterativos, como por exemplo o método Newton-Raphson [Stoecker, 1989].

A.3.1 Quantidade Teórica de Ar Seco Necessária à Combustão

Assumindo que o processo de combustão ocorra sob condições estequiométricas, os três elementos mais comuns em hidrocarbonetos combustíveis que queimam completamente são o carbono, o hidrogênio, e o enxofre. As reações químicas para estes elementos são as

seguintes,



Nas reações acima, podem ser considerados o C, H₂, e S representando 1 *kmol* de carbono, hidrogênio, e enxofre, respectivamente. Usando massas atômicas aproximadas (C = 12,01; H = 1,008; S = 32,06; O = 16), as equações acima mostram que 12,01 *kg* de C são oxidados por 32 *kg* de O₂ para formar 44,01 *kg* de CO₂, 2,016 *kg* de H₂ são oxidados por 16 *kg* de O₂ para formar 18,016 *kg* de H₂O, e 32,06 *kg* de S são oxidados por 32 *kg* de O₂ para formar 64,06 *kg* de SO₂. Estas relações podem ser estendidas para incluir hidrocarbonetos, como por exemplo o metano (CH₄), principal componente do gás natural.

Como dito anteriormente, o ar seco padrão é composto em massa de aproximadamente 23,15% de oxigênio e 76,85% de gases inertes. Deste modo, a massa de ar seco exigida para prover uma determinada quantidade de oxigênio pode ser definida como, 1/0,2315, ou seja, cerca de 4,32 vezes maior que a massa do oxigênio. O oxigênio contido no combustível, a não ser que contido em cinzas, deve ser deduzido da quantidade de oxigênio requerida para a combustão, pelo fato deste oxigênio já estar combinado com componentes do combustível.

Cálculos de combustão para combustíveis gasosos na maior parte das situações estão baseados em volume. A Lei de Avogadro define que, para qualquer gás, um *mol* ocupa o mesmo volume a uma determinada temperatura e pressão [Babcock e Wilcox, 1972]. Deste modo, em reações que envolvem combinações gasosas, os gases reagem em relações de volume idêntico para as relações *mol*/grama.

Das relações descritas, a massa teórica de ar seco, m_{Ar}^t , é a quantidade de ar seco requerida para a combustão estequiométrica de uma massa unitária de qualquer hidrocarboneto combustível. Assim, pode-se calcular esta quantidade de ar através de cálculos estequiométricos das necessidades parciais de oxigênio requerido para as seguintes reações:

Oxidação do carbono - Da primeira reação química da Equação A.2, associada às massas atômicas dos seus elementos, pode-se observar que são necessários 32 *kg* de oxigênio para oxidar aproximadamente 12,01 *kg* de carbono, ou seja, a quantidade de oxigênio é cerca de 2,664 vezes maior que a quantidade de carbono.

Oxidação do hidrogênio - Da mesma forma descrita para a queima do carbono, na segunda reação química da Equação A.2 observa-se que são necessários 32 *kg* de oxigênio para oxidar cerca de 4,032 *kg* de hidrogênio. Relacionando estes dois valores verifica-se que a quantidade de oxigênio é aproximadamente 7,937 vezes maior que a quantidade de hidrogênio.

Oxidação do enxofre - Na terceira reação química da Equação A.2, seguindo a analogia acima, pode-se observar que a quantidade de oxigênio em massa equivale a 0,998 % da quantidade de enxofre.

Deste modo, a massa teórica de oxigênio requerida para a combustão estequiométrica de uma unidade de massa de combustível, $m_{O_2}^t$, supondo o combustível composto apenas de carbono, hidrogênio, oxigênio e enxofre, pode ser escrita como segue:

$$m_{O_2}^t = 2,664f_C + 7,937 \left(f_{H_2} - \frac{f_{O_2}}{7,937} \right) + 0,998f_S \quad (A.2)$$

onde f_{O_2} é a fração mássica de oxigênio, f_{H_2} é fração mássica de hidrogênio, f_C é a fração mássica de carbono, e f_S é a fração mássica de enxofre, presentes no combustível. No segundo termo do lado direito da igualdade levou-se em consideração a parcela de hidrogênio já combinada com o próprio oxigênio do combustível e que, naturalmente, não reagirá com o oxigênio do ar. Reescrevendo a Equação (A.2)

$$m_{O_2}^t = 2,664f_C + 7,937f_{H_2} + 0,998f_S - f_{O_2} \quad (A.3)$$

onde o último termo do lado direito da Equação A.3 representa a quantidade de oxigênio presente no combustível que está associada com o hidrogênio na forma de vapor d'água (umidade).

Como 1 *kg* de ar seco contém aproximadamente 0,2315 *kg* de oxigênio, dividindo a Equação A.3 por este valor obtém-se a massa de ar teórica necessária à combustão de 1 *kg* de combustível. Sendo assim

$$m_{Ar}^t = \frac{m_{O_2}^t}{0,2315} = 11,51f_C + 34,28f_{H_2} + 4,31f_S - 4,32f_{O_2} \quad (A.4)$$

A análise de um combustível gasoso é geralmente baseada nos componentes do combustível, mais que nos conteúdos elementares do hidrocarboneto. Se a análise do combustível é feita em relação a sua massa, da mesma forma que nas reações acima, a massa teórica de ar

seco requerida para a combustão estequiométrica de uma unidade de massa de combustível gasoso, supondo este combustível composto por monóxido de carbono, hidrogênio, metano, etano, propano, butano, acetileno, etileno, sulfato de hidrogênio e oxigênio pode ser definida como

$$\begin{aligned} m_{Ar}^t &= 2,47f_{CO} + 34,28f_{H_2} + 17,24f_{CH_4} + 16,09f_{C_2H_6} + 15,68f_{C_3H_8} \\ &+ 15,47f_{C_4H_{10}} + 13,27f_{C_2H_2} + 14,78f_{C_2H_4} \\ &+ 6,08f_{H_2S} - 4,32f_{O_2} \end{aligned} \quad (A.5)$$

onde f_{CO} é a fração mássica de monóxido de carbono, f_{CH_4} é a fração mássica de metano, $f_{C_2H_6}$ é a fração mássica de etano, $f_{C_3H_8}$ é a fração mássica de propano, $f_{C_4H_{10}}$ é a fração mássica de butano, $f_{C_2H_2}$ é a fração mássica de acetileno, $f_{C_2H_4}$ é a fração mássica de etileno, f_{H_2S} é a fração mássica de sulfato de hidrogênio, e os valores à frente destas frações são relativos às necessidades mássicas de oxigênio do ar para que ocorra a reação de oxidação do respectivo componente.

