

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

GERAÇÃO DE NOVAS CORRELAÇÕES DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-
CINZA PARA H₂O E CO₂ EM ALTA PRESSÃO

por

Felipe Ramos Coelho

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Abril de 2017

GERAÇÃO DE NOVAS CORRELAÇÕES DA SOMA-PONDERADA-DE-GASES-
CINZA PARA H₂O E CO₂ EM ALTA PRESSÃO

por

Felipe Ramos Coelho
Engenheiro Mecânico

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Aprovada por:

Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos, FURG

Prof. Dr. Felipe Roman Centeno, DEMEC/UFRGS

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha, PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Jakson M. Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 27, Abril de 2017

AGRADECIMENTOS

A minha família e aos meus amigos pelo apoio em diversas situações.

Aos colegas do LRT pelo auxílio na elaboração do trabalho, desde o treinamento até a preparação da defesa da dissertação.

Ao meu orientador, Prof. Francis França, pelas contribuições para a pesquisa, pela confiança e pelos incentivos para solucionar os problemas encontrados.

Aos membros da banca avaliadora pelas diversas contribuições ao trabalho.

Por fim, a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de estudos concedida.

RESUMO

A radiação térmica é frequentemente considerada um mecanismo de transferência de calor muito importante em processos de combustão em alta pressão, devido à presença de meios participantes e às altas temperaturas envolvidas. Resolver a radiação térmica em meios participantes é um problema complexo devido à natureza integro-diferencial da equação governante e à dependência espectral altamente irregular das propriedades de radiação. Atualmente, o método mais preciso para resolver a integração espectral é o método linha-por-linha (LBL), que possui um custo computacional muito elevado. Para contornar essa dificuldade, o problema espectral é geralmente resolvido usando modelos espectrais e, conseqüentemente, a equação da transferência radiativa (RTE) é simplificada. Um destes modelos é o da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG), que substitui o comportamento espectral altamente irregular do coeficiente de absorção, por bandas de coeficientes de absorção uniforme e tem mostrado um bom desempenho em diversas aplicações, mesmo sendo um modelo bastante simplificado. Entretanto, recentemente alguns autores não obtiveram bons resultados ao tentar aplicar o WSGG a problemas de combustão em alta pressão. Este artigo desenvolve um modelo WSGG para CO_2 e H_2O em condições de alta pressão. Para validar o modelo, a emitância total é calculada usando os coeficientes WSGG e comparada à solução do LBL obtida usando o banco de dados espectrais HITEMP 2010. Os resultados mostraram grande convergência entre os valores de emitância de ambos os métodos, mesmo para valores de alta pressão, tanto para o CO_2 quanto para H_2O , provando que o método WSGG é aplicável a condições de alta pressão. O modelo também foi validado pelo cálculo do fluxo de calor e termo fonte radiativo, e comparando-os com os obtidos através do método LBL. O H_2O teve melhores resultados para baixas pressões, enquanto o CO_2 apresentou melhores resultados para pressões mais altas. O efeito da pressão total sobre a solução de LBL foi maior para o H_2O , o que pode ser um dos motivos pelo qual os desvios foram maiores para os casos de alta pressão.

Palavras-chave: Radiação térmica; Soma-ponderada-de-gases-cinza; Linha-por-linha; Altas pressões; HITEMP 2010.

ABSTRACT

Thermal radiation is often a very important heat transfer mechanism in high pressure combustion processes due to the presence of participating media and the high temperatures involved. Solving thermal radiation in participating media is a tough problem due to the integro-differential governing equation and the complex spectral dependence of radiation properties. Currently, the most accurate method to solve the spectral integration is the line-by-line (LBL) method, which has a very high computational cost. In order to avoid this drawback the spectral problem is usually solved using spectral models, and as a consequence the radiative transfer equation (RTE) is simplified. One of the models is the weighted-sum-of-gray-gases (WSGG) which replaces the highly irregular spectral behavior of the absorption coefficient by bands of uniform absorption coefficients, and has shown great performance a lot of applications even though it is a very simple model. However, recently some authors didn't have good results when trying to apply the WSGG to high pressure combustion problems. This thesis develops a WSGG model for both CO₂ and H₂O on high pressure conditions. In order to validate the model the total emittance is calculated using the WSGG coefficients and compared to the LBL solution which was obtained using the HITEMP 2010 spectral emissivity database. The results showed that the emittance values from both methods were very close even for high pressure values for both CO₂ and H₂O proving that the WSGG method is applicable to high pressure conditions. The model was also validated by calculating the radiative heat flux and source, and comparing them with the LBL method. H₂O had better results for low pressures while CO₂ had better results for higher pressures. The effect of total pressure on the LBL solution was higher for H₂O, which might be the reason why deviations were higher at high pressure values.

Keywords: Thermal radiation; Weighted-sum-of-gray-gases; Line-by-line; High pressures; HITEMP 2010.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão bibliográfica	2
1.2	Objetivos.....	3
1.3	Organização do texto	4
2	FUNDAMENTOS DE RADIAÇÃO TÉRMICA	8
2.1	Corpo negro	8
2.2	Intensidade de radiação térmica.....	10
2.3	Equação da transferência radiativa (RTE).....	12
2.4	Emitância total	12
2.5	O coeficiente de absorção e as linhas espectrais	13
2.5.1	Alargamento natural	14
2.5.2	Alargamento Doppler	14
2.5.3	Alargamento por colisão.....	15
2.6	Banco de dados espectrais HITEMP	16
3	MÉTODOS PARA INTEGRAÇÃO ESPECTRAL DA RTE	18
3.1	Integração-linha-por-linha(LBL).....	18
3.2	Modelo de gás cinza (GG).....	19
3.3	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza(WSGG)	20
4	METODOLOGIA.....	23
4.1	Obtenção dos espectros absorção	23
4.2	Obtenção das emitâncias totais.....	24
4.3	Determinação dos coeficientes do WSGG	26
4.4	Cálculo do fluxo de calor e do termo fonte radiativo	27
5	RESULTADOS DE EMITÂNCIA TOTAL.....	30
5.1	Obtenção dos espectros absorção	30
5.2	Determinação dos coeficientes WSGG	33
5.3	Ajuste dos coeficientes WSGG em função da pressão total.....	39
6	RESULTADOS DE FLUXO DE CALOR E TERMO FONTE RADIATIVO.....	51
6.1	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL	51
6.2	Resultados do WSGG e do ajuste do WSGG para o CO ₂	54
6.3	Resultados do WSGG e do ajuste do WSGG para o H ₂ O	60
7	CONCLUSÕES.....	66
7.1	Proposta de continuidade	67
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	69

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Espectro da radiação eletromagnética [Incropera e DeWitt, 2008].	8
Figura 2.2	Corpo negro a uma temperatura T envolvido por um detector de radiação hemisférico [Brittes, 2011].	9
Figura 2.3	Representação geométrica da emissão de radiação de uma área diferencial dA [Dorigon, 2012].	10
Figura 2.4	Intensidade de radiação variando ao longo do meio participante de espessura dS [adaptado de Howell et al., 2011].	11
Figura 2.5	Formatos de linhas de absorção para mecanismos de alargamento de Lorentz, Doppler e Voigt [Modest, 2003].	16
Figura 3.1	Representação de um sistema unidimensional contendo um meio participante [Silva, 2015].	19
Figura 3.2	Representação do coeficiente de absorção de um meio participante com n_g gases cinzas [adaptado de Dorigon et al., 2013].	20
Figura 4.1	Seção transversal de absorção em função do número de onda para H_2O para temperatura de 1500 K, pressão total de 1 atm e fração molar de 0,2.	23
Figura 4.2	Emitância total do CO_2 em função da temperatura com $pS = 1$ atm m para o Caso 1, com pressão total de 1 atm e $Y = 1$, e para o Caso 2, com pressão total de 10 atm e $Y = 0,1$, ambos com $S = 1$ m.	25
Figura 4.3	Emitância total do H_2O em função da temperatura com $pS = 1$ atm m para o Caso 3, com pressão total de 1 atm e $Y = 1$, e para o Caso 4, com pressão total de 5 atm e $Y = 0,2$, ambos com $S = 1$ m.	26
Figura 4.4	Perfis de temperatura 1, 2 e 3 considerados para os cálculos de fluxo de calor e termo fonte radiativo.	28
Figura 5.1	Valores da seção transversal de absorção de CO_2 em função do número de onda para pressão total de 1 atm, fração molar de 0,1 e temperatura de 1500 K.	30
Figura 5.2	Valores da seção transversal de absorção de CO_2 em função do número de onda para pressão total de 10 atm, fração molar de 0,1 e temperatura de 1500 K.	31
Figura 5.3	Valores da seção transversal de absorção de CO_2 em função do número de onda para pressão total de 40, fração molar de 0,1 e temperatura de 1500 K.	31

Figura 5.4	Valores da seção transversal de absorção de H ₂ O em função do número de onda para pressão total de 1 atm, fração molar de 0,2 e temperatura de 1500 K.....	32
Figura 5.5	Valores da seção transversal de absorção de H ₂ O em função do número de onda para pressão total de 10 atm, fração molar de 0,2 e temperatura de 1500 K.....	32
Figura 5.6	Valores da seção transversal de absorção de H ₂ O em função do número de onda para pressão total de 40 atm, fração molar de 0,2 e temperatura de 1500 K.....	33
Figura 5.7	Emitância total do CO ₂ em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.....	35
Figura 5.8	Emitância total do CO ₂ em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.....	36
Figura 5.9	Emitância total do CO ₂ em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 20 atm; (b) 40 atm.....	36
Figura 5.10	Emitância total do H ₂ O em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.....	38
Figura 5.11	Emitância total do H ₂ O em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.....	38
Figura 5.12	Emitância total do H ₂ O em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 20 atm; (b) 40 atm.....	39
Figura 5.13	Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $\kappa_{p,1}$ do WSGG para CO ₂ em função da pressão total.....	40
Figura 5.14	Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $\kappa_{p,2}$ do WSGG para H ₂ O em função da pressão total	40
Figura 5.15	Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $b_{4,2}$ do WSGG para CO ₂ em função da pressão total.....	42
Figura 5.16	Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $b_{2,1}$ do WSGG para H ₂ O em função da pressão total.	42
Figura 5.17	Comparação entre as emitâncias totais do CO ₂ obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.....	47
Figura 5.18	Comparação entre as emitâncias totais do CO ₂ obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.....	47
Figura 5.19	Comparação entre as emitâncias totais do CO ₂ obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 20 atm; (b) 40 atm.....	47

Figura 5.20	Comparação entre as emitâncias totais do H ₂ O obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.....	49
Figura 5.21	Comparação entre as emitâncias totais do H ₂ O obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.....	50
Figura 5.22	Comparação entre as emitâncias totais do H ₂ O obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 20atm; (b) 40 atm.....	50
Figura 6.1	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 1 para CO ₂ : (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.....	51
Figura 6.2	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 2 para CO ₂ : (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.....	51
Figura 6.3	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 3 para CO ₂ : (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.....	52
Figura 6.4	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 1 para H ₂ O: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.....	52
Figura 6.5	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 2 para H ₂ O: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.....	53
Figura 6.6	Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 3 para H ₂ O: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.....	53
Figura 6.7	Comparação entre os resultados do Perfil 1, para CO ₂ a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	54
Figura 6.8	Comparação entre os resultados do Perfil 1, para CO ₂ a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG, e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	55
Figura 6.9	Comparação entre os resultados do Perfil 1, para CO ₂ a 40atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	55
Figura 6.10	Comparação entre os resultados do Perfil 2, para CO ₂ a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	56
Figura 6.11	Comparação entre os resultados do Perfil 2, para CO ₂ a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	57
Figura 6.12	Comparação entre os resultados do Perfil 2, para CO ₂ a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	57
Figura 6.13	Comparação entre os resultados do Perfil 3, para CO ₂ a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.	58

- Figura 6.14 Comparação entre os resultados do Perfil 3, para CO₂ a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .59
- Figura 6.15 Comparação entre os resultados do Perfil 3, para CO₂ a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .59
- Figura 6.16 Comparação entre os resultados do Perfil 1, para H₂O a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .60
- Figura 6.17 Comparação entre os resultados do Perfil 1, para H₂O a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .60
- Figura 6.18 Comparação entre os resultados do Perfil 1, para H₂O a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .61
- Figura 6.19 Comparação entre os resultados do Perfil 2, para H₂O a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .62
- Figura 6.20 Comparação entre os resultados do Perfil 2, para H₂O a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .62
- Figura 6.21 Comparação entre os resultados do Perfil 2, para H₂O a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .62
- Figura 6.22 Comparação entre os resultados do Perfil 3, para H₂O a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .63
- Figura 6.23 Comparação entre os resultados do Perfil 3, para H₂O a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .64
- Figura 6.24 Comparação entre os resultados do Perfil 3, para H₂O a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo. .64

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Números de isótopos e de linhas espectrais para as cinco espécies presentes no HITEMP 2010.	17
Tabela 5.1	Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ e pressão total de 1 atm.	34
Tabela 5.2	Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ e pressão total de 2 atm.	34
Tabela 5.3	Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ e pressão total de 5 atm.	34
Tabela 5.4	Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ e pressão total de 10 atm.	34
Tabela 5.5	Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ e pressão total de 20 atm.	34
Tabela 5.6	Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ e pressão total de 40 atm.	35
Tabela 5.7	Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O e pressão total de 1 atm.	36
Tabela 5.8	Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O e pressão total de 2 atm.	37
Tabela 5.9	Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O e pressão total de 5 atm.	37
Tabela 5.10	Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O e pressão total de 10 atm.	37
Tabela 5.11	Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O e pressão total de 20 atm.	37
Tabela 5.12	Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O e pressão total de 40 atm.	37
Tabela 5.13	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ para o CO ₂	41
Tabela 5.14	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ para o H ₂ O.	41
Tabela 5.15	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,1}$ para o CO ₂	43
Tabela 5.16	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,2}$ para o CO ₂	43
Tabela 5.17	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,3}$ para o CO ₂	43
Tabela 5.18	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,4}$ para o CO ₂	43
Tabela 5.19	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,5}$ para o CO ₂	43
Tabela 5.20	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,1}$ para o H ₂ O.	44
Tabela 5.21	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,2}$ para o H ₂ O.	44
Tabela 5.22	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,3}$ para o H ₂ O.	44
Tabela 5.23	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,4}$ para o H ₂ O.	44
Tabela 5.24	Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,5}$ para o H ₂ O.	44
Tabela 5.25	Coeficientes do ajuste do WSGG para CO ₂ e pressão total de 1 atm.	45
Tabela 5.26	Coeficientes do ajuste do WSGG para CO ₂ e pressão total de 2 atm.	45
Tabela 5.27	Coeficientes do ajuste do WSGG para CO ₂ e pressão total de 5 atm.	45
Tabela 5.28	Coeficientes do ajuste do WSGG para CO ₂ e pressão total de 10 atm.	46

Tabela 5.29	Coeficientes do ajuste do WSGG para CO ₂ e pressão total de 20 atm.	46
Tabela 5.30	Coeficientes do ajuste do WSGG para CO ₂ e pressão total de 40 atm.	46
Tabela 5.31	Coeficientes do ajuste do WSGG para H ₂ O e pressão total de 1 atm.	48
Tabela 5.32	Coeficientes do ajuste do WSGG para H ₂ O e pressão total de 2 atm.	48
Tabela 5.33	Coeficientes do ajuste do WSGG para H ₂ O e pressão total de 5 atm.	48
Tabela 5.34	Coeficientes do ajuste do WSGG para H ₂ O e pressão total de 10 atm.	48
Tabela 5.35	Coeficientes do ajuste do WSGG para H ₂ O e pressão total de 20 atm.	49
Tabela 5.36	Coeficientes do ajuste do WSGG para H ₂ O e pressão total de 40 atm.	49
Tabela 6.1	Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para CO ₂ com o Perfil 1 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.	56
Tabela 6.2	Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para CO ₂ com o Perfil 2 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.	58
Tabela 6.3	Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para CO ₂ com o Perfil 3 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.	59
Tabela 6.4	Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para H ₂ O com o Perfil 1 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.	61
Tabela 6.5	Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para H ₂ O com o Perfil 2 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.	63
Tabela 6.6	Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para H ₂ O com o Perfil 3 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.	65

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ALBF	Função distribuição das linhas de absorção do corpo negro
GG	Modelo gás cinza
HITEMP	Banco de dados espectrais calculado à temperatura de 1000 K
HITRAN	Banco de dados espectrais calculado à temperatura ambiente
LBL	Linha-por-Linha
RTE	Equação da transferência radiante
SLW	Modelo WSGG baseado em linhas espectrais
WSGG	Modelo da soma-ponderada-dos-gases-cinza

LISTA DE SÍMBOLOS

a_j	Fator de ponderação correspondente ao j -ésimo gás cinza
a_0	Fator de ponderação correspondente à janela transparente
A	Área, m^2
$b_{j,k}$	Coefficientes polinomiais do fator de ponderação no modelo WSGG
c_0	Velocidade da luz no vácuo, $2,998 \times 10^8$ m/s
C_1	Primeira constante de Planck, $0,59552137 \times 10^8$ W· $\mu m^4/(m^2 \cdot sr)$
C_2	Segunda constante de Planck, $14387,752$ $\mu m \cdot K$
C_η	Seção transversal de absorção, $cm^2/molécula$
$C_{\eta,ij}$	Seção transversal de absorção, $cm^2/molécula$
D	Diâmetro dos átomos ou moléculas, m
e_b	Poder emissivo total de corpo negro, W/m^2
$e_{\eta,b}$	Poder emissivo espectral de corpo negro, $W/(m^2 \cdot sr)$
I	Intensidade de radiação, W/m^2
I_b	Intensidade de radiação total de corpo negro, W/m^2
I_j	Intensidade de radiação do gás cinza j , $(W/m^2 \cdot \mu m \cdot sr)$
I_η	Intensidade de radiação espectral, W/m^2
$I_{\eta b}$	Intensidade radiativa espectral de corpo negro, W/m^2
$I_{\eta,m}^+$	Intensidade de radiação na direção positiva de m , W/m^2
$I_{\eta,m}^-$	Intensidade de radiação na direção negativa de m , W/m^2
k_B	Constante de Boltzmann, $1,3806 \times 10^{-23}$ J/K
L	Distância entre as placas do domínio, m
M	Massa das partículas, kg
$\max q''_{R,LBL} $	Valor máximo absoluto do fluxo de calor radiativo obtido com a integração LBL, W/m^2
$\max q''_{R,WSGG} $	Valor máximo absoluto do fluxo de calor radiativo obtido com o modelo WSGG, W/m^2
$\max S_{R,LBL} $	Valor máximo absoluto do termo fonte radiativo obtido com a integração LBL, W/m^3
$\max S_{R,WSGG} $	Valor máximo absoluto do termo fonte radiativo obtido com o modelo WSGG, W/m^3

n_d	Número de direções discretas
n_g	Número de gases cinzas
N	Densidade molar ou número de Loschmidt, moléculas/m ³
p	Pressão total, atm
p_g	Pressão do gás, atm
p_i	Pressão parcial da espécie química i , atm
pS	Produto da pressão pelo caminho, atm m
q_R''	Fluxo de calor radiativo, W/m ²
Q	Soma das funções de partição
S	Caminho, posição espacial, m
S_i	Intensidade integrada na linha i , cm ⁻¹ /(molécula.cm ⁻²)
S_R	Termo fonte radiativo ou taxa volumétrica de geração de calor, W/m ³
T	Temperatura, K
T_b	Temperatura de corpo negro, K
T_g	Temperatura do gás, K
T_{ref}	Temperatura de referência, K
x	Posição espacial, m
Y	Fração molar