A.3.2 Quantidade Real de Ar Seco Necessária à Combustão

Em adição à quantidade teoricamente necessária para a combustão, um excesso de ar deve ser suprido à maioria dos sistemas de combustão reais para garantir a combustão completa. O excesso de ar pode ser definido pela seguinte equação:

$$\lambda = \frac{m_{Ar}^r}{m_{Ar}^t} \quad (A.6)$$

onde m_{Ar}^r é a massa de ar real a ser suprida para a combustão de uma unidade de massa de combustível. Deste modo,

$$m_{Ar}^r = m_{Ar}^t \lambda \quad (A.7)$$

O nível de excesso de ar no qual um processo de combustão opera, significativamente afeta sua eficiência global. Muito excesso de ar dilui o gás de combustão excessivamente e baixa sua temperatura disponível para a transferência de calor, aumentando a perda de calor sensível pelo gás de exaustão. Reciprocamente se o nível de excesso de ar é muito baixo, combustão incompleta e perda de gás combustível não queimado podem resultar. Maiores

eficiências de combustão normalmente são obtidas quando a justa quantidade de excesso de ar é provida, e corretamente misturada com os gases combustíveis, assegurando combustão completa [Kuo, 1986; ASHRAE, 2000; Turns, 2000]. A prática é prover de 5 a 50 % de ar de excesso, sendo que a quantia exata depende do tipo de combustível queimado, do equipamento de combustão, e de outros fatores tais como taxa de mistura ar/combustível, da velocidade de injeção, etc..

A.3.3 Quantidade Teórica de Gás Produzido na Combustão

A massa de gás seco produzida por massa de combustível queimado é necessária nos cálculos de eficiência e perdas de calor. Esta massa de gás de combustão pode ser obtida partindo-se de uma analogia semelhante a descrita para determinação da massa de ar, novamente supondo que o combustível seja composto apenas de carbono, hidrogênio, oxigênio e enxofre. Utilizando-se da primeira reação química da Equação A.2, respeitando o princípio de conservação de massa, verifica-se, através das massas atômicas dos elementos, que 12,01 *kg* de carbono produzem cerca de 44,01 *kg* de dióxido de carbono, ou seja, a massa de dióxido de carbono produzida equiivale a aproximadamente 3,664 vezes a massa de carbono. Para a combustão do hidrogênio, segunda reação da Equação A.2, pode-se verificar que 4,032 *kg* de hidrogênio produzem cerca de 36,032 *kg* de vapor d'água, aproximadamente 8,937 *kg* de vapor d'água, por *kg* de hidrogênio. Na última reação da Equação A.2, verifica-se que 32,06 *kg* de enxofre produzem 64,06 *kg* de dióxido de enxofre, resultando numa relação de 1,998 *kg* de dióxido de enxofre por *kg* de enxofre queimado. Deste modo, considerando-se que o oxidante seja oxigênio puro, para a queima de um combustível tem-se a produção de uma determinada quantidade de gás produto, que sob condições estequiométricas, pode ser calculada da seguinte forma:

$$m_{gas}^t = 3,664f_{CO_2} + 8,937f_{H_2O} + 1,998f_{SO_2} \quad (A.8)$$

Como o oxigênio é retirado do ar atmosférico, assumindo ar seco padrão, pode-se novamente escrever a Equação A.8 como

$$m_{gas}^t = 0,7685m_{Ar}^t + 3,664f_{CO_2} + 8,937f_{H_2O} + 1,998f_{SO_2} \quad (A.9)$$

Como feito acima para a determinação da massa de ar, a determinação da massa de gases de combustão pode ser determinada diretamente sobre os componentes do hidrocarboneto. Deste modo as razões mássicas de nitrogênio (r_{N_2}), dióxido de carbono (r_{CO_2}), vapor d'água (r_{H_2O}) e dióxido de enxofre (r_{SO_2}), presentes no gás de combustão, podem ser determinadas. Deste modo

$$r_{N_2} = 0,7685m_{Ar}^t \quad (A.10)$$

$$\begin{aligned} r_{CO_2} = & 1,571f_{CO} + 2,744f_{CH_4} + 2,927f_{C_2H_6} + 2,994f_{C_3H_8} \\ & + 3,029f_{C_4H_{10}} + 3,834f_{C_2H_2} + 3,138f_{C_2H_4} \end{aligned} \quad (A.11)$$

$$\begin{aligned} r_{H_2O} = & 8,937f_{H_2} + 2,246f_{CH_4} + 1,798f_{C_2H_6} + 1,634f_{C_3H_8} \\ & + 1,55f_{C_4H_{10}} + 0,692f_{C_2H_2} + 1,285f_{C_2H_4} \\ & + 0,528f_{H_2S} \end{aligned} \quad (A.12)$$

e

$$r_{SO_2} = 1,88f_{H_2S} \quad (A.13)$$

onde o somatório destas razões também resulta na massa teórica de gás de combustão, por quilograma de combustível.

A.3.4 Quantidade Real de Gás Produzido na Combustão

Resta ainda calcular a massa real de gás seco produzida a partir da massa de uma unidade de combustível queimado, incluindo o excesso de ar. Deste modo

$$m_{gas}^r = m_{gas}^t + (\lambda - 1)m_{Ar}^t \quad (A.14)$$

Para se obter as massas totais, ou as vazões mássicas dos gases participantes do processo de combustão, basta multiplicar cada uma das frações mássicas destes gases pela massa total de combustível, ou pela sua vazão mássica total, respectivamente.

A.4 Implementação de um Modelo de Câmara de Combustão no IPSEpro-MDK

O Desenvolvimento de uma biblioteca de modelos capazes de simular processos de combustão em câmaras no IPSEpro-MDK [SimTech, 2000] permite ao usuário do software calcular e analisar, de forma bastante rápida, o que está ocorrendo em um determinado equipamento. Ou ainda fazer o dimensionamento básico uma câmara de combustão, uma caldeira ou um forno. Porém, o uso deste tipo de software está limitado a solução de equações algébricas. A dedução de modelos deste tipo requer uma completa base de dados experimentais. Uma outra abordagem pode ser feita através de simulações numéricas com softwares e técnicas computacionais mais complexas, capazes de resolver equações diferenciais, e que forneçam resultados próximos da realidade. Com base no que foi dito acima, o ajuste de equações algébricas a partir de dados obtidos de simulações mais refinadas, tais como a solução de equações de conservação de massa, de energia, de quantidade de movimento, e de espécies químicas, acopladas à modelos de turbulência, de transferência de energia por radiação, e de reações de combustão, pode ser uma boa alternativa.

Como uma primeira análise, a obtenção de equações algébricas simplificadas através de balanços de energia e de massa sobre uma câmara de combustão genérica surge de forma oportuna. Deste modo, supõem-se uma câmara de combustão com superfície total de troca de calor A' , abastecida por uma descarga conhecida de gás natural $\dot{m}_{comb}$, produzindo uma quantidade de gás resultante do processo de combustão, também conhecida $\dot{m}_{gas}^r$. Pode-se obter, a partir de um balanço de energia, as equações capazes de calcular alguns parâmetros do processo de combustão, tais como a temperatura média dos gases e a quantidade de calor irradiado, por exemplo. As trocas de calor por radiação, Q_R , são descritas da seguinte forma [Incropera e DeWitt, 2002; Siegel e Howell, 2002]:

$$Q_R = A' \sigma (\varepsilon_g T_g^4 - \alpha_s T_s^4) \quad (A.15)$$

onde, pela lei de Kirchhoff, $\varepsilon_s = \alpha_s$. A emissividade do gás de combustão é representada por ε_g , α_s é a absortividade da superfície da câmara de combustão, σ a constante de Stefan-Boltzmann, e T_g e T_s as temperaturas do gás de combustão e da superfície da câmara de combustão, respectivamente. O fator de forma é considerado igual a uma unidade, por

tratar-se de uma chama no interior de uma cavidade.

A parcela restante é advectiva, desta forma pode-se escrever o seguinte balanço,

$$\dot{m}_{comb}PCI = Q_R + \dot{m}_{comb}m_{gas}^r c_{p,g}(T_g - T_{in}) \quad (A.16)$$

onde $\dot{m}_{comb}$ é a descarga de combustível, PCI é o poder calorífico inferior do combustível, $c_{p,g}$ é o calor específico dos gases da combustão completa de metano e T_{in} é a temperatura de entrada do ar e do combustível. Este calor específico, em kJ/kgK , corrigido pela temperatura, pode ser obtido da seguinte forma:

$$c_{p,g} = 0,9389 + 0,000197T_g \quad (A.17)$$

onde T_g é a mesma temperatura média dos gases de combustão da Equação (A.15).

Com estas equações, pode-se simular de forma aproximada uma câmara de combustão sendo abastecida por um determinado fluxo de combustível. A implementação destas equações no IPSEpro-MDK pode ser verificada na Figura A.1. Por questões de convergência, foram consideradas constantes a emissividade do gás e a absortividade das paredes da câmara de combustão.

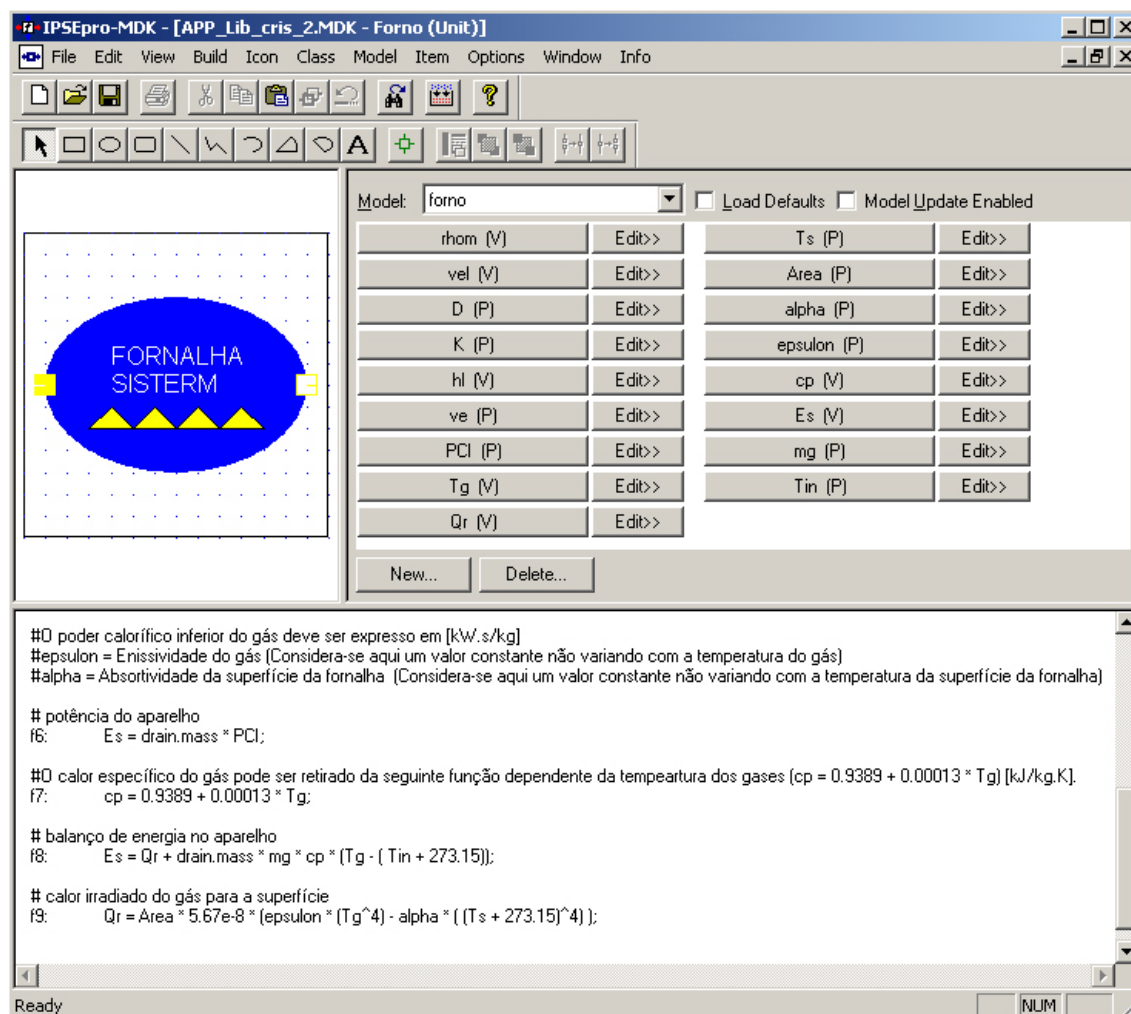


Figura A.1 – Implementação do modelo de câmara de combustão no IPSEpro-MDK.

ANEXO B

Propriedades Termodinâmicas

B.1 Substâncias Puras

Existem várias formas para se determinar as propriedades termodinâmicas das substâncias, como por exemplo, tabelas e equações matemáticas, que fornecem algumas propriedades a partir de outras já previamente determinadas, ou medidas. Para os gases de baixa densidade, os chamados gases ideais, o comportamento p - ϑ - T é obtido com bastante precisão pela seguinte equação de estado;

$$p\vartheta = RT \quad (\text{B.1})$$

onde p é a pressão, ϑ é o volume específico, R a constante dos gases, e T a temperatura.

Para gases que se desviam do comportamento de gás ideal, alguns ajustes devem ser feitos para que esta equação se torne adequada à situação. Deste modo

$$p\vartheta = zRT \quad (\text{B.2})$$

onde z é chamado de fator de compressibilidade. Este fator pode ser encontrado na literatura sob forma de diagramas para vários tipos de gases. Outros ajustes também são feitos para determinados gases em particular, os gases reais. Várias equações foram determinadas, sendo uma das mais conhecidas, a equação de Beattie-Bridgeman,

$$p = \frac{RT(1 - \zeta)}{\vartheta^2}(\vartheta + B) - \frac{A}{\vartheta^2} \quad (\text{B.3})$$

onde

$$A = A_o \left(1 - \frac{a}{\vartheta}\right) \quad (\text{B.4})$$

$$B = B_o \left(1 - \frac{b}{\vartheta}\right) \quad (\text{B.5})$$

e

$$\zeta = \frac{c}{\vartheta T^3} \quad (\text{B.6})$$

sendo A_o , B_o , a , b e c constantes empíricas dos gases.