SÍMBOLOS GREGOS

α_η	Absortância espectral
γ_i	Meia largura de linha espectral i , m
γ_{ar}	Meia largura devido ao alargamento ao ar, m
γ_{auto}	Meia largura devido ao alargamento da própria molécula, m
γ_C	Meia largura para alargamento por colisão, m
γ_D	Meia largura para alargamento Doppler, m
γ_n	Meia largura para alargamento natural, m
δ	Desvio percentual para o cálculo do fluxo de calor radiativo
ε	Emissividade ou emitância
ε_η	Emitância espectral
η	Número de onda, cm ⁻¹

κ_j	Coefficiente de absorção do gás cinza j , m^{-1}
κ_η	Coefficiente de absorção espectral, m^{-1}
$\kappa_{p,j}$	Coefficiente de absorção baseado na pressão para o gás cinza j , $atm\ m^{-1}$
$\kappa_{p,\eta}$	Coefficiente de absorção espectral baseado na pressão, $atm\ m^{-1}$
λ	Comprimento de onda, μm
μ_m	Cosseno diretor para o ângulo θ_m
σ	Constante de Stefan-Boltzmann, $5,6704 \times 10^{-8}\ W/(m^2K^4)$
ζ	Desvio percentual no cálculo do termo fonte radiativo
ρ	Massa específica, kg/m^3
ω_m	Ângulo sólido, sr

SUBÍNDICES

<i>ar</i>	Referente ao ar
<i>auto</i>	Referente à própria molécula
H ₂ O	Referente à molécula de vapor de água
CO ₂	Referente à molécula de dióxido de carbono
<i>m</i>	Direção
<i>max</i>	Valor máximo
<i>med</i>	Valor médio
<i>ref</i>	Condição de referência

1 INTRODUÇÃO

A radiação térmica é um mecanismo de troca de calor muito importante em aplicações que envolvem temperaturas elevadas, tais como processos de combustão. Com crescente busca por reduzir emissões e aumentar a eficiência destes processos, devido principalmente aos impactos ambientais, aplicações de combustão em alta pressão têm recebido bastante atenção recentemente. Uma das aplicações promissoras de combustão em alta pressão é a utilização de oxí-combustão para captura e armazenamento de carbono, visando reduzir as emissões de CO_2 na atmosfera [Wall et al., 2011]. Além disso, uma parcela dos produtos de combustão é composta de gases participantes, como CO_2 e H_2O , que podem emitir, absorver ou espalhar radiação térmica. Sendo assim, o entendimento da radiação térmica em meios participantes é essencial para otimizar processos de combustão, principalmente os em alta pressão, por serem processos mais caros que os sob pressão atmosférica.

A transferência de calor radiativo em um meio participante é governada pela equação da transferência radiativa (RTE), obtida através do balanço de energia radiativa no domínio. A solução deste problema requer a integração espectral, espacial e direcional da RTE, que é uma equação íntegro-diferencial, e algumas de suas variáveis (principalmente o coeficiente de absorção) possui uma dependência espectral altamente irregular [Dorigon et al., 2013].

Para simplificar a dependência espectral irregular e, conseqüentemente, a integração espectral, diversos modelos espectrais foram desenvolvidos. O modelo de soma-ponderada-de gases-cinza (WSGG), proposto por Hottel e Sarofim, 1967, é um exemplo de modelo que simplifica essa integração espectral. O método substitui o comportamento altamente irregular do coeficiente de absorção de um gás participante por alguns gases cinza equivalentes com coeficiente de absorção uniforme e a janela transparente. Cada gás cinza possui um coeficiente de absorção de ponderação, que é determinado por um ajuste nos valores de emitância total, calculados através das propriedades radiativas presentes em bancos de dados como o HITEMP (High Temperature Molecular Spectroscopic Database). Apesar de ser um modelo antigo e bastante simplificado, o WSGG sofreu grande evolução nos últimos anos, apresentando resultados tão bons quanto os modelos mais avançados para inúmeras aplicações, e conseqüentemente, tem sido bastante estudado por outros autores.

1.1 Revisão bibliográfica

Uma das grandes evoluções na metodologia de obtenção dos coeficientes do WSGG foi proposta por Smith et al., 1982, através de um ajuste polinomial dos fatores de ponderação do modelo em função da temperatura. Além disso, foram gerados coeficientes do WSGG considerando três gases cinzas para diversas condições. Utilizando uma metodologia semelhante, Kangwanpongpan et al., 2012, ajustaram coeficientes do WSGG baseados no banco de dados HITEMP 2010 para condições de oxi-combustão, porém para pressão atmosférica. Becher et al., 2012, também trabalharam com oxi-combustão desenvolvendo um novo modelo que fosse capaz de melhor representar as condições de temperatura variando de 800 a 1800°C e comparou com diversos modelos espectrais, entre eles o WSGG. Dorigon et al., 2013, obtiveram coeficientes do WSGG considerando quatro gases cinzas para uma mistura composta por CO₂ e H₂O, à pressão atmosférica e para uma ampla faixa de aplicações. Concluiu-se que, apesar da simplicidade do modelo, os resultados foram bons quando comparados com as soluções de referência. Cassol et al., 2014, obtiveram coeficientes do WSGG para espécies individuais e, utilizando uma metodologia de superposição, foram capazes de reproduzir resultados de mistura das espécies para condições não isotérmicas, não homogêneas e sem razão molar fixa entre as espécies. Ziemniczak, 2014, também obteve coeficientes do WSGG para misturas e espécies individuais, incluindo monóxido de carbono e metano, e avaliou a dependência dos resultados em função do número de gases cinzas, variando-os de 3 a 5 gases.

Alguns trabalhos recentes aplicam o método WSGG para condições de combustão em altas pressões. Bordbar et al., 2014, desenvolveram um banco de dados de emitâncias totais e novos coeficientes do WSGG para condições de oxi-combustão, aplicados em uma ampla faixa de temperatura, de pressões e frações molares baseadas no HITEMP 2010. Esses coeficientes WSGG desenvolvidos por Bordbar et al., 2014, foram usados por Chu et al., 2016, para resolver um problema de oxi-combustão para pressões totais que variam de 1 a 30 atm. Os resultados mostram que o WSGG apresentou a menor precisão dentre todos os modelos testados, especialmente entre 1 e 10 atm. Kez et al., 2016, também resolveram um problema de oxi-combustão para a pressão total de 20 atm usando o modelo WSGG de Bordbar et al., 2014 e apresentaram desvios significativos, concluindo que o modelo não é recomendado para aplicações envolvendo oxi-combustão. Chu et al., 2017, calcularam a transferência de calor por radiação em uma chama difusiva axissimétrica em pressões entre 1

e 30 atm, utilizando diversos métodos, e entre eles, o WSGG. Os coeficientes usados nesse trabalho são os obtidos por Centeno et al., 2015, e foram validados para um problema bidimensional axissimétrico [Centeno et al., 2012; Centeno et al., 2013].

Outros métodos de modelagem espectral também foram utilizados para o estudo da radiação térmica em altas pressões. Chen, et al., 2007, estudaram os efeitos da absorção de radiação espectral na velocidade de chama em pressões de até 5 atm, utilizando o modelo espectral k -correlacionado de bandas estreitas, e concluiu que o modelo utilizado superestimou os valores de absorção espectral, sendo necessário um modelo espectral mais preciso. Tran et al., 2011, estudaram CO₂ puro em alta pressão, simulando a atmosfera de Venus, e concluíram que o perfil de Lorentz apresenta desvios em algumas regiões do espectro quando o meio é muito denso. Além disso, propôs uma função de correção para o perfil de Lorentz, que minimizou significativamente estes desvios. Stefani et al., 2013, obtiveram distribuições de coeficientes de absorção do CO₂ para temperaturas variando de 294 a 650 K e pressões de 1 a 50 bar, também buscando simular a atmosfera de Venus. Pearson et al., 2014, estudaram o efeito da pressão total sobre os espectros de absorção das espécies CO₂, H₂O e CO para pressões totais variando de 0,1 a 50 atm, utilizando o HITEMP 2010. Além disso, resultados de emitância total e da função de distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (ALBDF) são apresentados para as mesmas condições. Alberti et al., 2015, recriaram as cartas de emissividade de Hottel (*Hottel emissivity charts*) usando o método linha-por-linha (LBL) para CO₂ e pressões totais variando entre 0,1 a 40 bar. Kassi et al., 2015, desenvolveram um espectrômetro de alta precisão para detectar o comportamento do coeficiente de absorção do CO₂ em altas pressões e observaram comportamentos de atenuação da variação do coeficiente ao longo do espectro conforme a pressão total aumenta.

1.2 Objetivos

Com base nos estudos apresentados na revisão da literatura, nota-se que não há uma grande variedade de modelos espectrais aplicados a condições de alta pressão. O único modelo WSGG desenvolvido para estas condições é o de Bordbar et al., 2014, sendo que este apresentou resultados insatisfatórios quando utilizado por outros autores [Chu et al., 2016; Kez et al., 2016].

Sendo assim, este trabalho busca desenvolver novos coeficientes do modelo WSGG para as espécies individuais CO_2 e H_2O que sejam capazes de reproduzir resultados satisfatórios de emitância total, fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo em condições de alta pressão total. Tendo os coeficientes do WSGG, deseja-se ajustá-los em função da pressão total, visando generalizar a solução para qualquer valor de pressão no intervalo estudado.

Além disso, deseja-se estudar o efeito da pressão total nos resultados citados, no espectro de absorção para cada espécie analisada e na solução LBL para todas as condições analisadas.

1.3 Organização do texto

O presente trabalho está dividido em sete capítulos. Neste Capítulo 1, faz-se uma introdução sobre a radiação em meios participantes, demonstrando a motivação do trabalho e a importância do estudo da radiação térmica em aplicações de alta pressão, e apresentam-se os principais estudos já realizados sobre o assunto.

No Capítulo 2, são apresentados alguns conceitos fundamentais sobre a radiação térmica e, principalmente, como esse mecanismo de transferência de calor ocorre em meios participantes.

No Capítulo 3, fundamentam-se os métodos de integração espectral da RTE utilizados neste trabalho, LBL e WSGG.

No Capítulo 4, demonstra-se a metodologia utilizada para a obtenção dos espectros de absorção, geração dos coeficientes do WSGG e obtenção dos resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo.

O Capítulo 5 apresenta os resultados para os espectros de absorção, a obtenção dos coeficientes do WSGG, o ajuste destes coeficientes em função da pressão total e os resultados de emitância total. Os resultados são então comparados com os obtidos por outros autores e pelo método LBL, sendo considerada a solução benchmark.

O Capítulo 6 apresenta os resultados para o fluxo de calor radiativo, o termo fonte radiativo e o efeito da pressão sobre ambos os métodos WSGG e LBL. Novamente os resultados são comparados com os obtidos por outros autores.

O Capítulo 7 apresenta as conclusões do presente trabalho e as propostas de continuidade do mesmo.

2 FUNDAMENTOS DE RADIAÇÃO TÉRMICA

A radiação pode ser determinada como a propagação de ondas eletromagnéticas e, por isso, não requer um meio para que ocorra. A região do espectro eletromagnético, ilustrado na Figura 2.1, que interessa para a transferência de calor está entre 0,1 a 100 μm , sendo esta a região onde ocorre a radiação térmica.

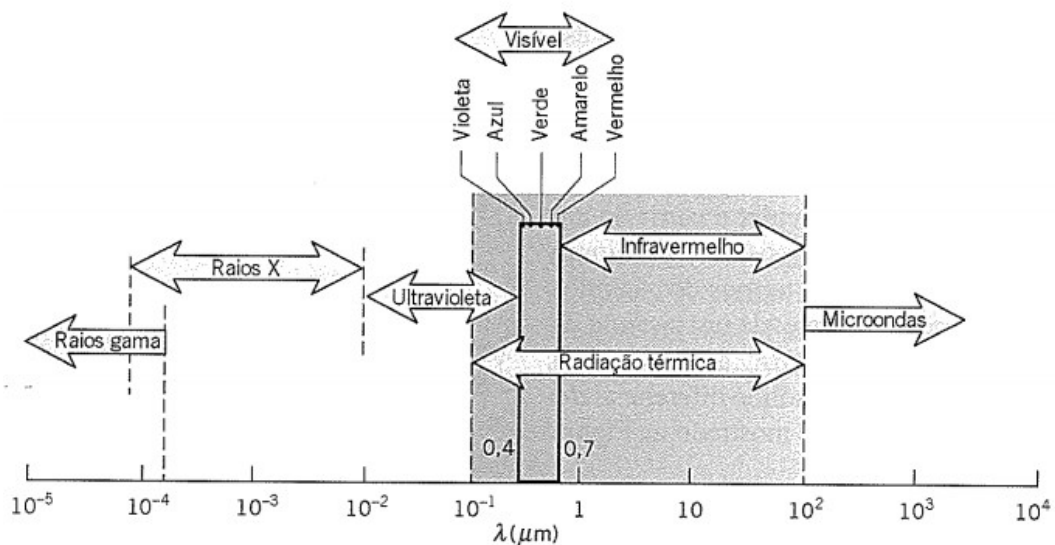


Figura 2.1 – Espectro da radiação eletromagnética [Incropera e DeWitt, 2008].

2.1 Corpo negro

O corpo negro é uma idealização no estudo da radiação térmica, que propõe um corpo capaz de absorver toda a energia radiante incidente, independente da direção e do comprimento de onda. Como consequência disso, a energia radiante emitida pelo corpo negro é máxima para todos os comprimentos de onda e direções [Siegel e Howell, 2002].

A Figura 2.2 mostra um corpo negro, a uma temperatura T , envolvido por um detector hemisférico que capta radiação térmica com comprimento de onda η dentro de uma faixa $d\eta$.

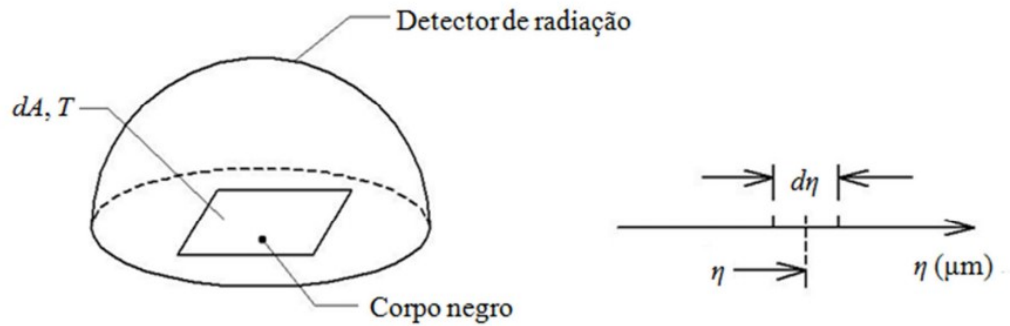


Figura 2.2 – Corpo negro a uma temperatura T envolvido por um detector de radiação hemisférico [Brittes, 2011].

O poder emissivo espectral hemisférico de corpo negro $e_{\eta,b}(\eta, T)$, em $\text{W}/\text{m}^2\mu\text{m}$, é a energia emitida por uma superfície negra por unidade de tempo, por unidade de área e por unidade de intervalo de comprimento de onda $d\eta$, em torno de η . Essa energia é função do comprimento de onda através da distribuição espectral de Planck, dada por

$$e_{\eta,b}(\eta, T) = \frac{2C_1\pi\eta^3}{\exp\left(\frac{C_2\eta}{T}\right) - 1} \quad (2.1)$$

onde T é a temperatura, em K, η é o comprimento de onda, em μm , e C_1 e C_2 são constantes que valem, respectivamente: $0,59552137 \times 10^8 \text{ W}\mu\text{m}^4/(\text{m}^2\text{sr})$ e $1,4387752 \times 10^4 \mu\text{mK}$.

Integrando a Equação (2.1) ao longo de todo o espectro tem-se a Lei de Stefan-Boltzmann dada por

$$e_b = \sigma T^4 \quad (2.2)$$

onde e_b é o poder emissivo total do corpo negro, em W/m^2 , e $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$ é a constante de Stefan-Boltzmann.

2.2 Intensidade de radiação térmica

A intensidade de radiação espectral é definida como a energia que deixa uma superfície por unidade de tempo, unidade de área normal à direção de propagação da radiação e unidade de ângulo sólido centrado na direção em que a radiação se propaga [Siegel e Howell, 2002]. Para um elemento de área dA , contido em um meio participante, como pode ser visto na Figura 2.3, a intensidade de radiação espectral I_η é dada por

$$I_\eta = \frac{d^3 Q_R}{dA \cos \beta d\omega d\eta} \quad (2.3)$$

onde I_η é dada em $W/(m^2 \cdot \mu m \text{ sr})$ e $d\omega$ é o ângulo sólido em sr.

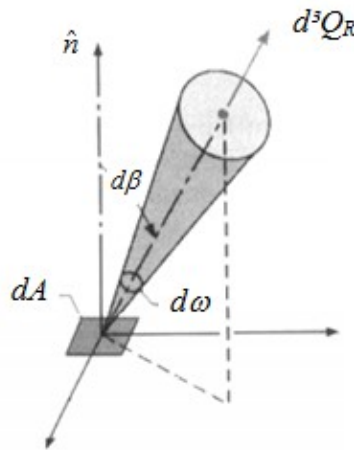


Figura 2.3 – Representação geométrica da emissão de radiação de uma área diferencial dA [Dorigon, 2012].