Grande parte das equações de estado, em que a pressão é explícita, podem ser escritas na forma de expressões com dois parâmetros. Nestes casos, a equação de estado é dita cúbica [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982; Zhorov, 1987]. A forma da equação cúbica é

$$p = \frac{RT}{\vartheta - b} - \frac{a}{\vartheta^2 + c^*b\vartheta + d^*b^2} \quad (\text{B.7})$$

com

$$b = b_0 \frac{RT_c}{p_c} \quad (\text{B.8})$$

e

$$a = a_0 \frac{R^2 T_c^2}{p_c^2} \quad (\text{B.9})$$

onde o conjunto (a, b) representam parâmetros da equação, e (c^*, d^*) definem o modelo adotado para a substância. T_c é a temperatura crítica e p_c é a pressão crítica. A Tabela B.1 mostra os valores destes parâmetros para diferentes equações de estado.

Para as equações da Tabela B.1 o fator f pode ser obtido através de equações para os diferentes modelos. Deste modo:

Modelo de Soave

$$f = 0,48 + 1,574\iota - 0,176\iota^2 \quad (\text{B.10})$$

Tabela B.1 – Parâmetros das equações de estado [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982].

Modelo	c^*	d^*	b_0	a_0
Gás Perfeito	0	0	0	0
Van Der Walls	0	0	1/8	27/64
Redlich-Kwong	1	0	0,08664	$0,42748(T_r) - 1/2$
Soave	1	0	0,08664	$0,42748[1 + f(1 - (T_r)1/2)]2$
Peng-Robinson	2	-1	0,07780	$0,42748[1 + f(1 - (T_r)1/2)]2$

onde ι é o fator acêntrico definido como

$$\iota = -\log p_r(em \ T_r = 0,7) - 1,000 \quad (\text{B.11})$$

onde a temperatura e pressão reduzidas são:

$$p_r = \frac{p}{p_c} \quad (\text{B.12})$$

e

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (\text{B.13})$$

Modelo de Peng-Robinson

$$f = 0,37464 + 1,54226\iota - 0,26992\iota^2 \quad (\text{B.14})$$

Alguns valores para o fator acêntrico podem também ser encontrados em tabelas na bibliografia [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982; Zhorov, 1987].

Analisando o modelo de Van Der Walls obtém-se

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} \quad (\text{B.15})$$

onde a e b são constantes de ajuste, sendo o objetivo da constante b corrigir o volume ocupado pelas moléculas. O termo a/v^2 é uma correção que leva em conta as formas intermoleculares

de atração [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982; Zhorov, 1987].

Como é de se esperar, no caso de uma equação generalizada como a de Van Der Walls, as constantes a e b são calculadas a partir do comportamento geral dos gases. Estas constantes são calculadas observando que a isotérmica crítica passa por um ponto de inflexão sob o ponto crítico, e que esta inflexão é nula neste ponto [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982; Zhorov, 1987]. Assim para a equação de estado de Van Der Walls obtém-se

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \vartheta}\right)_T = -\frac{RT}{(\vartheta - b)^2} + \frac{2a}{\vartheta^3} \quad (\text{B.16})$$

e

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial \vartheta^2}\right)_T = \frac{2RT}{(\vartheta - b)^3} + \frac{6a}{\vartheta^4} \quad (\text{B.17})$$

Como ambas as derivadas são iguais a zero no ponto crítico escreve-se

$$-\frac{RT_c}{(\vartheta_c - b)^2} + \frac{2a}{\vartheta_c^3} = 0 \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{2RT_c}{(\vartheta_c - b)^3} + \frac{6a}{\vartheta_c^4} = 0 \quad (\text{B.19})$$

e

$$p_c = \frac{RT_c}{(\vartheta_c - b)} - \frac{a}{\vartheta_c^2} \quad (\text{B.20})$$

Resolvendo estas três equações obtém-se:

$$\vartheta = 3b \quad (\text{B.21})$$

$$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{p_c} \quad (\text{B.22})$$

e

$$b = \frac{RT_c}{8p_c} \quad (\text{B.23})$$

Uma outra equação bastante simples e mais precisa que a de Van Der Walls é a

equação proposta por Redlich-Kwong,

$$p = \frac{RT}{\vartheta - b} - \frac{a}{\vartheta(\vartheta - b)T^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{B.24})$$

onde pode-se definir

$$a = \frac{0,4275RT_c^{\frac{5}{2}}}{p_c} \quad (\text{B.25})$$

e

$$b = \frac{0,0866RT_c}{p_c} \quad (\text{B.26})$$

A equação de Benedict-Webb-Rubin é uma das equações de estado mais conhecida atualmente. Esta equação pode ser escrita da seguinte forma:

$$p = \frac{RT}{\vartheta} + \frac{RTB_0 - A_0 - C_0/T^2}{\vartheta^2} + \frac{RTb - a}{\vartheta^3} + \frac{a\varrho}{\vartheta^6} + \frac{c}{\vartheta^3T^2} \left(1 + \frac{\xi}{\vartheta^2}\right) e^{\frac{-\xi}{\vartheta^2}} \quad (\text{B.27})$$

onde ξ , ϱ , e C_0 são constantes empíricas dos gases. Os valores para as constantes da equação de Benedict-Webb-Rubin podem ser encontrados na Tabela B.2 para alguns fluidos simples.

Existem também equações de estado mais complexas como as de Barner-Adler, Sugie-Lu, e Lee-Kesler. Estas equações com seus parâmetros podem ser obtidas em Vielmo et al. [2001].

Para todas as equações apresentadas acima pode-se substituir a constante do gás R , pela constante universal dos gases $\bar{R}$, desde que se substitua também o volume específico ϑ , pelo volume específico molar $\bar{\vartheta}$.

B.2 Misturas de Substâncias

Para misturas de substâncias faz-se necessário determinar a fração molar y_α do componente α . Sendo assim define-se:

$$y_\alpha = \frac{n_\alpha}{n} \quad (\text{B.28})$$

onde, n_α é o número de moles do componente α , e n é o número total de moles na mistura. De maneira análoga a fração mássica do α -ésimo componente na mistura pode ser definida

Tabela B.2 – Constantes empíricas para as equações de Benedict-Webb-Rubin [Van Wylen et al., 1998].

Gás	A_0	B_0	a	b
Metano	1,85500	0,042600	0,49400 0	0,0033800
Etano	4,15556	0,062772	0,34516 0	0,0111220
Propano	6,87225	0,097313	0,94770 0	0,0225000
n-Butano	10,0847	0,124361	1,88231 0	0,0399983
Nitrogênio	1,19250	0,045800	0,01490 0	0,0019815
Oxigênio	1,49880	0,046524	-0,010507	0,0002796
Dióxido de Carbono	2,67340	0,043628	0,051689	0,0030819
Gás	$c.10^{-6}$	$\xi.10^2$	C_0	$\varrho.10^3$
Metano	0,0025450	0,600	0,022570	0,124359
Etano	0,0327670	1,180	0,179592	0,243389
Propano	0,1290000	2,200	0,508256	0,607175
n-Butano	0,3164000	3,400	0,992830	1,101320
Nitrogênio	0,0005480	0,750	0,000588	0,291545
Oxigênio	-0,0002037	0,359	0,003861	0,008641
Dióxido de Carbono	0,0070672	0,494	0,113330	0,112710

como

$$f_\alpha = \frac{m_\alpha}{m} \quad (\text{B.29})$$

onde m_α é a massa do componente α , e m é massa total da mistura.