Como a radiação emitida por um corpo negro é função apenas do comprimento de onda e da temperatura, sendo independente da direção, este é considerado um emissor difuso [Incropera et al., 2008]. Por esse motivo, a intensidade de radiação do corpo negro é dada por

$$I_{\eta b}(\eta, T) = \frac{e_{\eta b}}{\pi} = \frac{2C_1 \eta^3}{\exp\left(\frac{C_2 \eta}{T}\right) - 1} \quad (2.4)$$

onde $I_{\eta b}$ é a intensidade de radiação térmica emitida pelo um corpo negro, em $W/(m^2 \cdot \mu m \text{ sr})$.

Para um meio participante, a intensidade de radiação varia conforme o trajeto devido a efeitos de absorção, espalhamento ou emissão do meio [Dorigon, 2012]. Sendo assim, a intensidade de radiação que passa através de um meio participante pode ser aumentada, através de efeitos de espalhamento e emissão, ou atenuada, através de efeitos de absorção ou espalhamento.

A variação da intensidade de radiação ao longo de um meio participante está ilustrada na Figura 2.4, e assumindo que não haja espalhamento, a atenuação na intensidade de radiação que atravessa um meio participante de espessura dS , é proporcional ao produto de I_η por dS , sendo que a constante de proporcionalidade é dada pelo coeficiente de extinção κ_η conforme

$$dI_\eta = -\kappa_\eta I_\eta dS \quad (2.5)$$

e o coeficiente de extinção κ_η é função da temperatura, pressão, concentração do meio e do número de onda da radiação incidente.

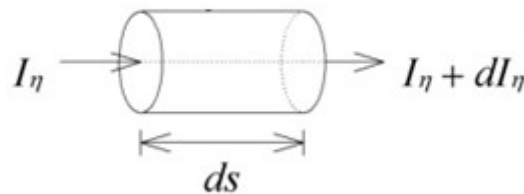


Figura 2.4 – Intensidade de radiação variando ao longo do meio participante de espessura dS [adaptado de Howell et al., 2011].

Como a atenuação da radiação é a soma dos efeitos de absorção e espalhamento, quando se negligencia o espalhamento o coeficiente de extinção é igual ao coeficiente de absorção. Os gases participantes estudados neste trabalho, CO_2 e H_2O , não espalham radiação de forma significativa, e por isso, o efeito do espalhamento é desprezado.

Como o espalhamento é negligenciado, o aumento da intensidade de radiação ao longo de um meio participante é devido apenas à emissão, e se esta for considerada uniforme em todas as direções, o aumento da intensidade é dado por

$$dI_{\eta} = \kappa_{\eta} I_{\eta b} ds \quad (2.6)$$

2.3 Equação da transferência radiativa (RTE)

A equação da transferência radiativa (RTE) resulta de um balanço de energia em um elemento dS de um meio participante, como o mostrado na Figura 2.4, que considera os efeitos do aumento e da atenuação da intensidade de radiação no meio. Desprezando os efeitos de espalhamento, esse balanço é dado pela soma das Equações (2.5) e (2.6), resultando na RTE dada por

$$\frac{dI_{\eta}}{ds} = -\kappa_{\eta} I_{\eta} + \kappa_{\eta} I_{\eta b} \quad (2.7)$$

que é a equação governante do problema de gases participantes. A solução desta equação requer três tipos diferentes de integração: espectral, direcional e espacial.

2.4 Emitância total

A emitância total ε é a medida da quantidade de energia que um meio participante é capaz de emitir comparada com a energia emitida por um corpo negro, de forma que

$$\varepsilon(T) = \pi \frac{\int_0^{\infty} i_{\eta,b} \varepsilon_{\eta}(T) d\eta}{\int_0^{\infty} i_{\eta,b} d\eta} \quad (2.8)$$

A forma mais geral da Lei de Kirchhoff diz que a emitância espectral é igual à absorptância espectral $\varepsilon_{\eta} = \alpha_{\eta}$. A absorptância espectral é dada por

$$\alpha_{\eta} = (1 - \exp(-\kappa_{\eta} pS)) \quad (2.9)$$

e substituindo a Equação (2.9) na Equação (2.8), tem-se

$$\varepsilon(T) = \pi^0 \frac{\int_0^{\infty} i_{\eta,b} [1 - \exp(-\kappa_{\eta} pS)] d\eta}{\sigma T^4} \quad (2.10)$$

onde pS é o produto da pressão parcial pelo caminho, em atm m, e κ_{η} é o coeficiente de absorção do meio participante, em m^{-1} .

2.5 O coeficiente de absorção e as linhas espectrais

A solução da RTE requer o conhecimento do coeficiente de absorção, conforme mostra a Equação (2.7), que é função do número de onda, da temperatura, da fração molar e da pressão total, sendo calculado através de

$$\kappa_{\eta}(\eta, T, p, Y) = N(T, p) Y C_{\eta}(\eta, T, p, Y) \quad (2.11)$$

onde C_{η} é a seção transversal de absorção, em $cm^2/molécula$, N é a densidade molar, em $molécula/(cm^2 m)$ e Y é a fração molar. Para uma dada temperatura, pressão total e fração molar, o coeficiente de absorção e a seção transversal de absorção são função apenas do número de onda, e seus comportamentos ao longo do espectro são representados pelas linhas espectrais.

Para que ocorra absorção ou emissão de radiação, um fóton deve ser liberado ou capturado com uma frequência específica para que ocorra a transição entre as bandas de energia. Conforme essa teoria, e interpretando-se o coeficiente de absorção como a probabilidade de um fóton ser absorvido ou emitido, a distribuição do coeficiente de absorção no espectro seria dada por um conjunto de linhas verticais posicionados nos comprimentos de onda de transição. Essas linhas são chamadas de linhas espectrais e, caso as bandas tivessem sempre o mesmo nível de energia, esse seria o comportamento do coeficiente de absorção no espectro. No entanto, diversos fenômenos físicos podem afetar as bandas de transição, resultando no alargamento das linhas espectrais.

2.5.1 Alargamento natural

O alargamento natural está relacionado com a incerteza dos níveis de energia, de acordo com o princípio de Heisenberg, e é dado pelo perfil de Lorentz conforme

$$\frac{C_{\eta,mn}(\eta)}{S_{mn}} = \frac{\gamma_N / \pi}{\gamma_N^2 + (\eta - \eta_{mn})^2} \quad (2.12)$$

onde γ_N é a meia largura do alargamento natural e S_{mn} é a intensidade de linha, dada por

$$S_{mn} = \int_0^{\infty} C_{\eta,mn}(\eta) d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} C_{\eta,mn}(\eta) d(\eta - \eta_{mn}) \quad (2.13)$$

A magnitude do alargamento natural é muito inferior as dos outros mecanismos de alargamento, e por isso, é negligenciado na maioria dos problemas de engenharia [Howell et al., 2011], como é o caso deste trabalho.

2.5.2 Alargamento Doppler

É causado pelo deslocamento dos números de onda dos fótons devido aos movimentos dos átomos e moléculas.

$$\frac{C_{\eta,mn}(\eta)}{S_{mn}} = \frac{1}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left[-(\eta - \eta_{mn})^2 \frac{\ln 2}{\gamma_D^2}\right] \quad (2.14)$$

onde γ_D é a meia largura para o alargamento Doppler, dada por

$$\gamma_D = \frac{\eta_{mn}}{c_0} \left(\frac{2k_B T}{M} \ln 2 \right)^{1/2} \quad (2.15)$$

onde c_0 é a velocidade da luz no vácuo, $c_0 = 2,998 \times 10^8$ m/s, k_B é a constante de Boltzmann, $k_B = 1,3806 \times 10^{-23}$ J/K, T é a temperatura, em K, e M indica a massa das partículas, em kg.

Esse tipo de alargamento é significativo apenas para temperaturas muito elevadas, acima de 2500 K, e as linhas espectrais resultantes podem ser obtidas pelo perfil de Voigt, que considera os alargamentos Doppler e por colisão.

2.5.3 Alargamento por colisão

As linhas espectrais no alargamento por colisão são obtidas através do perfil de Lorentz, assim como o alargamento natural, de acordo com

$$\frac{C_{\eta, mn}(\eta)}{S_{mn}} = \frac{\gamma_C / \pi}{\gamma_C^2 + (\eta - \eta_{mn})^2} \quad (2.16)$$

onde γ_C é a meia largura do alargamento por colisão e pode ser aproximada pela teoria cinética por

$$\gamma_C = \frac{1}{2\pi c_0} \frac{4\sqrt{\pi} D^2 p_g}{(M k_B T)^{1/2}} \quad (2.17)$$

onde D é o diâmetro dos átomos (ou moléculas) e p_g é a pressão parcial do gás, em atm.

Como pode ser visto na Equação (2.17), a meia largura por colisão é proporcional à pressão e inversamente proporcional à temperatura, demonstrando que o alargamento por colisão é dominante em situações com altas pressões e baixas temperaturas. De acordo com Wang e Modest, 2004, o perfil de Lorentz apresenta bons resultados para casos em que a pressão total é maior ou igual a 1 atm e a temperatura é inferior a 2500 K, que é a faixa de aplicação deste trabalho e, por isso, é o perfil utilizado. Caso as temperaturas ultrapassem 2500 K, como ocorre em algumas aplicações de oxi-combustão em alta pressão, o perfil de Voigt é o mais adequado. A Figura 2.5 mostra uma comparação entre o alargamento Lorentz, o alargamento Doppler e como o perfil de Voigt contabiliza os dois alargamentos, para diferentes razões entre eles.

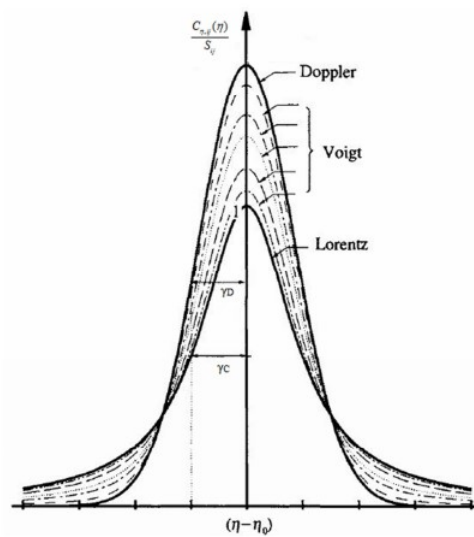


Figura 2.5 – Formatos de linhas de absorção para mecanismos de alargamento de Lorentz, Doppler e Voigt [Modest, 2003].

2.6 Banco de dados espectrais HITEMP

O HITEMP é um banco de dados baseado no HITRAN, que contém informações espectrais relativas às moléculas em função do número de onda e para uma temperatura de referência de 296 K. A primeira versão do banco de dados HITRAN foi distribuída em 1973, pelo Laboratório de pesquisas da Força Aérea de Cambridge, contendo dados espectrais para os elementos constituintes da atmosfera terrestre, e tem sido atualizada periodicamente através dos anos [Rothman et al., 1998, Rothman et al., 2005, Rothman et al., 2010]. A última versão do HITRAN ocorreu em 2012 e contém parâmetros para 47 diferentes moléculas [Rothman et al., 2013].

Diferente do HITRAN, o HITEMP possui dados espectrais obtidos a 1000 K, e por isso, é mais adequado para aplicações envolvendo altas temperaturas, como os processos de combustão. A edição mais recente, o HITEMP 2010 [Rothman et al., 2010], possui dados espectrais para cinco moléculas, H₂O, CO, CO₂, OH e NO. Os números de isótopos e de linhas espectrais para cada espécie podem ser vistos na Tabela 2.1.

Tabela 2.1– Números de isótopos e de linhas espectrais para as cinco espécies presentes no HITEMP 2010.

Molécula	Intervalo espectral (cm ⁻¹)	Número de isótopos	Número de linhas espectrais
H ₂ O	0 < η < 30.000	6	114.241.164
CO ₂	5 < η < 12.785	7	11.193.608
CO	0 < η < 8.465	6	113.631
NO	0 < η < 9.274	3	115.610
OH	0 < η < 19.268	3	41.557

Os valores de seção transversal de absorção podem ser calculados utilizando a Equação (2.16), e as intensidades de linha, utilizando o HITEMP, são calculadas através de

$$S_i(T) = S_i(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref}) \exp(-C_2 E_i / T) [1 - \exp(-C_2 \nu_i / T)]}{Q(T) \exp(-C_2 E_i / T_{ref}) [1 - \exp(-C_2 \nu_i / T_{ref})]} \quad (2.18)$$

onde T_{ref} é a temperatura de referência do banco de dados, 296 K, Q é a soma total de partições internas, E_i é a energia do estado inferior, em cm⁻¹, ν_i é a diferença de energia entre os estados inicial e final, em cm⁻¹.

Os parâmetros $S_i(T_{ref})$, E_i e ν_i são obtidos pelo banco de dados HITEMP. A meia largura γ_i para o HITEMP é dada por

$$\gamma_i(p, T) = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n \left[\gamma_{ar}(p_{ref}, T_{ref})(p - p_i) + \gamma_{auto,i}(p_{ref}, T_{ref}) p_i \right] \quad (2.19)$$

em que n representa o coeficiente de dependência da temperatura, γ_{ar} é a meia largura devido à colisão entre as moléculas do gás e do ar, p e p_i são as pressões total e parcial, respectivamente, e γ_{auto} indica a meia largura levando-se em conta a colisão entre as moléculas do gás. Os parâmetros n , γ_{ar} e γ_{auto} também são dados do HITEMP.

3 MÉTODOS PARA INTEGRAÇÃO ESPECTRAL DA RTE

3.1 Integração-linha-por-linha(LBL)

O método linha-por-linha (LBL) resolve a integração da equação de transporte radiativo considerando todas as variações do coeficiente de absorção ao longo do espectro. A solução utilizando o método LBL é frequentemente considerada como a solução *benchmark* para o problema da integração espectral, por ser o melhor método dentre os conhecidos. Se os modelos utilizados pelos bancos de dados espectrais (como o HITEMP) para o cálculo das propriedades radiativas fossem exatos e caso não houvessem desvios devido às discretizações espectral, espacial e direcional, a solução LBL poderia ser considerada uma solução exata.

Considerando um sistema unidimensional, constituído de duas placas planas paralelas infinitas separadas por uma distância L , havendo um meio participante entre elas, conforme ilustrado na Figura 3.1, a RTE é dada pela Equação (2.23) e as intensidades de radiação espectral nas direções positivas e negativas são dadas por

$$\mu_m \frac{\partial I_{\eta,m}^+(x)}{\partial x} = -\kappa_\eta I_{\eta,m}^+(x) + \kappa_\eta I_{\eta b}(x) \quad (3.1)$$

$$-\mu_m \frac{\partial I_{\eta,m}^-(x)}{\partial x} = -\kappa_\eta I_{\eta,m}^-(x) + \kappa_\eta I_{\eta b}(x) \quad (3.2)$$

onde μ_m é o cosseno do ângulo θ_m e $I_{\eta,m}^+$ e $I_{\eta,m}^-$ são as intensidades de radiação para $\mu_m > 0$ e $\mu_m < 0$, respectivamente. Considerando paredes negras, as condições de contorno em $x = 0$ e em $x = L$ são $I_{\eta,m}^+(0) = I_{\eta b}(0)$ e $I_{\eta,m}^-(L) = I_{\eta b}(L)$.

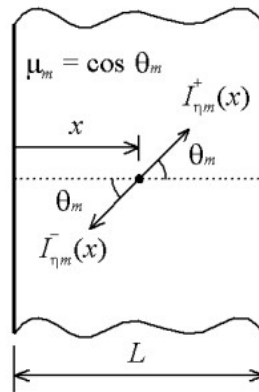


Figura 3.1- Representação de um sistema unidimensional contendo um meio participante [Silva, 2015].

Com as soluções das Equações (3.1) e (3.2), é possível determinar o fluxo de calor radiativo, q_R'' , em W/m^2 , e o termo fonte radiativo, S_R , em W/m^3 , através de

$$q_R''(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \int 2\pi\mu_m \omega_m [I_{\eta,m}^+(x) - I_{\eta,m}^-(x)] d\eta \quad (3.3)$$

$$S_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \int_{\eta} \{2\pi\kappa_{\eta} \omega_m [I_{\eta,m}^+(x) + I_{\eta,m}^-(x)] - 4\pi\kappa_{\eta} I_{\eta,b}\} d\eta \quad (3.4)$$

onde os nós μ_m e os fatores de ω_m do esquema de quadratura são definidos no intervalo $[0,1]$ para n_d direções.

3.2 Modelo de gás cinza (GG)

O modelo de gás cinza (GG) é o modelo espectral mais simples para gases participantes, negligenciando as variações do coeficiente de absorção e assumindo-o constante ao longo de todo o espectro, $\kappa_{\eta} = \kappa$ [Siegel e Howell, 2002]. Como o coeficiente de absorção varia muito em função do número de onda, o modelo está muito longe de representar o comportamento de gases participantes reais. No entanto, muitos estudos sobre radiação em meios participantes empregam o modelo GG, por causa do seu baixo custo computacional e de sua simplicidade [Modest, 2003].

O coeficiente de absorção no modelo GG é dado por meio de uma média de Planck sobre todo o espectro, onde κ_η é uma função da temperatura e da concentração dos gases, de acordo com

$$\kappa = \frac{\int \kappa_\eta I_{\eta b} d\eta}{\int_{\eta} I_{\eta b} d\eta} \quad (3.5)$$

3.3 Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza(WSGG)

Proposto por Hottel e Sarofim, 1967, o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) é um modelo que substitui a integração espectral por um pequeno conjunto de gases cinzas, com coeficientes de absorção constantes ao longo do espectro, mais as janelas transparentes [Modest, 1991].

A Figura 3.2 mostra uma representação esquemática do coeficiente de absorção κ_η para um gás modelado através do WSGG para n_g gases cinzas e as janelas transparentes. Esse método vem recebendo bastante atenção por apresentar bons resultados, apesar de sua simplicidade.

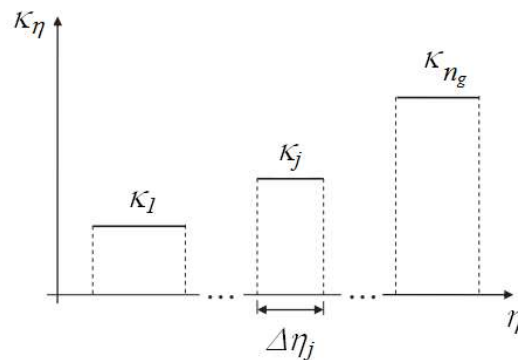


Figura 3.2- Representação do coeficiente de absorção de um meio participante com n_g gases cinzas [adaptado de Dorigon et al., 2013].

Aplicando-se o modelo WSGG à Equação (2.10), tem-se

$$\varepsilon(s) = \sum_{j=0}^{n_g} a_j(T) \left[1 - \exp(-\kappa_{p,j} pS) \right] \quad (3.6)$$

onde a_j é o fator de ponderação do gás j , adimensional, κ_p é o coeficiente de absorção baseado na pressão do gás j , em m^{-1} , e n_g é o número total de gases cinzas utilizado no modelo. As janelas transparentes correspondem a $j = 0$ na Equação (3.6), onde o coeficiente de absorção é zero, e possuem uma função importante na conservação de energia do modelo.

Para cada gás cinza, os coeficientes de absorção baseados na pressão são constantes e os fatores de ponderação são funções da temperatura. Smith et al., 1982, desenvolveram uma metodologia de representar os coeficientes $a_j(T)$ como uma função polinomial da temperatura dada por

$$a_j(T) = \sum_{k=1}^{n_g+1} b_{j,k} T^{k-1} \quad (3.7)$$

onde $b_{j,k}$ são os coeficientes polinomiais e sua unidade varia em função do k , sendo que para 4 gases cinza, é adimensional para $k = 1$, K^{-1} para $k = 2$, K^{-2} , para $k = 3$, K^{-3} para $k = 4$ e K^{-4} para $k = 5$.

Para garantir a conservação de energia, o fator de ponderação da janela transparente deve ser diferente de zero, e é dado por

$$a_0 = 1 - \sum_{j=1}^{n_g} a_j \quad (3.8)$$

Aplicando o modelo WSGG à RTE, resulta em

$$\frac{dI_j}{ds} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j I_{\eta b} \quad (3.9)$$

onde κ_j e I_j são o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação de cada gás cinza j .

As Equações (3.1) e (3.2) aplicadas para o WSGG resultam em

$$\mu_m \frac{\partial I_{j,m}^+(x)}{\partial x} = -\kappa_j I_{j,m}^+(x) + \kappa_j a_j I_{\eta b}(x) \quad (3.10)$$

$$-\mu_m \frac{\partial I_{j,m}^-(x)}{\partial x} = -\kappa_j I_{j,m}^-(x) + \kappa_j a_j I_{\eta b}(x) \quad (3.11)$$

onde os termos $I_{j,m}^+$ e $I_{j,m}^-$ indicam as intensidades de radiação do gás cinza j para $\mu_m > 0$ e para $\mu_m < 0$, respectivamente. As condições de contorno para $x = 0$ e $x = L$ se tornam, respectivamente, $I_{j,m}^+(0) = a_j(0)I_{\eta b}(0)$ e $I_{j,m}^-(L) = a_j(L)I_{\eta b}(L)$.

Finalmente, as Equações (3.3) e (3.4), que representam o fluxo de calor e o termo fonte radiativo, respectivamente, para o WSGG são dadas por

$$q_R''(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_g} 2\pi\mu_m \omega_m [I_{j,m}^+(x) - I_{j,m}^-(x)] \quad (3.12)$$

$$S_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_g} \{2\pi\omega_m \kappa_j [I_{j,m}^+(x) + I_{j,m}^-(x)] - 4\pi\kappa_j a_j I_{\eta b}\} \quad (3.13)$$

4 METODOLOGIA

4.1 Obtenção dos espectros de absorção

O primeiro passo para o desenvolvimento de novos coeficientes do modelo WSGG é a obtenção das linhas espectrais, representadas pela distribuição da seção transversal de absorção em função do número de onda, para as espécies desejadas e para uma dada temperatura, pressão total e concentração molar. A Figura 4.1 ilustra um exemplo de distribuição da seção transversal de absorção para H₂O a 1500 K, sob pressão atmosférica e com fração molar de 0,2.

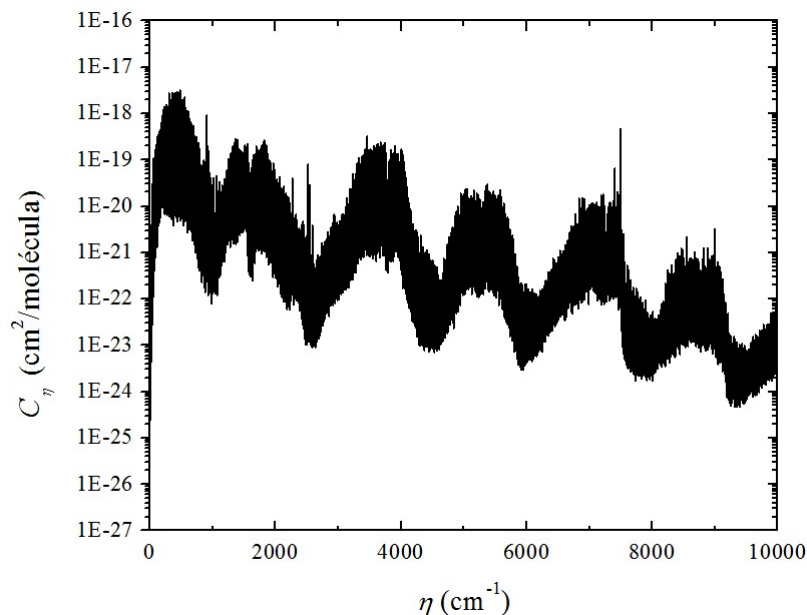


Figura 4.1- Seção transversal de absorção em função do número de onda para H₂O para temperatura de 1500 K, pressão total de 1 atm e fração molar de 0,2.

Neste trabalho, as seções transversais de absorção são calculadas utilizando o perfil de Lorentz através da Equação (2.16), usando a meia largura dada pela Equação (2.19) e a integração da intensidade de linha dada pela Equação (2.18). Os cálculos de seção transversal são feitos para temperaturas de 400 a 2500 K, pressões totais de 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm e fração molar de 0,1 para o CO₂ e 0,2 para o H₂O. Foram utilizadas 150000 divisões no espectro, conforme recomendado pelo estudo de Ziemniczak, 2014.

Algumas aplicações de combustão em alta pressão podem ultrapassar o intervalo de temperaturas proposto, porém optou-se por manter esse limite devido ao perfil de Lorentz não ser recomendável para temperaturas acima de 2500 K. De acordo com Wang e Modest, 2004, o perfil de Lorentz apresenta bons resultados para casos com pressão total maior ou igual a 1 atm e temperatura inferior a 2500 K. Além disso, esse intervalo de temperaturas é comumente utilizado por outros autores, facilitando a comparação entre os resultados.

Os valores de pressão total foram escolhidos visando atender o intervalo de pressões que engloba a maioria das aplicações existentes de combustão em alta pressão, que raramente excedem 40 atm. Pearson et al., 2014 e Alberti et al., 2015, utilizaram intervalos de pressão semelhantes para estudos de radiação em pressões elevadas. A utilização de seis valores distintos no intervalo de 1 a 40 atm tem como objetivo visualizar o comportamento das soluções em função da pressão e facilitar a generalização dos resultados para pressões intermediárias.

As frações molares escolhidas representam uma aproximação das concentrações molares encontradas nos produtos de queima de metano em ar atmosférico, além de terem sido utilizadas por Cassol et al., 2014 e Ziemniczak, 2014, para obter coeficientes do WSGG em condições semelhantes, porém para pressão atmosférica. No entanto, uma das aplicações promissoras de combustão em alta pressão é a oxi-combustão, que envolve maiores concentrações molares dos produtos CO_2 e H_2O , devido à ausência de ar atmosférico na reação. Uma alternativa para generalizar as soluções deste trabalho para esse tipo de aplicação é resolver o problema para concentrações molares não homogêneas, variando as concentrações em uma faixa que inclua concentrações típicas de oxi-combustão, e através do método de superposição utilizado por Cassol et al., 2014, obter soluções para misturas com qualquer razão entre os produtos de combustão.

4.2 Obtenção das emitâncias totais

A partir dos valores de seção transversal de absorção obtidos para as diversas condições estudadas, é possível determinar os valores de emitância total ao longo de um determinado caminho utilizando a Equação (2.10), que representa a integração LBL da emitância. De acordo com esta equação, a emitância total é função do coeficiente de absorção, do produto entre a pressão parcial e o caminho pS e da temperatura. Em função disso, a maioria dos autores apresenta os resultados de emitância total em função da temperatura e do

produto pS . No entanto, essa maneira de se apresentar os resultados pode ser confusa quando os resultados envolvem diferentes valores pressão total, pois o leitor pode interpretar que os resultados apresentados para um dado produto pS seja válido para quaisquer valores de fração molar e pressão total que possam resultar neste produto, o que não é verdade.

Para exemplificar esse possível equívoco, a Figura 4.2 mostra os resultados de emitância total do CO_2 de 400 a 2500 K para um valor fixo de $pS = 1$ atm m, comparando o Caso 1, com pressão total de 1 atm e $Y = 1$, e o Caso 2, com pressão total de 10 atm e $Y = 0,1$, ambos com $S = 1$ m. Analisando a figura, nota-se que mesmo que o produto pS e a pressão parcial sejam mesmos para os dois casos, os resultados de emitância total são consideravelmente diferentes, sendo que para baixas temperaturas o Caso 2 chega a apresentar valores 30% maiores que o Caso 1. Uma comparação semelhante é feita para o H_2O na Figura 4.3, mostrando resultados de emitância total para $pS = 1$ atm m com $S = 1$ m e comparando o Caso 3, com pressão total de 1 atm e $Y = 1$, e o Caso 4, com pressão total de 5 atm e $Y = 0,2$. A diferença entre os casos do H_2O não é tão significativa quanto à do CO_2 , porém não é desprezível, sendo que o Caso 4 possui valores de emitância maiores que o do Caso 3 para todos os valores de temperatura.

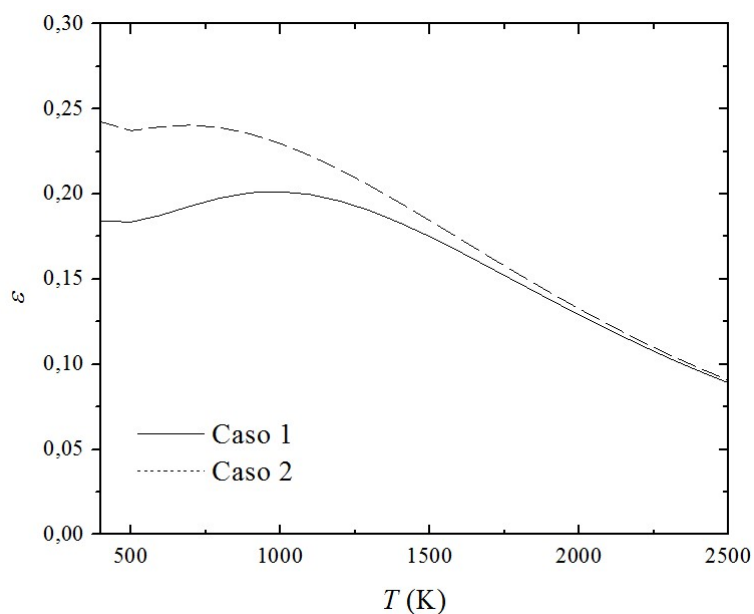


Figura 4.2 - Emitância total do CO_2 em função da temperatura com $pS = 1$ atm m para o Caso 1, com pressão total de 1 atm e $Y = 1$, e para o Caso 2, com pressão total de 10 atm e $Y = 0,1$, ambos com $S = 1$ m.

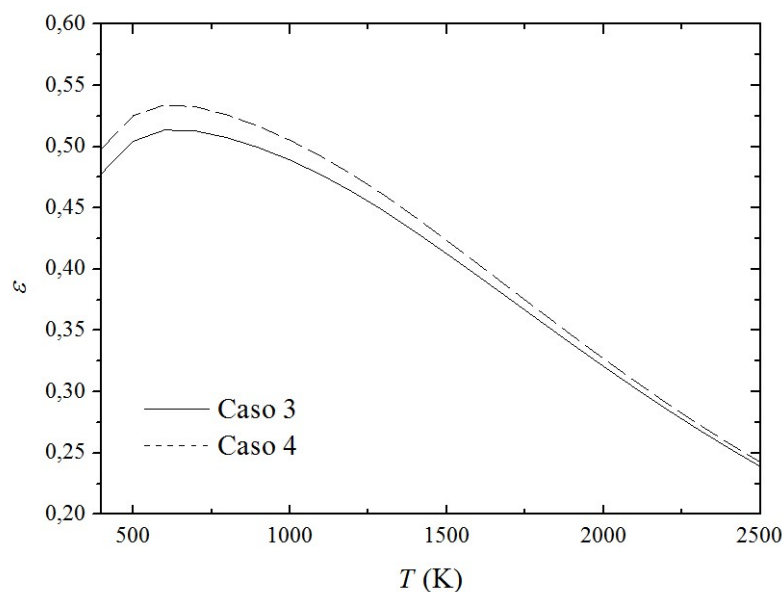


Figura 4.3 - Emitância total do H_2O em função da temperatura com $pS = 1$ atm m para o Caso 3, com pressão total de 1 atm e $Y = 1$, e para o Caso 4, com pressão total de 5 atm e $Y = 0,2$, ambos com $S = 1$ m.

Essa diferença ocorre pois, mesmo que a emitância seja função da pressão parcial e, conseqüentemente, do produto pS , ela também depende do coeficiente de absorção, que é função da fração molar e da pressão total, devido ao perfil de Lorentz. De acordo com as Equações (2.16) e (2.19), o coeficiente de absorção depende da fração molar e da pressão total em termos distintos, inviabilizando a generalização dos resultados em função da pressão parcial. Sendo assim, os efeitos da pressão total e da fração molar na radiação térmica devem ser estudados separadamente. Este trabalho é focado no estudo da pressão total, resolvendo apenas problemas com concentração homogênea das espécies.

Tendo em vista comparar os resultados de emitância entre diferentes pressões totais e, ao mesmo tempo, comparar os resultados com os de outros autores que apresentam os gráficos de emitância em função do produto pS , opta-se por apresentar os resultados em função do produto YS (fração molar multiplicado pelo caminho). O intervalo de YS utilizado neste trabalho é de $0,0005 \text{ m} \leq YS \leq 5 \text{ m}$ para o CO_2 e de $0,001 \text{ m} \leq YS \leq 10 \text{ m}$ para o H_2O .

4.3 Determinação dos coeficientes do WSGG

Os coeficientes do WSGG são ajustados a partir dos valores de emitância para cada espécie química utilizando quatro gases cinzas. Ziemniczak et al., 2013, fez um estudo para avaliar qual o número de gases ideal e chegou a conclusão de que 4 gases fornece um

resultado muito superior a 3 gases e próximo de 5 gases. Os coeficientes são gerados para espécies puras pois, de acordo com Cassol et al., 2014, as soluções podem ser posteriormente superpostas e, se calculadas para diversos valores de fração molar, generalizadas para misturas de gases não homogêneas.

O ajuste é feito através no método de regressão múltipla não linear de Lavenberg-Marquardt para determinar os coeficientes de absorção $\kappa_{p,j}$ a partir da Equação (3.6), utilizando a metodologia apresentada por Ziemniczak, 2014. A partir dos coeficientes $\kappa_{p,j}$, obtém-se os coeficientes $a_j(T)$ através de uma nova regressão não linear, novamente aplicando a Equação (3.6) para cada temperatura. Finalmente, obtém-se os coeficientes $b_{j,k}$ através de um ajuste polinomial dos coeficientes $a_j(T)$ em função da temperatura dado pela Equação (3.7), sendo que a ordem do polinômio é igual ao número de gases cinzas. Esse procedimento é feito para ambos CO₂ e H₂O e para cada pressão total analisada neste trabalho, totalizando seis conjuntos de coeficientes do WSGG para cada espécie.

Para validar os coeficientes do WSGG, obtém-se novos valores de emitância total através das Equações (3.6) e (3.7) e dos coeficientes do WSGG para cada valor de pressão total, temperatura e produto YS e compara-se com os valores de emitância originais calculados pela integração LBL. Além disso, os resultados de emitância para pressão atmosférica são comparados com os resultados obtidos por Cassol et al., 2014, para ambos CO₂ e H₂O em condições semelhantes.

Tendo em vista generalizar os coeficientes do WSGG para todos os valores de pressão total no intervalo de 1 a 40 atm, realiza-se um ajuste dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ em função da pressão total. Idealmente, deseja-se que os coeficientes se comportem de forma semelhante para os quatro gases cinzas e para ambos CO₂ e H₂O, sendo necessário ajustar apenas dois tipos de curva, uma para os $\kappa_{p,j}$ e outra para os $b_{j,k}$. Sendo assim, $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ podem ser parametrizadas de acordo com os coeficientes das curvas para cada caso, facilitando a utilização do modelo no futuro. Tendo as curvas ajustadas, é possível obter novos coeficientes do WSGG ajustado, compará-los com os coeficientes do WSGG original, e obter novos valores de emitância total para o ajuste.