Assumindo uma mistura de gases ($A + B$) no interior de um reservatório, é possível medir a pressão, a temperatura, o volume e a massa da mistura. Também pode-se determinar experimentalmente a composição da mistura e fazer a determinação das frações mássica e molar. Deste modo, pode-se obter as propriedades das substâncias A e B em termos das propriedades molares parciais dos componentes desta mistura [Van Wylen et al., 1998; Robert et al., 1982; Zhorov, 1987].

Considerando uma propriedade extensiva Z , função da temperatura, da pressão, e do número de moles de cada componente da mistura, obtém-se

$$Z = f(T, p, n_A, n_B) \quad (\text{B.30})$$

onde, das relações matemáticas [Van Wylen et al., 1998], pode-se obter

$$dZ_{T,p} = \left(\frac{\partial Z}{\partial n_A} \right)_{T,p,n_B} dn_A + \left(\frac{\partial Z}{\partial n_B} \right)_{T,p,n_A} dn_B \quad (\text{B.31})$$

Como a temperatura e a pressão são constantes a propriedade extensiva Z se torna diretamente proporcional a massa. Sendo assim a Equação (B.31) pode ser integrada resultando em

$$Z_{T,p} = \bar{Z}_A n_A + \bar{Z}_B n_B \quad (\text{B.32})$$

onde por definição

$$\bar{Z}_A = \left(\frac{\partial Z}{\partial n_A} \right)_{T,p,n_B} \quad (\text{B.33})$$

e

$$\bar{Z}_B = \left(\frac{\partial Z}{\partial n_B} \right)_{T,p,n_A} \quad (\text{B.34})$$

Deste modo, para uma mistura de vários componentes, pode-se escrever

$$Z_{mist} = \sum_{\alpha} n_{\alpha} Z_{\alpha} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} Z_{\alpha} \quad (\text{B.35})$$

onde Z_{mist} é a propriedade extensiva total da mistura, Z_{α} a propriedade extensiva do componente α da mistura.

A propriedade extensiva genérica Z , acima descrita, pode ser qualquer uma das propriedades $\mathcal{V}$, H , S , G , etc.. Admitindo-se que ela seja o volume $\mathcal{V}$:

$$\mathcal{V}_{T,p} = \bar{\mathcal{V}}_A n_A + \bar{\mathcal{V}}_B n_B \quad (\text{B.36})$$

onde, segundo as Equações (B.33) e (B.34),

$$\bar{v}_A = \left(\frac{\partial V}{\partial n_A} \right)_{T,p,n_B} \quad (\text{B.37})$$

e

$$\bar{v}_B = \left(\frac{\partial V}{\partial n_B} \right)_{T,p,n_A} \quad (\text{B.38})$$

As considerações acima são válidas assumindo que os gases tenham comportamento de gases ideais. Entretanto, se dois gases reais fossem misturados, o volume da mistura não seria necessariamente igual a soma dos volumes constituintes [Van Wylen et al., 1998]. A variação de volume devido a mistura pode ser expressa como:

$$\Delta \mathcal{V}_{mist} = \mathcal{V}_{mist} - \mathcal{V}_{comp} \quad (\text{B.39})$$

Deste modo, para a mistura dos componentes A e B , a variação de volume devido a mistura é

$$\Delta \mathcal{V}_{mist} = (\bar{v}_A n_A + \bar{v}_B n_B) - (\bar{v}_A n_A + \bar{v}_B n_B) \quad (\text{B.40})$$

ou

$$\Delta \mathcal{V}_{mist} = (\bar{v}_A n_A + \bar{v}_B n_B) - (\bar{v}_A n_A + \bar{v}_B n_B) \quad (\text{B.41})$$

A menos de pequenas diferenças devido ao desvio de comportamento dos gases reais com relação aos gases ideais, a consideração de mistura, para gases com composição constante (Equação (B.35)) pode ser usada para estimar as propriedades de misturas gasosas a baixa pressão [Van Wylen et al., 1998].

Pode-se estender esta mesma metodologia para a determinação da constante dos gases, e para a massa molecular por exemplo. Assumindo primeiramente que Z seja a constante dos gases R , segundo a Equação (B.35),

$$R = \sum_{\alpha} f_{\alpha} R'_{\alpha} \quad (\text{B.42})$$

Da mesma forma para a massa molecular:

$$\overline{MM} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \overline{MM}_{\alpha} \quad (\text{B.43})$$

Uma outra forma de se determinar a constante R da mistura, ou de seus componentes, pode ser através da constante universal dos gases. Sendo assim

$$R = \frac{\overline{R}}{\overline{MM}} \quad (\text{B.44})$$

onde $\overline{R}$ é a constante universal dos gases.

B.2.1 Análise de Mistura Para o Gás Natural

Para o gás natural, que possui uma composição fixa para cada região de extração (ver Tabela B.3), observa-se que o metano existe como principal componente em todas as situações, seguido pelo etano, e pelo propano já em quantidades bem menores. Deste modo, de posse das propriedades de cada um destes componentes, pode-se aplicar a Equação (B.35) e estimar as propriedades da mistura que compõem o gás natural, por exemplo.

Na Tabela B.4 estão apresentados alguns valores da constante dos gases, e da massa molecular dos principais componentes do gás natural.

No caso da Equação (B.43), para o gás natural, pode-se usar a massa molecular como sendo a da mistura, ou também optar, devido a predominância do gás metano nesta mistura, analisar todas as propriedades físicas e termodinâmicas como se o metano fosse o único gás presente, sem comprometimento dos resultados [Vielmo et al., 2001].

Como uma demonstração para o gás natural, pode-se, a partir dos dados obtidos na Tabela B.4 referentes a composição do gás natural bruto, calcular a densidade deste gás fazendo o uso a Equação (B.35). Então, utilizando as densidades do metano, do etano, e do propano, que são os maiores constituintes, pode-se obter na Tabela B.3 (Rio de Janeiro) a composição básica da mistura com relação aos três componentes citados acima:

Metano = 89,44%

Etano = 6,79%

Propano = 2,26%

Segundo Vielmo et al. [2001] as densidades destes componentes são,

Tabela B.3 – Composição do gás natural bruto em alguns Países
[Vielmo et al., 2001].

Origem	Composição em (%) volume						$\rho_{r,G.N.}$	Poder Calorífico Superior (MJ/Nm^2)
Pais/Campo	CH_4	C_2H_6	C_3H_8	C_nH_n	CO_2	N_2		
USA/Panh.	81,80	05,60	03,40	02,20	00,10	06,90	— —	42,7
USA/Ashaw	75,00	24,00	— —	— —	— —	01,00	— —	46,7
Canadá	90,80	04,00	01,00	01,00	00,60	02,60	— —	40,4
Rússia	97,50	00,50	00,20	00,20	00,10	01,30	— —	39,6
Austrália	76,00	04,00	01,00	01,00	16,00	02,00	— —	35,9
França	69,20	03,00	01,00	01,00	09,60	00,60	— —	36,8
Alemanha	74,00	00,60	— —	— —	17,80	00,50	— —	29,9
Holanda	81,20	02,90	00,40	00,20	00,90	14,40	0,640	31,4
Pérsia	66,00	14,00	10,50	07,00	01,50	01,00	0,870	52,8
Argélia	76,00	08,00	03,30	04,40	01,90	06,40	— —	46,2
Venezuela	78,10	09,90	05,50	04,90	00,40	01,20	0,702	47,7
Bolívia	90,80	06,10	01,20	00,00	00,50	01,50	0,607	38,8
Argentina	95,00	04,00	— —	— —	— —	01,00	0,578	40,7
Chile	90,00	06,60	02,10	00,80	— —	— —	0,640	45,2
BR/Estado								
RJ	89,44	06,70	02,26	00,46	00,34	00,80	0,623	40,2
Bahia	88,53	09,17	00,42	— —	00,65	01,20	0,610	39,2
Alagoas	76,90	10,10	05,80	01,67	01,15	02,02	— —	47,7
RN	83,43	11,00	00,41	— —	01,95	03,15	0,644	36,5
ES	84,80	08,90	03,00	00,90	00,30	01,53	0,664	45,4
Ceará	76,05	08,00	07,00	04,30	01,08	01,53	— —	52,4

Tabela B.4 – Massa molecular, condutividade térmica, e constante universal dos gases para as principais substâncias que compõe o gás natural [Vielmo et al., 2001].