4.4 Cálculo do fluxo de calor e do termo fonte radiativo

Como uma segunda forma de validação dos coeficientes do WSGG e do ajuste do WSGG, compara-se os resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo entre a solução

LBL e os modelos propostos nesse trabalho, para o problema de duas placas infinitas paralelas com um meio participante entre elas. As placas estão a 1 m de distância uma da outra e são consideradas como corpos negros. Os dois meios participantes considerados são os mesmos analisados anteriormente, CO₂ com $Y = 0,1$ e H₂O com $Y = 0,2$, e são avaliados três perfis de temperatura distintos, ilustrados na Figura 4.4 e dados por:

$$T(x) = 400 \text{ K} + (1400 \text{ K})\text{sen}^2(\pi x) \quad (4.1)$$

$$T(x) = 400 \text{ K} + (1400 \text{ K})\text{sen}^2(2\pi x) \quad (4.2)$$

$$T(x) = \begin{cases} 880\text{K} + (920\text{K})\text{sen}^2(2\pi x), & \text{se } x \leq 0,25\text{m} \\ 400\text{K} + (1400\text{K}) \left\{ 1 - \text{sen}^{3/2} \left[\frac{2}{3}\pi(x - 0,25) \right] \right\}, & \text{se } x > 0,25\text{m} \end{cases} \quad (4.3)$$

Os perfis de temperatura dados pelas Equações (4.1), (4.2) e (4.3) são nomeados Perfis 1, 2 e 3, respectivamente, e são escolhidos para este trabalho devido a possibilidade de comparar os resultados com os obtidos por Ziemniczak, 2014, que estudou um problema muito semelhante, porém apenas para pressão atmosférica. Os Perfis 1, 2 e 3 representam, respectivamente, o perfil de temperaturas aproximado de uma chama axissimétrica, de duas chamas axissimétricas lado a lado e de uma chama assimétrica.

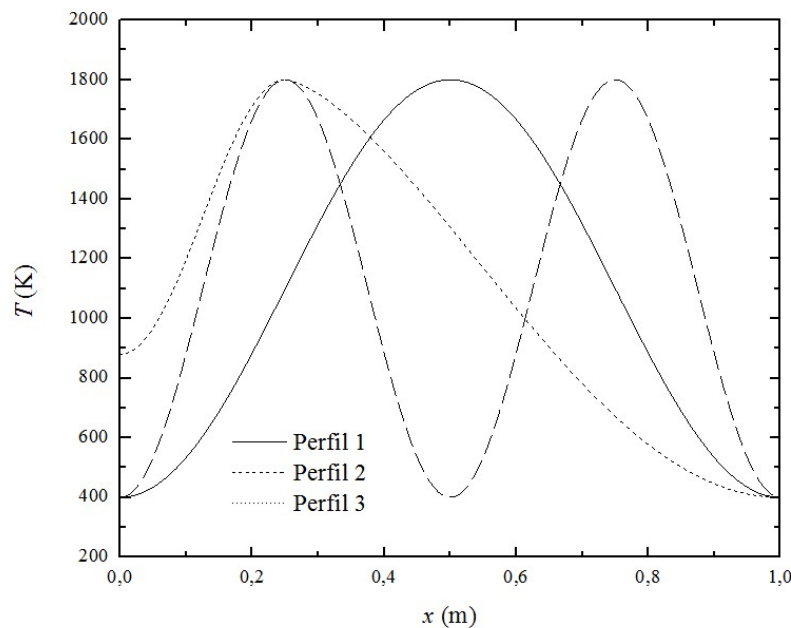


Figura 4.4 - Perfis de temperatura 1, 2 e 3 considerados para os cálculos de fluxo de calor e termo fonte radiativo.

O fluxo de calor radiativo e termo fonte obtidos através do método LBL são calculados pelas Equações (3.3) e (3.4), enquanto os para o método WSGG e para o ajuste do WSGG são calculados através das Equações (3.12) e (3.13), utilizando as condições de parede negra apresentadas no Capítulo 3. A discretização direcional foi feita utilizando o método das ordenadas discretas para trinta direções.

Finalmente, para avaliar o desempenho relativo à solução LBL dos modelos desenvolvidos neste trabalho, foram utilizados os desvios dados por

$$\delta = \frac{|q_{R,WSGG}'' - q_{R,LBL}''|}{\max |q_{R,LBL}''|} \times 100\% \quad (4.4)$$

$$\zeta = \frac{|S_{R,WSGG} - S_{R,LBL}|}{\max |S_{R,LBL}|} \times 100\% \quad (4.5)$$

onde δ e ζ são os desvios para o fluxo de calor e para o termo fonte, respectivamente; $q_{R,WSGG}''$ e $S_{R,WSGG}$ são os resultados para o fluxo de calor e o termo fonte obtidos pelo método WSGG e $q_{R,LBL}''$ e $S_{R,LBL}$ são o fluxo de calor e o termo fonte obtidos pela solução LBL.

Além da validação dos modelos, os resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo também são utilizados para estudar o efeito da pressão total na solução LBL.

5 RESULTADOS DE EMITÂNCIA TOTAL

5.1 Obtenção dos espectros absorção

A seção transversal de absorção em função do número de onda para o CO₂ está apresentada nas Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 para pressões de 1, 10 e 40 atm, respectivamente. Analisando as figuras, nota-se que a amplitude de variação da seção transversal de absorção reduz conforme a pressão aumenta. Apesar deste efeito, o valor médio da seção transversal não varia de forma significativa entre os casos. Esse comportamento está de acordo com o encontrado por Pearson et al., 2014, em uma análise semelhante.

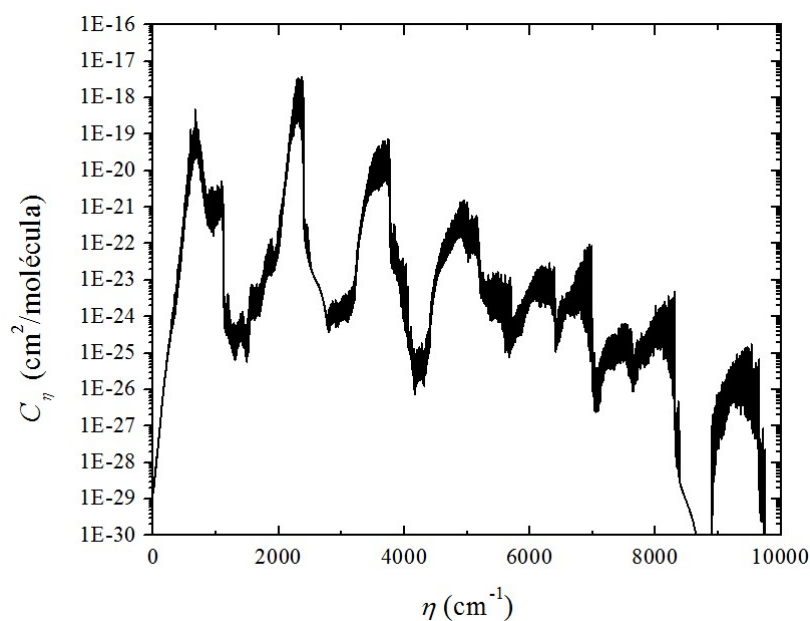


Figura 5.1 – Valores da seção transversal de absorção de CO₂ em função do número de onda para pressão total de 1 atm, fração molar de 0,1 e temperatura de 1500 K.

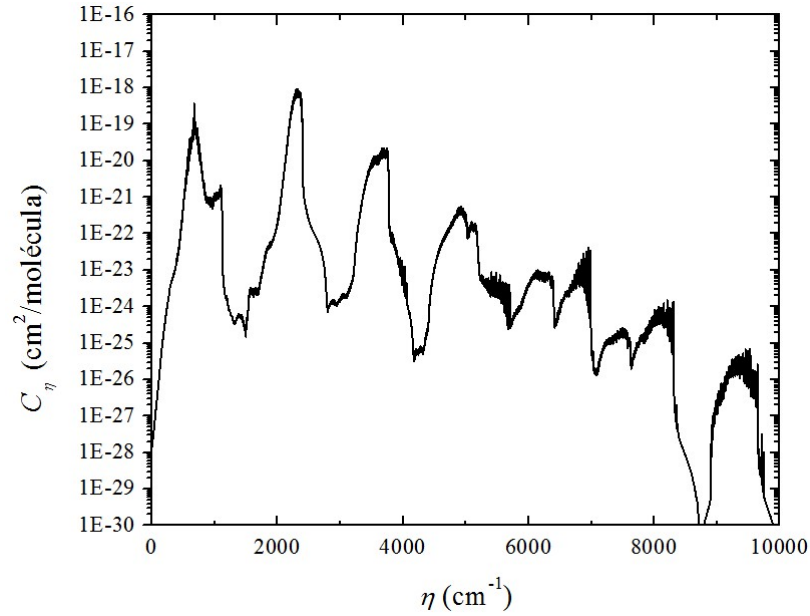


Figura 5.2 – Valores da seção transversal de absorção de CO_2 em função do número de onda para pressão total de 10 atm, fração molar de 0,1 e temperatura de 1500 K.

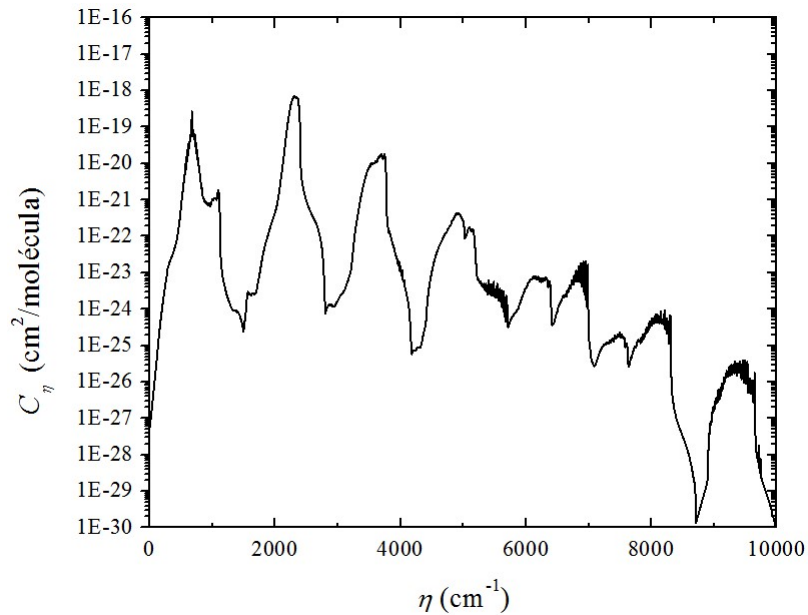


Figura 5.3 – Valores da seção transversal de absorção de CO_2 em função do número de onda para pressão total de 40, fração molar de 0,1 e temperatura de 1500 K.

Os valores de seção transversal de H_2O também se comportam de forma semelhante, conforme apresentado nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6, para as pressões de 1, 10 e 40 atm, respectivamente. Devido ao maior número de linhas espectrais presentes no espectro do H_2O , a atenuação da variação é ainda mais visível.

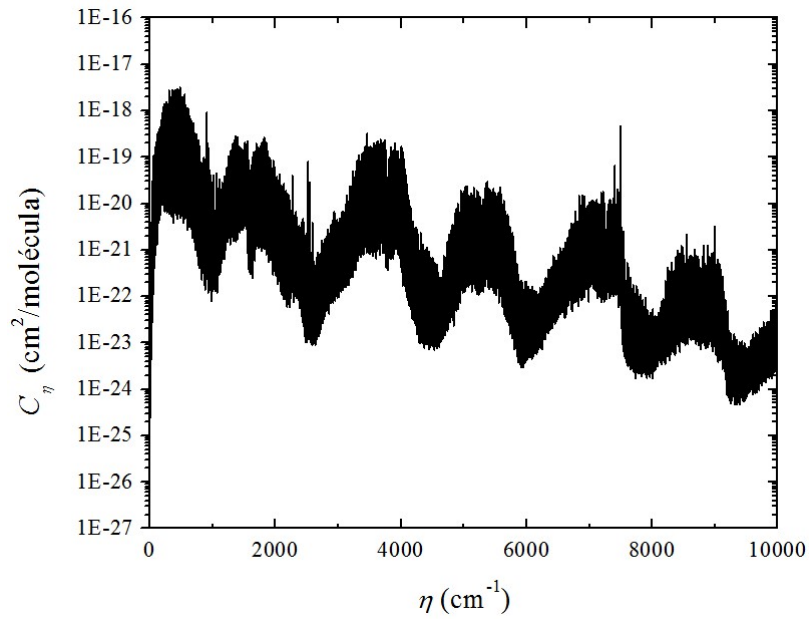


Figura 5.4 – Valores da seção transversal de absorção de H₂O em função do número de onda para pressão total de 1 atm, fração molar de 0,2 e temperatura de 1500 K.

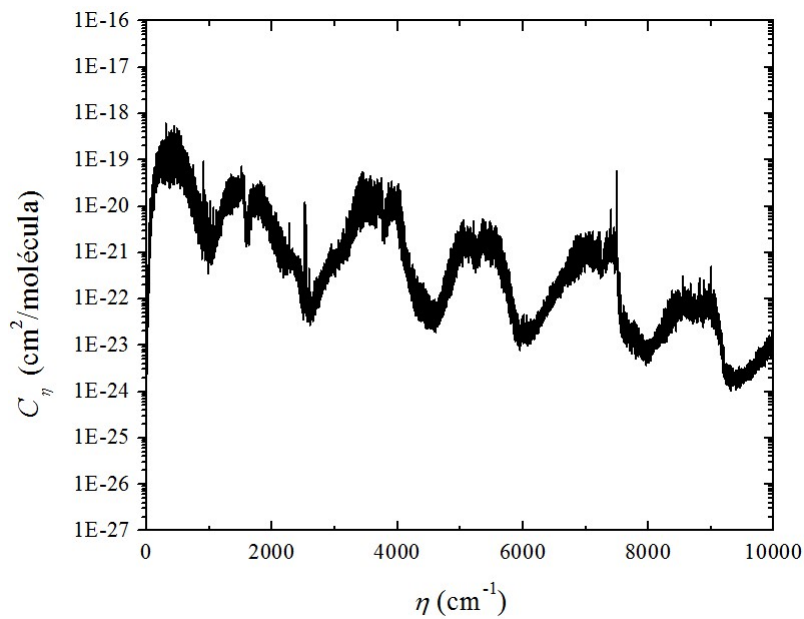


Figura 5.5 – Valores da seção transversal de absorção de H₂O em função do número de onda para pressão total de 10 atm, fração molar de 0,2 e temperatura de 1500 K.

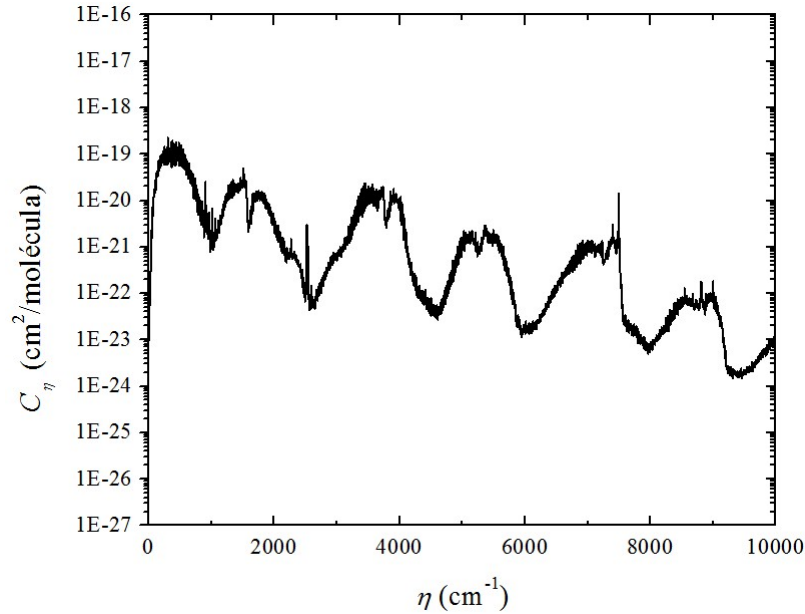


Figura 5.6 – Valores da seção transversal de absorção de H₂O em função do número de onda para pressão total de 40 atm, fração molar de 0,2 e temperatura de 1500 K.

Essa alteração nos espectros tanto do H₂O quanto do CO₂ é suficiente para assumir-se que os valores de emitância total devem ser afetados pelo aumento da pressão total, devido à dependência da emitância com a seção transversal de absorção representada nas Equações (2.10) e (3.6). Conseqüentemente, esse efeito na emitância também deve alterar os valores de fluxo e termo fonte radiativo.

5.2 Determinação dos coeficientes WSGG

A partir dos valores da seção transversal de absorção de CO₂, de H₂O, e da Equação (2.10), obtêm-se valores de emitância total pelo método LBL para as pressões 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm. Através das emitâncias do método LBL e das Equações (3.6) e (3.7), os coeficientes do modelo WSGG são determinados, sendo que os do CO₂ podem ser visualizados nas Tabelas 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5 e 5.6 para as pressões totais de 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm, respectivamente. Os coeficientes apresentados são válidos para temperaturas entre 400 e 2500 K e $0,0005 \text{ m} \leq YS \leq 5 \text{ m}$.

Tabela 5.1 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ e pressão total de 1 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,261	2,442×10 ⁻²	6,183×10 ⁻⁴	-7,486×10 ⁻⁷	3,335×10 ⁻¹⁰	-5,198×10 ⁻¹⁴
2	3,441	6,953×10 ⁻²	-1,339×10 ⁻⁴	2,582×10 ⁻⁷	-1,481×10 ⁻¹⁰	2,599×10 ⁻¹⁴
3	25,691	1,102×10 ⁻¹	-2,044×10 ⁻⁴	2,296×10 ⁻⁷	-1,105×10 ⁻¹⁰	1,817×10 ⁻¹⁴
4	309,289	-4,009×10 ⁻²	2,737×10 ⁻⁴	-2,829×10 ⁻⁷	1,097×10 ⁻¹⁰	-1,491×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.2 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ e pressão total de 2 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,152	1,428×10 ⁻¹	5,263×10 ⁻⁴	-7,565×10 ⁻⁷	3,642×10 ⁻¹⁰	-5,983×10 ⁻¹⁴
2	2,042	-1,101×10 ⁻²	1,960×10 ⁻⁴	-1,362×10 ⁻⁷	3,206×10 ⁻¹¹	-2,140×10 ⁻¹⁵
3	14,148	1,628×10 ⁻¹	-3,938×10 ⁻⁴	4,712×10 ⁻⁷	-2,247×10 ⁻¹⁰	3,628×10 ⁻¹⁴
4	258,403	-2,205×10 ⁻²	2,625×10 ⁻⁴	-2,795×10 ⁻⁷	1,082×10 ⁻¹⁰	-1,452×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.3 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ e pressão total de 5 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,073	6,384×10 ⁻¹	-1,112×10 ⁻³	1,085×10 ⁻⁶	-4,625×10 ⁻¹⁰	6,937×10 ⁻¹⁴
2	0,638	-1,551×10 ⁻¹	1,062×10 ⁻³	-1,262×10 ⁻⁶	5,674×10 ⁻¹⁰	-8,838×10 ⁻¹⁴
3	6,724	1,929×10 ⁻¹	-5,075×10 ⁻⁴	6,625×10 ⁻⁷	-3,266×10 ⁻¹⁰	5,362×10 ⁻¹⁴
4	185,936	1,455×10 ⁻²	2,050×10 ⁻⁴	-2,279×10 ⁻⁷	8,572×10 ⁻¹¹	-1,099×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.4 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ e pressão total de 10 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,045	7,567×10 ⁻¹	-1,931×10 ⁻³	2,233×10 ⁻⁶	-1,030×10 ⁻⁹	1,632×10 ⁻¹³
2	0,374	2,455×10 ⁻²	8,742×10 ⁻⁴	-1,200×10 ⁻⁶	5,665×10 ⁻¹⁰	-9,037×10 ⁻¹⁴
3	5,217	1,070×10 ⁻¹	-1,425×10 ⁻⁴	2,505×10 ⁻⁷	-1,435×10 ⁻¹⁰	2,525×10 ⁻¹⁴
4	151,891	5,294×10 ⁻²	9,748×10 ⁻⁵	-1,124×10 ⁻⁷	3,459×10 ⁻¹¹	-3,061×10 ⁻¹⁵

Tabela 5.5 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ e pressão total de 20 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,025	3,916×10 ⁻¹	-1,134×10 ⁻³	1,539×10 ⁻⁶	-7,496×10 ⁻¹⁰	1,207×10 ⁻¹³
2	0,252	4,312×10 ⁻¹	-3,046×10 ⁻⁴	9,882×10 ⁻⁸	-2,250×10 ⁻¹¹	3,065×10 ⁻¹⁵
3	3,641	1,351×10 ⁻²	4,007×10 ⁻⁴	-4,302×10 ⁻⁷	1,735×10 ⁻¹⁰	-2,511×10 ⁻¹⁴
4	108,530	-1,003×10 ⁻¹	-3,971×10 ⁻⁵	4,156×10 ⁻⁸	-3,481×10 ⁻¹¹	7,774×10 ⁻¹⁵

Tabela 5.6 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ e pressão total de 40 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,011	$5,185 \times 10^{-2}$	$-1,082 \times 10^{-4}$	$4,682 \times 10^{-7}$	$-2,774 \times 10^{-10}$	$4,658 \times 10^{-14}$
2	0,175	$5,762 \times 10^{-1}$	$-1,065 \times 10^{-3}$	$1,114 \times 10^{-6}$	$-5,083 \times 10^{-10}$	$8,096 \times 10^{-14}$
3	2,133	$1,122 \times 10^{-1}$	$4,491 \times 10^{-4}$	$-6,088 \times 10^{-7}$	$2,673 \times 10^{-10}$	$-3,985 \times 10^{-14}$
4	58,250	$1,244 \times 10^{-1}$	$-4,333 \times 10^{-5}$	$3,704 \times 10^{-8}$	$-3,141 \times 10^{-11}$	$6,992 \times 10^{-15}$

Tendo-se os coeficientes do WSGG, é então possível calcular-se os valores de emitância total do modelo. As Figuras 5.7, 5.8 e 5.9 mostram a comparação entre os resultados de emitância do LBL e do modelo WSGG para quatro valores de Y_S , sendo dois deles os extremos do domínio e dois valores intermediários. Como pode ser visto nas figuras, o modelo WSGG apresenta uma boa correlação com o LBL para todos os valores de pressão total, possuindo maiores erros apenas para o menor valor de Y_S . Esse desvio para pequenos valores de Y_S varia pouco em função da pressão total, porém de acordo com Cassol et al., 2014, a radiação térmica para casos com pequenos valores de Y_S não é tão importante.

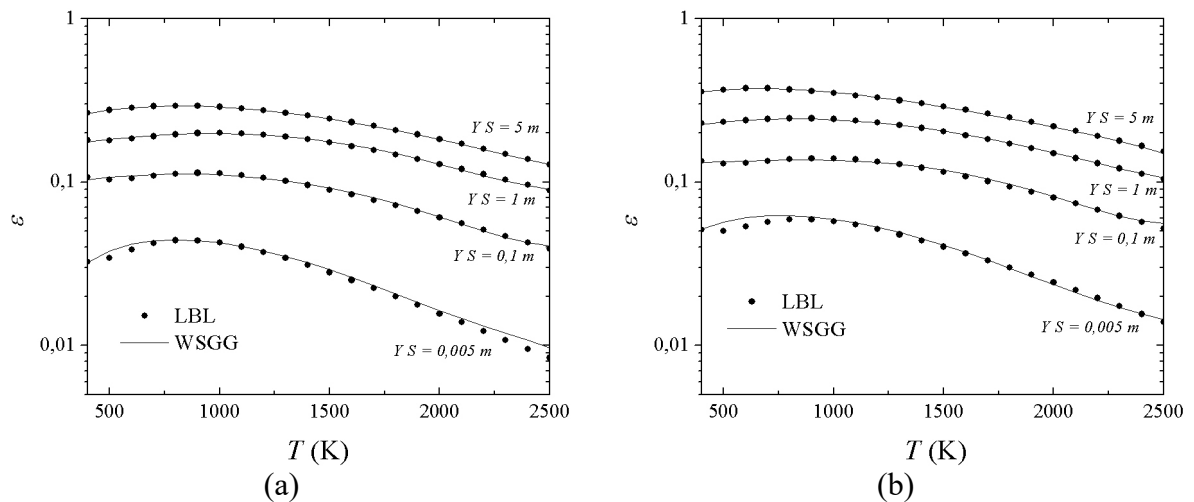


Figura 5.7 – Emitância total do CO₂ em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.

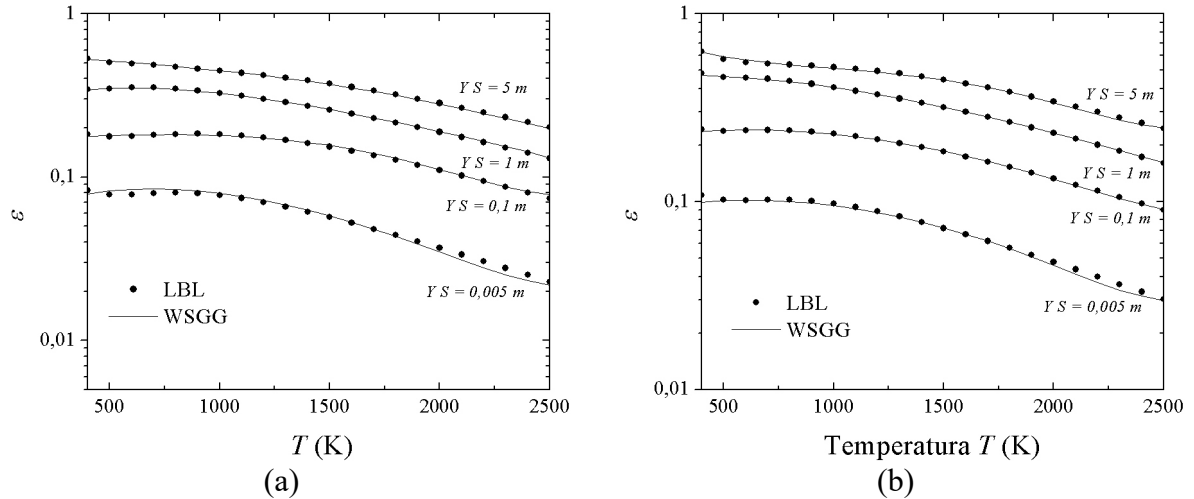


Figura 5.8 – Emitância total do CO₂ em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.

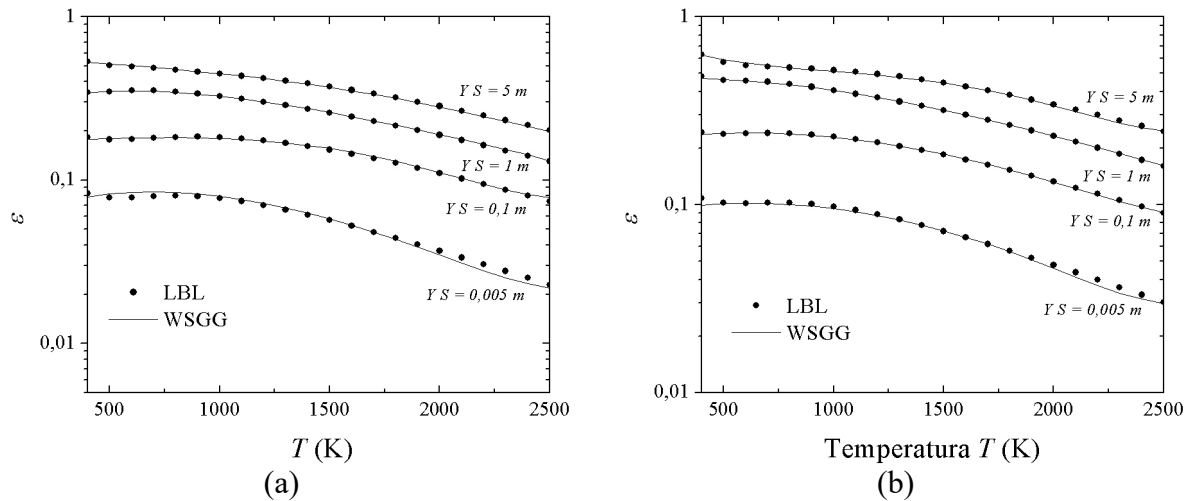


Figura 5.9 – Emitância total do CO₂ em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 20 atm; (b) 40 atm.

Utilizando metodologia semelhante, os coeficientes do modelo WSGG para o H₂O também foram determinados e podem ser visualizados nas Tabelas 5.7, 5.8, 5.9, 5.10, 5.11 e 5.12, para as pressões de 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm, respectivamente. Os coeficientes apresentados são válidos para temperaturas entre 400 e 2500 K e $0,001 \text{ m} \leq YS \leq 10 \text{ m}$.

Tabela 5.7 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O e pressão total de 1 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,182	$8,998 \times 10^{-2}$	$4,567 \times 10^{-4}$	$-3,369 \times 10^{-7}$	$1,510 \times 10^{-10}$	$-2,723 \times 10^{-14}$
2	1,358	$6,831 \times 10^{-2}$	$2,308 \times 10^{-4}$	$-2,674 \times 10^{-9}$	$-7,251 \times 10^{-11}$	$1,719 \times 10^{-14}$
3	7,819	$3,448 \times 10^{-4}$	$6,119 \times 10^{-4}$	$-6,886 \times 10^{-7}$	$2,789 \times 10^{-10}$	$-3,980 \times 10^{-14}$
4	75,164	$2,203 \times 10^{-1}$	$-3,131 \times 10^{-4}$	$1,741 \times 10^{-7}$	$-4,492 \times 10^{-11}$	$4,552 \times 10^{-15}$

Tabela 5.8 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O e pressão total de 2 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,112	1,441×10 ⁻¹	3,853×10 ⁻⁴	-4,236×10 ⁻⁷	2,374×10 ⁻¹⁰	-4,560×10 ⁻¹⁴
2	0,792	6,170×10 ⁻²	1,343×10 ⁻⁴	1,648×10 ⁻⁷	-1,444×10 ⁻¹⁰	2,730×10 ⁻¹⁴
3	4,993	-4,046×10 ⁻²	8,335×10 ⁻⁴	-8,029×10 ⁻⁷	2,864×10 ⁻¹⁰	-3,689×10 ⁻¹⁴
4	49,279	2,960×10 ⁻¹	-3,083×10 ⁻⁴	7,046×10 ⁻⁸	1,898×10 ⁻¹¹	-6,680×10 ⁻¹⁵

Tabela 5.9 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O e pressão total de 5 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,051	4,827×10 ⁻¹	-8,302×10 ⁻⁴	8,331×10 ⁻⁷	-3,107×10 ⁻¹⁰	3,924×10 ⁻¹⁴
2	0,366	-5,627×10 ⁻²	7,542×10 ⁻⁴	-6,948×10 ⁻⁷	3,127×10 ⁻¹⁰	-5,241×10 ⁻¹⁴
3	2,711	-3,380×10 ⁻²	4,995×10 ⁻⁴	-1,071×10 ⁻⁷	-1,009×10 ⁻¹⁰	2,981×10 ⁻¹⁴
4	25,636	3,701×10 ⁻¹	-2,519×10 ⁻⁵	-3,960×10 ⁻⁷	2,467×10 ⁻¹⁰	-4,311×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.10 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O e pressão total de 10 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,036	6,747×10 ⁻¹	-1,591×10 ⁻³	1,750×10 ⁻⁶	-7,523×10 ⁻¹⁰	1,126×10 ⁻¹³
2	0,319	-2,711×10 ⁻²	8,393×10 ⁻⁴	-9,044×10 ⁻⁷	4,511×10 ⁻¹⁰	-7,964×10 ⁻¹⁴
3	2,808	-7,584×10 ⁻²	5,586×10 ⁻⁴	-5,761×10 ⁻⁸	-1,575×10 ⁻¹⁰	4,226×10 ⁻¹⁴
4	26,235	4,024×10 ⁻¹	-8,570×10 ⁻⁶	-4,818×10 ⁻⁷	3,003×10 ⁻¹⁰	-5,284×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.11 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O e pressão total de 20 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,023	6,644×10 ⁻¹	-1,748×10 ⁻³	2,030×10 ⁻⁶	-9,245×10 ⁻¹⁰	1,461×10 ⁻¹³
2	0,222	1,466×10 ⁻¹	4,414×10 ⁻⁴	-6,418×10 ⁻⁷	3,936×10 ⁻¹⁰	-7,740×10 ⁻¹⁴
3	1,920	-1,705×10 ⁻¹	6,859×10 ⁻⁴	-7,266×10 ⁻⁸	-1,707×10 ⁻¹⁰	4,549×10 ⁻¹⁴
4	19,071	4,393×10 ⁻¹	1,325×10 ⁻⁴	-6,652×10 ⁻⁷	3,757×10 ⁻¹⁰	-6,347×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.12 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O e pressão total de 40 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,014	4,350×10 ⁻¹	-1,108×10 ⁻³	1,354×10 ⁻⁶	-6,439×10 ⁻¹⁰	1,057×10 ⁻¹³
2	0,132	4,570×10 ⁻¹	-5,952×10 ⁻⁴	4,254×10 ⁻⁷	-6,605×10 ⁻¹¹	-6,940×10 ⁻¹⁵
3	1,018	-2,736×10 ⁻¹	9,947×10 ⁻⁴	-4,444×10 ⁻⁷	3,448×10 ⁻¹¹	7,893×10 ⁻¹⁵
4	12,172	4,533×10 ⁻¹	3,093×10 ⁻⁴	-7,827×10 ⁻⁷	3,897×10 ⁻¹⁰	-6,140×10 ⁻¹⁴

Analogamente ao CO_2 , as Figuras 5.10, 5.11 e 5.12 mostram a comparação entre os resultados de emitância do LBL e do modelo WSGG para quatro valores de YS . Novamente, o modelo WSGG apresenta uma boa correlação com o LBL para todos os valores de pressão total, com exceção do erro para pequenos valores de YS , que neste caso é apenas significativa a partir de 5atm, como pode ser visto nas Figuras 5.11 e 5.12.

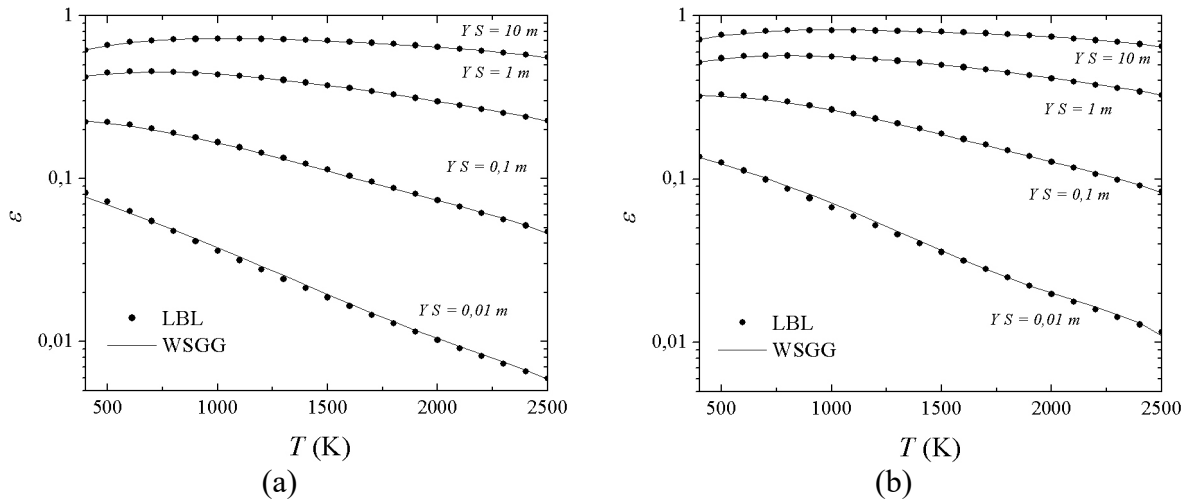


Figura 5.10 – Emitância total do H_2O em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.

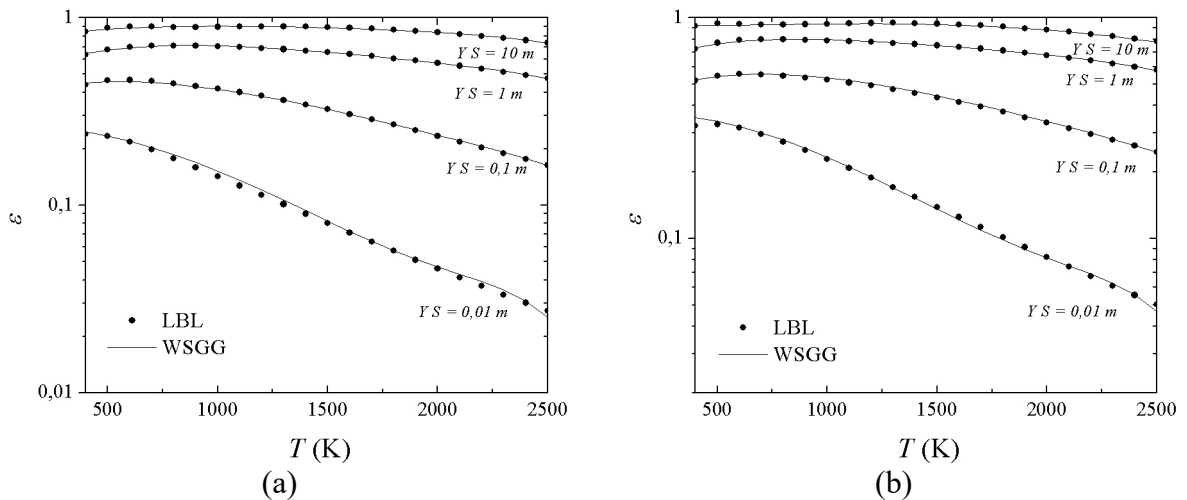


Figura 5.11 – Emitância total do H_2O em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.