Gás	Fórmula Química	Massa Molecular	R [J/kgK]	κ [W/mK]
Metano	CH_4	16,04	518,47	0,0647
Etano	C_2H_6	30,07	276,54	-
Propano	C_3H_8	44,097	188,58	-
Butano	C_4H_{10}	58,124	143,07	-

$$\text{Metano} = 0,679 \text{ kg/m}^3$$

$$\text{Etano} = 1,286 \text{ kg/m}^3$$

$$\text{Propano} = 1,916 \text{ kg/m}^3$$

Aplicando a Equação (B.35) para a massa específica

$$\rho_{GN} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \rho_{\alpha} = 0,8944 \cdot 0,679 + 0,067 \cdot 1,286 + 0,0226 \cdot 1,916 \approx 0,730 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (\text{B.45})$$

Calculando a densidade do gás natural, relativa ao ar atmosférico, obtém-se

$$\rho_{r,GN} = \frac{\rho_{GN}}{\rho_{Ar}} = \frac{0,730}{1,293} \approx 0,57 \quad (\text{B.46})$$

Segundo a Tabela B.3, que apresenta a composição e algumas propriedades para o gás natural no Brasil (Ex. Rio de Janeiro), a densidade relativa ao ar, para o grupo baixo, fica aproximadamente em 0,62 demonstrando que o valor calculado está muito próximo da especificação.

Assumindo a sugestão apresentada acima, no intuito de utilizar apenas as propriedades do metano, a densidade relativa ao ar é:

$$\rho_{r,CH_4} = \frac{\rho_{CH_4}}{\rho_{Ar}} = \frac{0,679}{1,293} \approx 0,53 \quad (\text{B.47})$$

Comparando os valores calculados com os valores especificados na Tabela B.3 pode-se observar, no caso onde se tinha apenas metano, que o resultado ficou um pouco mais afastado da especificação. Porém verifica-se que os valores encontrados estão bastante próximos,

mostrando que a metodologia descrita fornece bons resultados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abbas, A. S. e Lockwood, F. C. [1986]. Prediction of power station combustors, *Twenty-first Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute pp. 285–292.

Arina, M. N. [2000]. Formação de co e co_2 em chamas de difusão de metano utilizando-se os métodos eddy breakup, eddy dissipation model e pdf com formas pré-assumidas, *Encit - Encontro Nacional de Ciências Térmicas*. Porto Alegre, RS.

ASHRAE (ed.) [2000]. *Systems and Equipments Handbook*, ASHRAE. Chapter 26 - Automatic Fuel-Burning Equipments.

Babcock, G. H. e Wilcox, S. [1972]. *Steam - Its Generation and Use*, The Babcock & Wilcox Company, USA.

Berg, S. [2003]. Combustion modeling. World Wide Web.

Boussinesq, J. [1877]. Essai sur la théorie des aux courantes, *Mem. Présentés Acad. Sci.* **23**: 46.

Campo, A. e Schuler, C. [1988]. Thermal radiation and laminar forced convection in a gas pipe flow, *Wärme-und Stoffübertragung* **22**: 251–257.

Carvalho, M. G., Azevedo, J. L. T., Coelho, P. J. e Nogueira, M. [1993]. Mathematical modelling of heat transfer in combustion chambers, *Proc. 12th Brazilian Congress of Mechanical Engineering I*: 15–23.

Carvalho, M. G., Farias, T. e Fontes, P. [1991]. Predicting radiative heat transfer in absorbing, emitting, and scattering media using the discrete transfer method, *ASME HTD* **160**: 17–26.

Clausen, C. W. e Smith, T. F. [1979]. Radiative and convective transfer for real gas flow through a tube with specified wall heat flux, *ASME Journal of Heat Transfer* **101**: 376–378.

Coles, D. E. e Hirst, E. A. [1968]. Computation of turbulent boundary-layer, *AFOSR-IFP Stanford Conference*.

Correa, S. M. e Shyy, W. [1987]. Computational models and methods for continuous gaseous turbulent combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.* **13**: 249–292.

Cotton, M. A. e Jackson, J. D. [1990]. Vertical tube air flows in the turbulent mixed convection regime calculated using a low-reynolds-number $k - \epsilon$ model, **33**: 275–286.

Davidson, L. [1990]. Calculation of the turbulence buoyancy-driven flow in a rectangular cavity using an efficient solver and two different low reynolds number $k - \epsilon$ turbulence models, *Numerical Heat Transfer, Part A* **18**: 129–147.

Denis, V. e Vervisch, L. [2001]. Turbulent combustion modeling, *Progress in Energy and Combustion Science* **28**: 193–266.

Eaton, A. M., Smoot, L. D., Hill, S. C. e Eatough, C. N. [1999]. Components, formulations, solutions, evaluations, and application of comprehensive combustion models, *Progress in Energy and Combustion Science* **25**: 387–436.

Evatt, R. H. e Chen, J. H. [2004]. Direct numerical simulation of hydrogen-enriched lean premixed methane-air flames, *Combustion and Flame* **138**: 242–258.

Fairweather, M. e Woolley, R. M. [2004]. First-order conditional moment closure modeling of turbulent, nonpremixed methane flames, *Combustion and Flame* **138**: 3–19.

Ferziger, H. e Perić, M. [1997]. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer.

Fluent (ed.) [1997]. *Fluent User's Guide*, Fluent Incorporated, New Hampshire.

Fox, W. R. e McDonald, A. T. [1998]. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*, 4º edn, LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, RJ.

França, F. H. R. [1995]. *Transferência de calor no escoamento de um gás participante no interior de um duto com isolamento*, Master's thesis, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, Campinas, São Paulo, Brasil.

França, F. H. R. e Goldstein, L. J. [1998]. Effects of temperature and geometry on the heat transfer from turbulent flow of a participating gas through a duct, *Heat Transfer Engineering* **19**: 25–33.

Freire, A. P. S., Menut, P. P. M. e Su, J. [2002]. *Turbulência*, Associação Brasileira de Ciências Mecânicas - ABCM, Rio de Janeiro - BR. Vol. 1.

Fryling, R. F. (ed.) [1967]. *Combustion Engineering*, Combustion Engineering, INC, New York.