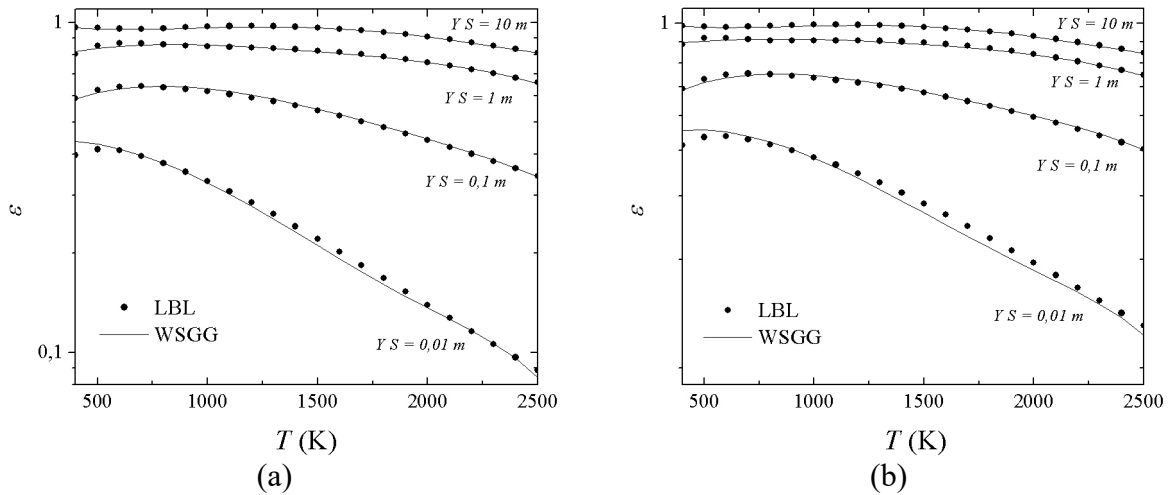


Figura 5.12 – Emitância total do H_2O em função da temperatura obtida através dos métodos LBL e WSGG para pressões totais de: (a) 20 atm; (b) 40 atm.

Os resultados presentes nas Figuras 5.7(a) e 5.10(a), que apresentam a correlação do modelo WSGG com o LBL para CO_2 com $Y = 0,1$ e H_2O com $Y = 0,2$ a 1 atm, concordam com os obtidos por Cassol et al., 2014, que resolveu o mesmo caso com uma metodologia semelhante.

5.3 Ajuste dos coeficientes WSGG em função da pressão total

Com os coeficientes do WSGG e tendo como objetivo generalizar a solução para qualquer valor de pressão, ajustam-se os coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ em função da pressão total. Os coeficientes $\kappa_{p,j}$ apresentam o mesmo comportamento em função da pressão para todos os valores de j e para ambos CO_2 e H_2O , exemplificado na Figura 5.13 para o $\kappa_{p,1}$ do CO_2 e na Figura 5.14 para o H_2O .

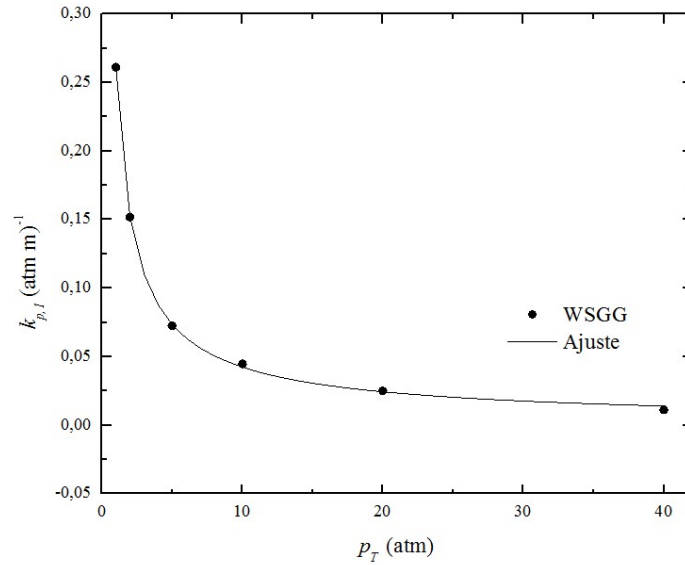


Figura 5.13 – Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $\kappa_{p,1}$ do WSGG para CO_2 em função da pressão total.

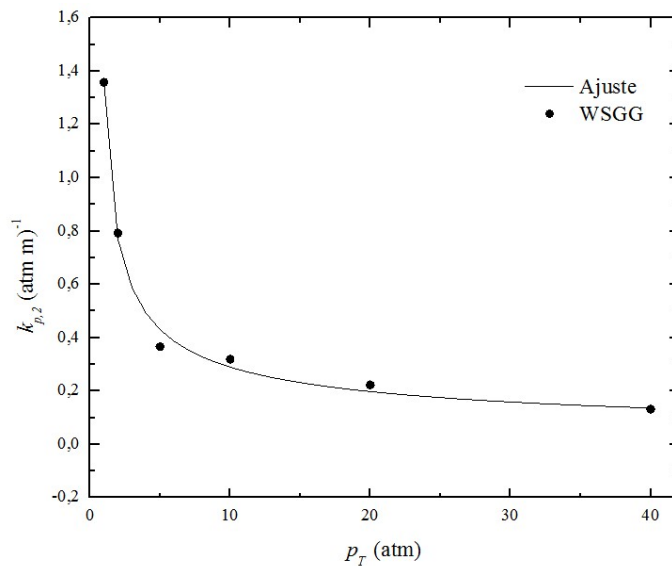


Figura 5.14 – Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $\kappa_{p,2}$ do WSGG para H_2O em função da pressão total

Apesar de o comportamento apresentado ser muito próximo do exponencial e o ajuste de curva exponencial apresentar um bom nível de correlação, a curva que melhor se ajustou aos dados foi do tipo *Power Law* com forma

$$\kappa_{p,j} = c(p_T - d)^f \quad (5.1)$$

onde c , d e f são coeficientes do ajuste de curva. Inicialmente, a curva exponencial parece uma boa alternativa devido a sua maior simplicidade, porém apesar de sua boa correlação, os

valores de emitância provenientes do ajuste exponencial apresentam erros muito elevados, demonstrando que a emitância total possui uma dependência muito sensível ao valor de $\kappa_{p,j}$ e pequenos erros no ajuste deste coeficiente levam a grandes erros nos resultados de emitância. Sendo assim, justifica-se o esforço de obter um ajuste de curva com coeficiente de correlação mais elevado como o da curva *Power Law*, conforme pode ser observado na Tabela 5.13 e Tabela 5.14, para o CO₂ e H₂O, respectivamente.

Tabela 5.13 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ para o CO₂.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c ($\text{atm}^{1+f} \text{ m}^{-1}$)	Coeficiente d (atm)	Coeficiente f (-)	R^2
$\kappa_{p,1}$	$2,671 \times 10^{-1}$	$-2,929 \times 10^{-1}$	$-7,984 \times 10^{-1}$	0,9998
$\kappa_{p,2}$	6,776	$-7,228 \times 10^{-1}$	-1,236	0,9972
$\kappa_{p,3}$	$1,743 \times 10^1$	$4,990 \times 10^{-1}$	$-5,628 \times 10^{-1}$	0,9989
$\kappa_{p,4}$	$6,050 \times 10^2$	-2,249	$-5,778 \times 10^{-1}$	0,9960

Tabela 5.14 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ para o H₂O.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c ($\text{atm}^{1+f} \text{ m}^{-1}$)	Coeficiente d (atm)	Coeficiente f (-)	R^2
$\kappa_{p,1}$	$1,731 \times 10^{-1}$	$7,488 \times 10^{-2}$	$-7,057 \times 10^{-1}$	0,9990
$\kappa_{p,2}$	$9,573 \times 10^{-1}$	$4,849 \times 10^{-1}$	$-5,305 \times 10^{-1}$	0,9971
$\kappa_{p,3}$	5,670	$5,573 \times 10^{-1}$	$-3,953 \times 10^{-1}$	0,9910
$\kappa_{p,4}$	$5,440 \times 10^1$	$5,728 \times 10^{-1}$	$-3,830 \times 10^{-1}$	0,9920

Para os coeficiente $b_{j,k}$ encontrar uma curva que se ajuste a todos os dados é mais complicado que para os $\kappa_{p,j}$, pois o comportamento de $b_{j,k}$ é diferente para cada j e para cada k . Para que não fosse necessário ter uma curva diferente para cada caso e tendo em vista facilitar a utilização do ajuste para resolver futuros problemas com pressões diferentes das utilizadas neste trabalho, opta-se por ajustar todos os $b_{j,k}$ para um mesmo tipo de curva. A curva escolhida é a polinomial de segunda ordem, ilustrada nas Figuras 5.15 e 5.16, e possui forma

$$b_{j,k} = c + d p_T + f p_T^2 \quad (5.2)$$

Sendo c , d e f os coeficientes do ajuste de curva.

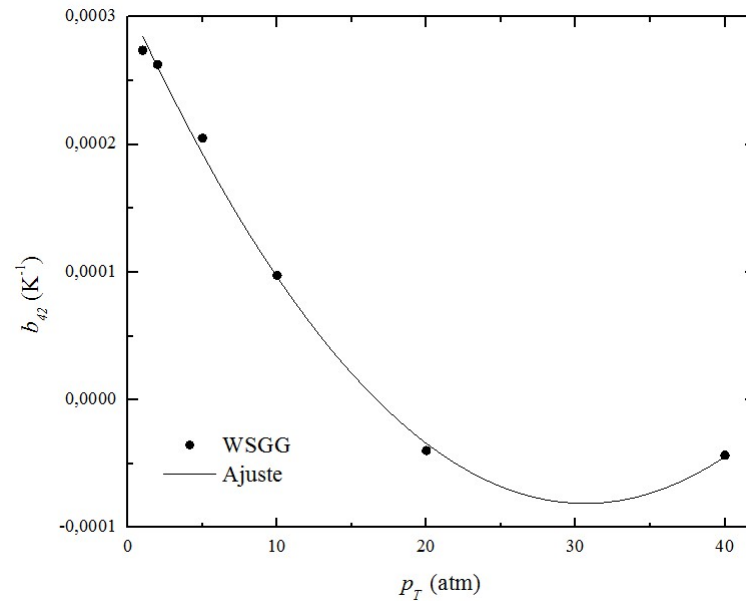


Figura 5.15 – Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $b_{4,2}$ do WSGG para CO_2 em função da pressão total.

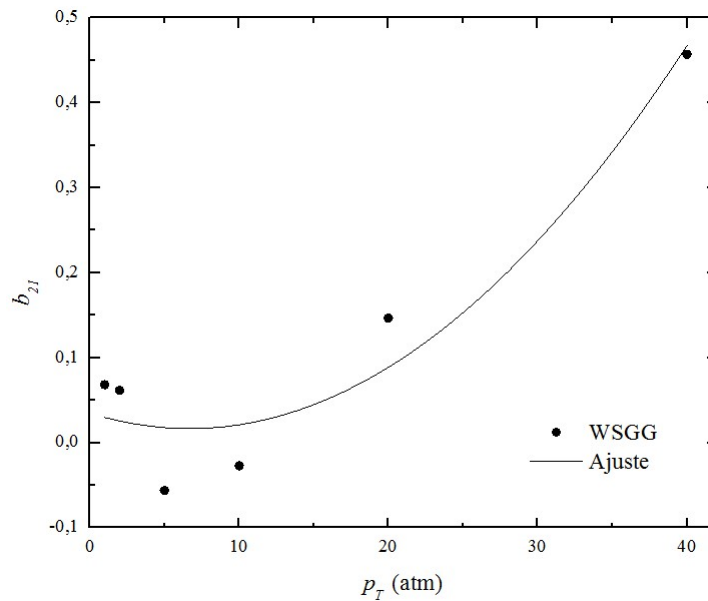


Figura 5.16 – Comparação entre o ajuste de curva dos coeficientes originais $b_{2,1}$ do WSGG para H_2O em função da pressão total.

Apesar de esta curva não possuir um coeficiente de correlação tão bom quanto os obtidos no ajuste dos $\kappa_{p,j}$, como pode ser visto nas Tabelas 5.15, 5.16, 5.17, 5.18 e 5.19 para o CO_2 e Tabelas 5.20, 5.21, 5.22, 5.23 e 5.24 para o H_2O , foi a curva que apresentou o melhor desempenho no geral.

Tabela 5.15 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,1}$ para o CO₂.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (-)	Coeficiente d (atm ⁻¹)	Coeficiente f (atm ⁻²)	R^2
$b_{1,1}$	$1,510 \times 10^{-1}$	$5,210 \times 10^{-2}$	$-1,392 \times 10^{-3}$	0,7357
$b_{2,1}$	$-8,539 \times 10^{-2}$	$2,163 \times 10^{-2}$	$-1,125 \times 10^{-4}$	0,9009
$b_{3,1}$	$1,783 \times 10^{-1}$	$-1,108 \times 10^{-2}$	$2,312 \times 10^{-4}$	0,7199
$b_{4,1}$	$-4,315 \times 10^{-2}$	$1,080 \times 10^{-2}$	$-1,661 \times 10^{-4}$	0,9959

Tabela 5.16 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,2}$ para o CO₂.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻¹)	Coeficiente d (K ⁻¹ atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻¹ atm ⁻²)	R^2
$b_{1,2}$	$5,027 \times 10^{-4}$	$-2,225 \times 10^{-4}$	$5,258 \times 10^{-6}$	0,8150
$b_{2,2}$	$3,171 \times 10^{-4}$	$2,806 \times 10^{-5}$	$-1,625 \times 10^{-6}$	0,7919
$b_{3,2}$	$-4,777 \times 10^{-4}$	$4,825 \times 10^{-5}$	$-6,083 \times 10^{-7}$	0,9031
$b_{4,2}$	$3,099 \times 10^{-4}$	$-2,554 \times 10^{-5}$	$4,170 \times 10^{-7}$	0,9985

Tabela 5.17 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,3}$ para o CO₂.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻²)	Coeficiente d (K ⁻² atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻² atm ⁻²)	R^2
$b_{1,3}$	$-7,506 \times 10^{-7}$	$2,778 \times 10^{-7}$	$-6,263 \times 10^{-9}$	0,8544
$b_{2,3}$	$-2,305 \times 10^{-7}$	$-6,825 \times 10^{-8}$	$2,619 \times 10^{-9}$	0,7750
$b_{3,3}$	$5,629 \times 10^{-7}$	$-4,808 \times 10^{-8}$	$4,449 \times 10^{-10}$	0,8965
$b_{4,3}$	$-3,287 \times 10^{-7}$	$2,658 \times 10^{-8}$	$-4,345 \times 10^{-10}$	0,9954

Tabela 5.18 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,4}$ para o CO₂.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻³)	Coeficiente d (K ⁻³ atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻³ atm ⁻²)	R^2
$b_{1,4}$	$3,631 \times 10^{-10}$	$-1,303 \times 10^{-10}$	$2,892 \times 10^{-12}$	0,8688
$b_{2,4}$	$6,964 \times 10^{-11}$	$3,680 \times 10^{-11}$	$-1,315 \times 10^{-12}$	0,7721
$b_{3,4}$	$-2,653 \times 10^{-10}$	$1,991 \times 10^{-11}$	$-1,529 \times 10^{-13}$	0,8869
$b_{4,4}$	$1,303 \times 10^{-10}$	$-1,184 \times 10^{-11}$	$1,943 \times 10^{-13}$	0,9949

Tabela 5.19 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,5}$ para o CO₂.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻⁴)	Coeficiente d (K ⁻⁴ atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻⁴ atm ⁻²)	R^2
$b_{1,5}$	$-5,934 \times 10^{-14}$	$2,080 \times 10^{-14}$	$-4,594 \times 10^{-16}$	0,8744
$b_{2,5}$	$-7,986 \times 10^{-15}$	$-6,179 \times 10^{-15}$	$2,155 \times 10^{-16}$	0,7702
$b_{3,5}$	$4,271 \times 10^{-14}$	$-2,984 \times 10^{-15}$	$2,104 \times 10^{-17}$	0,8794
$b_{4,5}$	$-1,805 \times 10^{-14}$	$1,860 \times 10^{-15}$	$-3,073 \times 10^{-17}$	0,9953

Tabela 5.20 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,1}$ para o H₂O.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (-)	Coeficiente d (atm ⁻¹)	Coeficiente f (atm ⁻²)	R^2
$b_{1,1}$	$9,626 \times 10^{-2}$	$6,015 \times 10^{-2}$	$-1,305 \times 10^{-3}$	0,9212
$b_{2,1}$	$3,474 \times 10^{-2}$	$-5,422 \times 10^{-3}$	$4,060 \times 10^{-4}$	0,9583
$b_{3,1}$	$5,180 \times 10^{-4}$	$-9,295 \times 10^{-3}$	$6,010 \times 10^{-5}$	0,9915
$b_{4,1}$	$2,516 \times 10^{-1}$	$1,657 \times 10^{-2}$	$-2,914 \times 10^{-4}$	0,9331

Tabela 5.21 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,2}$ para o H₂O.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻¹)	Coeficiente d (K ⁻¹ atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻¹ atm ⁻²)	R^2
$b_{1,2}$	$5,365 \times 10^{-4}$	$-2,241 \times 10^{-4}$	$4,613 \times 10^{-6}$	0,9465
$b_{2,2}$	$2,310 \times 10^{-4}$	$6,333 \times 10^{-5}$	$-2,122 \times 10^{-6}$	0,9243
$b_{3,2}$	$6,812 \times 10^{-4}$	$-1,351 \times 10^{-5}$	$5,403 \times 10^{-7}$	0,8216
$b_{4,2}$	$-3,105 \times 10^{-4}$	$3,383 \times 10^{-5}$	$-4,643 \times 10^{-7}$	0,9588

Tabela 5.22 – Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,3}$ para o H₂O.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻²)	Coeficiente d (K ⁻² atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻² atm ⁻²)	R^2
$b_{1,3}$	$-5,477 \times 10^{-7}$	$2,438 \times 10^{-7}$	$-4,941 \times 10^{-9}$	0,9598
$b_{2,3}$	$6,611 \times 10^{-8}$	$-1,044 \times 10^{-7}$	$2,860 \times 10^{-9}$	0,8964
$b_{3,3}$	$-7,225 \times 10^{-7}$	$7,389 \times 10^{-8}$	$-1,691 \times 10^{-9}$	0,8349
$b_{4,3}$	$1,324 \times 10^{-7}$	$-6,808 \times 10^{-8}$	$1,143 \times 10^{-9}$	0,9473

Tabela 5.23– Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,4}$ para o H₂O.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻³)	Coeficiente d (K ⁻³ atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻³ atm ⁻²)	R^2
$b_{1,4}$	$2,840 \times 10^{-10}$	$-1,107 \times 10^{-10}$	$2,200 \times 10^{-12}$	0,9671
$b_{2,4}$	$-1,152 \times 10^{-10}$	$6,172 \times 10^{-11}$	$-1,525 \times 10^{-12}$	0,8962
$b_{3,4}$	$2,788 \times 10^{-10}$	$-4,847 \times 10^{-11}$	$1,070 \times 10^{-12}$	0,8755
$b_{4,4}$	$-1,969 \times 10^{-11}$	$3,532 \times 10^{-11}$	$-6,339 \times 10^{-13}$	0,9397

Tabela 5.24– Coeficientes do ajuste de curva dos coeficientes $b_{j,5}$ para o H₂O.