Garréton, D. e Simonin, O. [1994]. Final results, *First Workshop of Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, Vol. 25, EDF-ERCOFTAC, pp. 29–35. October.

Garréton, D. e Simonin, O. [1995]. Report of activities, in ERCOFTAC (ed.), *Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, Vol. 25, Lausanne, France, pp. 29–35. June.

Glassman, I. [1977]. *Combustion*, Academic Press, Inc., New York.

Gomes, M. S. P., Nieckele, A. O., Naccache, M. F. e Kobayashi, W. T. [1997]. Numerical investigation of the oxygen enriched combustion process in a cylindrical furnace, *IV International Conference on Technologies and Combustion for a Clean Environment, Lisboa, Portugal*.

Gorner, K. e Zinzer, W. [1990]. Simulation of industrial combustion systems, *Int. Chem. Eng.* **30**(4): 607–619.

Gran, I. R. e Magnussen, B. F. [1996]. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. part 2. influence of combustion modeling and finite-rate chemistry, *Combust. Sci. and Tech.* **119**: 191–217.

Guo, Z. M., Zhang, H. Q., Chan, C. K. e Lin, W. Y. [2003]. Presumed joint probability density function model for turbulent combustion, *Fuel* **82**: 1091–1101.

Ha, J. e Zhu, Z. [1998]. Computational of turbulent reactive flows in industrial burners, *Applied Mathematical Modelling* **22**: 1059–1070.

- Hinze, J. O. [1975]. *Turbulence*, McGraw-Hill, Inc.
- Hottel, H. C. e Sarofim, A. F. [1967]. *Radiative Transfer*, McGraw-Hill Book Company, New York.
- Howell, J. R. [1988]. Thermal radiation in participating media: the past, the presente, and some possible futures, *ASME Journal of Heat Transfer* **110**: 1220–1229.
- Incropera, F. P. e DeWitt, D. P. [2002]. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*, 5th edn, John Willey & Sons, New York.
- Intellipro (ed.) [1996]. *IHT - Interactive Heat Transfer v. 2.0*, John Wiley & Sons.
- Intellipro (ed.) [1999]. *IT - Interactive Thermodynamics v. 5.0*, John Wiley & Sons.
- Isnard, A. A. e Gomes, M. S. P. [1998]. Numerical investigation on the no_x formation in natural gas combustion, *VII Encontro Nacional de Ciências Térmicas, ENCIT98, Rio de Janeiro*.
- Isnard, A. A. e Gomes, M. S. P. [1999]. Numerical simulation of the no_x and co formation in natural gas difuse flame, *XV Congrasso Brasileiro de Engenharia Mecânica, COBEM99, Águas de Lindóia*.
- Isnard, A. A. e Gomes, M. S. P. [2000]. Predicting the no formation in natural gas combustion, *Congresso Nacional em Engenharia Mecânica, CONEM/2000, Natal*.
- Kei-Tec (ed.) [1998]. *Combustion and Fluid Handling Systems*, Kei-Tec Equipamentos Industriais Ltda., São Bernardo do Campo, SP, Brasil.
- Klein, S. A. [1994a]. *Engineering Equation Solver*, University of Wisconsin, Madison.
- Klein, S. A. [1994b]. *A Transient System Simulation Program v.15*, Solar Energy Laboratory, University of Wisconsin, Madison.
- Kolmogorov, A. N. [1942]. Equations of turbulent motion of an incompressible fluid, *Akad. Nauk. USSR, Ser. Phis.* **6**: 56–58.
- Kuo, K. K. [1986]. *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, New York.

Lauder, B. E. e Sharma, B. I. [1974]. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc, *Letters in Heat and Mass Transfer* **19**: 519–524.

Lauder, B. E. e Spalding, D. B. [1972]. *Mathematical Model of Turbulence*, Academic Press Inc. LTD.

Lauder, B. E. e Spalding, D. B. [1974]. The numerical computation of turbulent flows, *Computer Methods in App. Mech. and Enginnering* **3**: 269–289.

Librovich, B. V., Makhviladze, G. M., Roberts, J. P. e Yakush, S. E. [1999]. Numerical analysis of laminar combustion of fuel gas clouds, *Combustion and Flames* **118**: 669–683.

Lockwood, F. C. e Shah, N. G. [1981]. A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures, *Eighteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute* pp. 1405–1414.

Magel, H. C., Schneider, R., Schnell, U. e Hein, K. R. G. [1995]. Numerical simulation of utility boilers with advanced combustion tecnologies, *Eighth International Symposium on Transport Phenomena in Combustion*. San Francisco.

Magel, H. C., Schnell, U. e Hein, K. R. G. [1996a]. Modeling of hydrocarbon and nitrogen chemistry in turbulent combustor flows using detailed reaction mechanisms, *3rd Workshop on Modeling of Chemical Reaction Systems*. Heidelberg.

Magel, H. C., Schnell, U. e Hein, K. R. G. [1996b]. Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow, *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute* pp. 67–74.

Magnussen, B. F. [1989]. The eddy dissipation concept, *XI Task Leaders Meeting - Energy Conservation in Combustion, IEA*.

Magnussen, B. F. e Hjertager, B. H. [1977]. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, *XVI Symposium (Int'l) on Combustion - The Combustion Institute* pp. 719–729. Cambridge, MA, Aug. 15-20.

Maliska, C. R. [2003]. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, 2nd edn, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, Brasil.

Mariotti, G., Pasini, S. e Tosi, A. [1995]. A semi-implicit algorithm for treatment of complex reaction schemes in cfd codes, *in* D. Garréton e O. Simonin (eds), *Aerodynamics of Steady State Combustion Chambers and Furnaces*, Vol. 26, Lausanne, France, pp. 39–41. September.

MathWorks (ed.) [1999]. *Matlab - The Language of Technical Computing v. 5.3.1.29215 (R11.1)*, The MathWorks, inc.

Miroslav, S., Stevanovic, Z. e Belosevic, S. [2001]. Modeling of non-confined turbulent flow of two coaxial streams under combustion conditions, *Nonlinear Sciences at the Threshold of the Third Millenium* **8**: 981–988.

Modest, M. F. [1993]. *Radiative Heat Transfer*, McGraw Hill Book Company, -.

Nakra, N. K. e Smith, T. F. [1977]. Combined radiation-convection for a real gas, *ASME Journal of Heat Transfer* -: 60–65.

Narciso, C. A. [1998]. *Aspectos Técnicos na Transformação de Caldeiras de Óleo para Gás*, Tec-Tecnologia em Calor. Palestra Apresentada no X Seminário Técnico ABNT.

Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P., Carneiro, J. E. e Serfaty, R. [2001]. Evaluation of models for combustion processes in a cylindrical furnace, *ASME-IMECE, International Conference of Mechanical Engineering, New York*.

Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P., Carneiro, J. E. e Serfaty, R. [2002]. Predição da combustão de gás natural em uma fornalha utilizando reação em uma e duas etapas, *CONEM - Congresso Nacional de Engenharia Mecânica - João Pessoa - PB*.

Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P. e Kobayashi, W. T. [1999a]. The influence of the oxygen injection configuration in the performance of an aluminum melting furnace, *ASME, International Mechanical Engineering Congress, Nashville*.

Nieckele, A. O., Naccache, M. F., Gomes, M. S. P. e Kobayashi, W. T. [1999b]. Investigação numérica dos processos de combustão estagiada e não-estagiada em um forno de

refusão de alumínio, *Congresso Anual da Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, ABM, São Paulo*.

Nikuradse, J. [1933]. *Strömungsgesetze in Rauhen Rohren*, Forsch. Arb. Ing. -Ees.

Özişik, M. N. [1985]. *Heat Transfer*, 1st edn, McGraw-Hill Book Company, New York.

Patankar, S. V. [1980]. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, New York.

Pember, R. B., Colella, P., Howel, L. H., Almgren, A. S., Bell, J. B., Crutchfield, W. Y. e Beckner, V. E. [1996]. The modeling of a laboratory natural gas-fired furnace with a higher-order projection method for unsteady combustion, *Technical Report UCRL-JC-123244, LLNL*.

Peters, N. [1984]. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* **10**: 319–.

Reynolds, O. [1895]. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion, *Phil. Trans. Roy. Soc. London Ser.* **186**: 349–368.

Robert, C. R., John, M. P. e Thomas, K. S. [1982]. *The Properties of Gases and Liquids*, 3th edn, McGraw-Hill Book Company.

Robinson, G. F. [1985]. A three-dimensional analytical model of a large tangentially-fired furnace, *J. Inst. Energy* pp. 116–150.

Rodi, W. [1984]. Turbulence modes and their application in hydraulics, *International Association for Hydraulic Research*.

Schlichting, H. [1979]. *Boundary-layer Theory*, McGraw-Hill.

Schuler, C. e Campo, A. [1988]. Numerical prediction of turbulent heat transfer in gas pipe flows subject to combined convection and radiation, *Int. J. Heat and Fluid Flow* **9**(3): 308–315.

Sebben, S. [1997]. Steady, spatially-periodic fully-developed turbulent flow in interrupted-plate channels, *RBCM - J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences* **XIX**: 445–457.

Seo, T., Kaminski e Jensen, M. K. [1994]. Combined convection and radiation in simultaneously developing flow and heat transfer with nongray gas mixtures, *Numerical Heat Transfer, Part A* **26**: 49–66.

Siegel, R. e Howell, J. R. [2002]. *Thermal Radiation Heat Transfer*, 4th edn, Taylor & Francis, New York - London.

Sika, P. [1991]. Evaluation of direct-exchange areas for a cylindrical enclosure, *Transactions of the ASME - Journal of Heat Transfer* **113**: 1040–1044.

SimTech (ed.) [2000]. *Interactive Process Simulation Enviroment*, SimTech Simulation Technology, Austria. User Documentation - Manual v.3.1.001.

Smith, T. F., Shen, Z. F. e Alturki, A. M. [1985]. Radiative and convective transfer in a cylindrical enclosure for a real gas, *Transactions of the ASME - Journal of Heat Transfer* **107**: 482–485.

Smith, T. F., Shen, Z. F. e Friedman, J. N. [1982]. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model, *Transactions of the ASME - Journal of Heat Transfer* **104**: 602–608.

Spalding, D. B. [1971]. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames, *Thirteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute pp. 649–657.

Spalding, D. B. [1977]. Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion, *Symposiun (International) on Combustion*, The Combustion Institute pp. 1657–1663.

Spalding, D. B. [1979]. *Combustion and Mass Transfer*, Pergamon Press, Inc., New York.

Stoecker, W. F. [1989]. *Design of Thermal Systems*, McGraw-Hill.

Tennekes, H. e Lumley, J. L. [1972]. *A First Course in Turbulence*, MIT Press.

Turns, S. T. [2000]. *An Introduction to Combustion - Concepts and Applications*, 2nd edn, McGraw-Hill, New York.

Van Wylen, G. J., Sonntag, E. R. e Bornake, C. [1998]. *Fundamentos da Termodinâmica*, 5nd edn, Editora Edgard Blücher Ltda.

Versteeg, H. e Malalasekera [1995]. *Introduction to Computacional Fluid Dynamics*, Longman Scientific & Technical.

Veynante, D. e Vervich, L. [2002]. Turbulent combustion modeling, *Progress in Energy and Combustion Science* **28**: 193–266.

Vielmo, H. A., Schneider, P. S. e Silva, C. V. [2001]. *Ferramenta de Cálculo para Simulação de Processos que Utilizam Gás Natural*, Porto Alegre, RS, Brasil. UFRGS - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Viskanta, R. e Meguç, M. P. [1987]. Radiation heat-transfer in combustion systems, *Progress in Energy and Combustion* **13**: 97–160.

Visser, J. A. e Cilliers, J. P. [1995]. A revised numerical model to predict heat transfer in turbulent flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **20**: 459–468.

Wang, L. [2004]. *Detailed Chemistry, Soot, and Radiation Calculations in Turbulent Reacting Flows*, PhD thesis, The Pennsylvania State University, Pennsylvania.

Xia, J. L., Yadigaroglu, G., Liu, Y. S., Schmidli, J. e Smith, B. L. [1998]. Numerical and experimental study of swirling flow in a model combustor, *Internatinal Journal of Heat Mass Transfer* **41**: 1485–1497.

Xu, W., Chen, Q. e Nieuwstadt, F. T. M. [1998]. A new turbulence model for near-wall natural convection, *Internatinal Journal of Heat Mass Transfer* **41**: 3161–3176.

Xue, H., Ho, J. C. e Cheng, Y. M. [2001]. Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation, *Fire Safety Journal* **36**: 37–54.

Yang, W. e Blasiak, W. [2004]. Numerical study of fuel temperature influence on single gas jet combustion in highly preheated and oxygen deficient air, *Journal of Energy* **30**: 385–398.

Zeldovich, Y. B., Sadvnikov, P. Y. e Frank-Kamentskii, D. A. [1947]. Oxidation of nitrogen in combustion, *Moscow: Academy of Sciences of USSR*.

Zhorov, Y. M. [1987]. *Thermodynamics of Chemical Processes*, 1 edn, Mir Publishers, Moscow.

Zhou, L. X., Qiao, L., Chen, X. L. e Zhang, J. [2002]. A usm turbulence-chemistry model for simulating *nox* formation in turbulent combustion, *Fuel* **81**: 1703–1709.

Zhou, L. X., Wang, F. e Zhang, J. [2003]. Simulation of swirling combustion and *no* formation using a usm turbulence-chemistry model, *Fuel* **82**: 1579–1586.

Zhou, X., Brenner, G., Weber, T. e Durst, F. [1999]. Finite-rate chemistry in modelling of two-dimensional jet premixed ch_4 /air flame, *Internationa Journal Of Heat and Mass Transfer* **42**: 1757–1773.

Zhou, X., Sum, Z., Brenner, G. e Durst, F. [2000]. Combustion modeling of turbulent jet diffusion hydrogen/air flame with detailed chemistry, *Internationa Journal Of Heat and Mass Transfer* **43**: 2075–2088.

Zimont, V., Polifke, W. e Bettelini, M. [1998]. An efficient computational model for premixed turbulent combustion at high reynolds number basead on a turbulent flame speed closure, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* **120**(3): 526–532.