Coeficientes do WSGG	Coeficiente c (K ⁻⁴)	Coeficiente d (K ⁻⁴ atm ⁻¹)	Coeficiente f (K ⁻⁴ atm ⁻²)	R^2
$b_{1,5}$	$-5,240 \times 10^{-14}$	$1,772 \times 10^{-14}$	$-3,459 \times 10^{-16}$	0,9715
$b_{2,5}$	$2,495 \times 10^{-14}$	$-1,146 \times 10^{-14}$	$2,688 \times 10^{-16}$	0,9074
$b_{3,5}$	$-3,848 \times 10^{-14}$	$8,969 \times 10^{-15}$	$-1,972 \times 10^{-16}$	0,8885
$b_{4,5}$	$1,808 \times 10^{-16}$	$-5,838 \times 10^{-15}$	$1,086 \times 10^{-16}$	0,9315

Como pode ser visto na Tabelas 5.15, os coeficientes $b_{1,1}$ e $b_{3,1}$ são exemplos de coeficientes que apresentaram um índice de correlação insatisfatório. No entanto, mesmo possuindo algumas curvas mal ajustadas para alguns $b_{j,k}$, os resultados finais de emitância total do ajuste se mostraram muito mais sensíveis a erros no ajuste do $\kappa_{p,j}$ que aos erros no ajuste do $b_{j,k}$. A provável razão desta diferença de importância de cada ajuste está na natureza dos coeficientes do WSGG, onde $\kappa_{p,j}$ representa uma propriedade física no modelo enquanto os $b_{j,k}$ são apenas coeficientes de ponderação. Sendo assim, optou-se por manter a curva polinomial de segunda ordem para os $b_{j,k}$, pois mantém-se a simplicidade do ajuste sem comprometer os resultados finais.

Utilizando os ajustes de curva dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ do CO₂ para as pressões de 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm, é possível obter novos coeficientes do WSGG, ilustrados nas Tabelas 5.25, 5.26, 5.27, 5.28, 5.29 e 5.30.

Tabela 5.25 – Coeficientes do ajuste do WSGG para CO₂ e pressão total de 1 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,261	2,017×10 ⁻¹	2,855×10 ⁻⁴	-4,791×10 ⁻⁷	2,357×10 ⁻¹⁰	-3,900×10 ⁻¹⁴
2	3,459	-6,387×10 ⁻²	3,435×10 ⁻⁴	-2,961×10 ⁻⁷	1,051×10 ⁻¹⁰	-1,395×10 ⁻¹⁴
3	25,721	1,675×10 ⁻¹	-4,301×10 ⁻⁴	5,153×10 ⁻⁷	-2,455×10 ⁻¹⁰	3,975×10 ⁻¹⁴
4	306,241	-3,252×10 ⁻²	2,848×10 ⁻⁴	-3,026×10 ⁻⁷	1,187×10 ⁻¹⁰	-1,622×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.26 – Coeficientes do ajuste do WSGG para CO₂ e pressão total de 2 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,152	2,496×10 ⁻¹	7,873×10 ⁻⁵	-2,201×10 ⁻⁷	1,141×10 ⁻¹⁰	-1,958×10 ⁻¹⁴
2	1,964	-4,258×10 ⁻²	3,667×10 ⁻⁴	-3,565×10 ⁻⁷	1,380×10 ⁻¹⁰	-1,948×10 ⁻¹⁴
3	13,871	1,571×10 ⁻¹	-3,836×10 ⁻⁴	4,685×10 ⁻⁷	-2,261×10 ⁻¹⁰	3,683×10 ⁻¹⁴
4	262,261	-2,221×10 ⁻²	2,605×10 ⁻⁴	-2,773×10 ⁻⁷	1,074×10 ⁻¹⁰	-1,445×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.27 – Coeficientes do ajuste do WSGG para CO₂ e pressão total de 5 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,074	3,767×10 ⁻¹	-4,784×10 ⁻⁴	4,818×10 ⁻⁷	-2,161×10 ⁻¹⁰	3,318×10 ⁻¹⁴
2	0,784	1,995×10 ⁻²	4,168×10 ⁻⁴	-5,063×10 ⁻⁷	2,208×10 ⁻¹⁰	-3,349×10 ⁻¹⁴
3	7,477	1,287×10 ⁻¹	-2,517×10 ⁻⁴	3,336×10 ⁻⁷	-1,696×10 ⁻¹⁰	2,832×10 ⁻¹⁴
4	192,619	6,698×10 ⁻³	1,926×10 ⁻⁴	-2,067×10 ⁻⁷	7,596×10 ⁻¹¹	-9,518×10 ⁻¹⁵

Tabela 5.28 – Coeficientes do ajuste do WSGG para CO₂ e pressão total de 10 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,042	$5,328 \times 10^{-1}$	$-1,197 \times 10^{-3}$	$1,401 \times 10^{-6}$	$-6,507 \times 10^{-10}$	$1,027 \times 10^{-13}$
2	0,361	$1,197 \times 10^{-1}$	$4,352 \times 10^{-4}$	$-6,511 \times 10^{-7}$	$3,061 \times 10^{-10}$	$-4,823 \times 10^{-14}$
3	4,910	$9,062 \times 10^{-2}$	$-5,603 \times 10^{-5}$	$1,266 \times 10^{-7}$	$-8,149 \times 10^{-11}$	$1,497 \times 10^{-14}$
4	142,257	$4,824 \times 10^{-2}$	$9,620 \times 10^{-5}$	$-1,064 \times 10^{-7}$	$3,133 \times 10^{-11}$	$-2,523 \times 10^{-15}$

Tabela 5.29 – Coeficientes do ajuste do WSGG para CO₂ e pressão total de 20 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,024	$6,362 \times 10^{-1}$	$-1,844 \times 10^{-3}$	$2,300 \times 10^{-6}$	$-1,086 \times 10^{-9}$	$1,729 \times 10^{-13}$
2	0,160	$3,022 \times 10^{-1}$	$2,283 \times 10^{-4}$	$-5,479 \times 10^{-7}$	$2,796 \times 10^{-10}$	$-4,537 \times 10^{-14}$
3	3,276	$4,918 \times 10^{-2}$	$2,440 \times 10^{-4}$	$-2,207 \times 10^{-7}$	$7,174 \times 10^{-11}$	$-8,554 \times 10^{-15}$
4	100,766	$1,064 \times 10^{-1}$	$-3,410 \times 10^{-5}$	$2,910 \times 10^{-8}$	$-2,878 \times 10^{-11}$	$6,858 \times 10^{-15}$

Tabela 5.30 – Coeficientes do ajuste do WSGG para CO₂ e pressão total de 40 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,014	$7,800 \times 10^{-3}$	$1,550 \times 10^{-5}$	$3,406 \times 10^{-7}$	$-2,217 \times 10^{-10}$	$3,762 \times 10^{-14}$
2	0,069	$5,998 \times 10^{-1}$	$-1,161 \times 10^{-3}$	$1,230 \times 10^{-6}$	$-5,624 \times 10^{-10}$	$8,965 \times 10^{-14}$
3	2,202	$1,050 \times 10^{-1}$	$4,790 \times 10^{-4}$	$-6,485 \times 10^{-7}$	$2,865 \times 10^{-10}$	$-4,299 \times 10^{-14}$
4	69,567	$1,231 \times 10^{-1}$	$-4,450 \times 10^{-5}$	$3,930 \times 10^{-8}$	$-3,242 \times 10^{-11}$	$7,182 \times 10^{-15}$

Conforme mostram as tabelas, os coeficientes $\kappa_{p,j}$ obtidos através do ajuste possuem valores mais próximos dos obtidos através do WSGG se comparados com os $b_{j,k}$, que apresentam diferenças mais significativas. Isso já era esperado devido ao índice de correlação dos ajustes ter sido superior para os coeficientes $\kappa_{p,j}$. Entretanto, como já foi discutido anteriormente, essa diferença nos coeficientes $b_{j,k}$ ajustados não possui um grande impacto na qualidade dos resultados das emitâncias totais, como pode ser visto nas Figuras 5.17, 5.18 e 5.19, que comparam os resultados de emitância total do CO₂ utilizando os métodos LBL, WSGG e o ajuste do WSGG. Os resultados mostram que os valores de emitância obtidos através do WSGG e do ajuste ficaram próximos para a maioria dos valores de pressão testados, exceto para a pressão de 1 atm e para alguns valores de YS das pressões 5 e 40 atm.

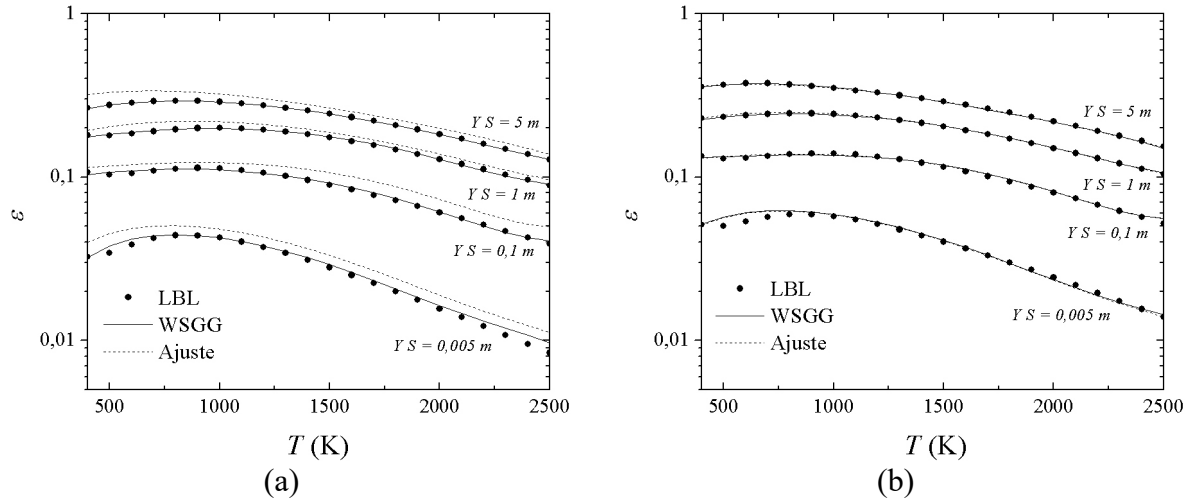


Figura 5.17 – Comparação entre as emitâncias totais do CO₂ obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.

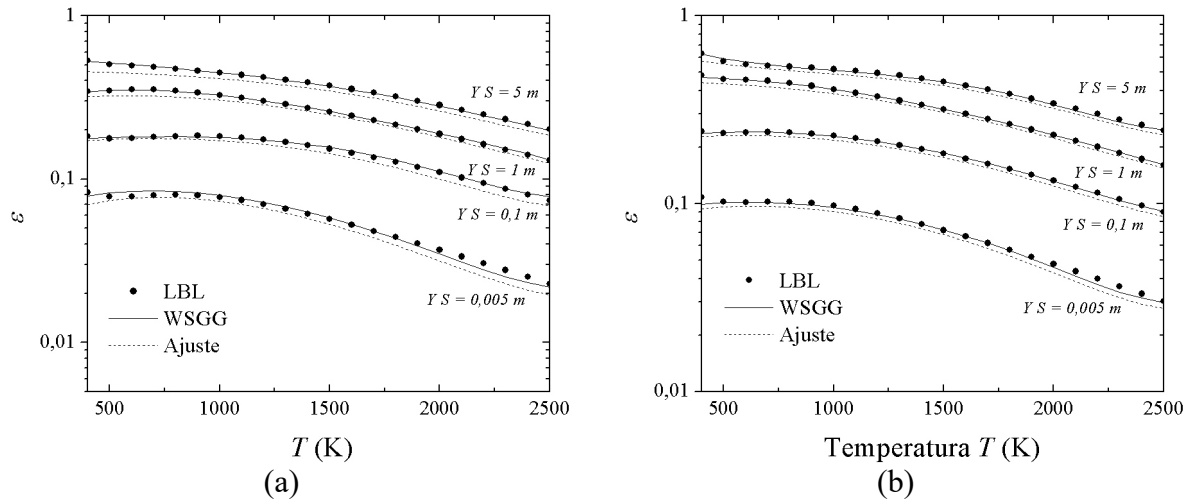


Figura 5.18 – Comparação entre as emitâncias totais do CO₂ obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.

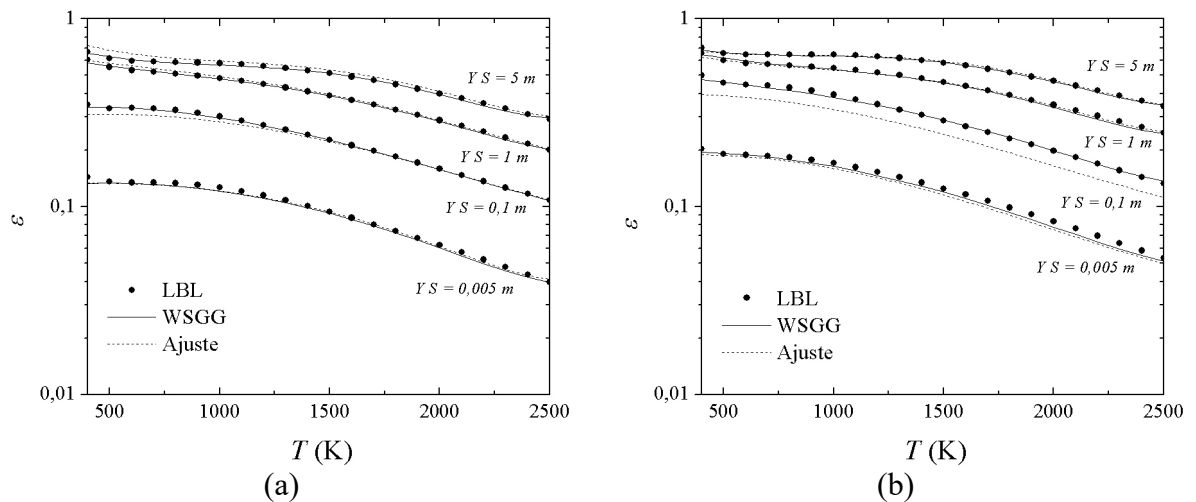


Figura 5.19 – Comparação entre as emitâncias totais do CO₂ obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 20 atm; (b) 40 atm.

De forma análoga ao CO₂, utilizando os ajustes de curva dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ do H₂O para as pressões de 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm, é possível obter os coeficientes do ajuste do WSGG, ilustrados nas Tabelas 5.31, 5.32, 5.33, 5.34, 5.35 e 5.36.

Tabela 5.31 – Coeficientes do ajuste do WSGG para H₂O e pressão total de 1 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,183	1,551×10 ⁻¹	3,170×10 ⁻⁴	-3,088×10 ⁻⁷	1,755×10 ⁻¹⁰	-3,503×10 ⁻¹⁴
2	1,361	2,972×10 ⁻²	2,922×10 ⁻⁴	-3,543×10 ⁻⁸	-5,501×10 ⁻¹¹	1,376×10 ⁻¹⁴
3	7,825	-8,717×10 ⁻³	6,682×10 ⁻⁴	-6,503×10 ⁻⁷	2,314×10 ⁻¹⁰	-2,971×10 ⁻¹⁴
4	75,347	2,679×10 ⁻¹	-2,771×10 ⁻⁴	6,546×10 ⁻⁸	1,500×10 ⁻¹¹	-5,549×10 ⁻¹⁵

Tabela 5.32 – Coeficientes do ajuste do WSGG para H₂O e pressão total de 2 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,109	2,113×10 ⁻¹	1,068×10 ⁻⁴	-7,986×10 ⁻⁸	7,140×10 ⁻¹¹	-1,834×10 ⁻¹⁴
2	0,768	2,552×10 ⁻²	3,492×10 ⁻⁴	-1,313×10 ⁻⁷	2,140×10 ⁻¹²	3,105×10 ⁻¹⁵
3	4,905	-1,783×10 ⁻²	6,563×10 ⁻⁴	-5,815×10 ⁻⁷	1,861×10 ⁻¹⁰	-2,133×10 ⁻¹⁴
4	47,471	2,836×10 ⁻¹	-2,447×10 ⁻⁴	8,120×10 ⁻¹⁰	4,841×10 ⁻¹¹	-1,106×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.33 – Coeficientes do ajuste do WSGG para H₂O e pressão total de 5 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,056	3,644×10 ⁻¹	-4,687×10 ⁻⁴	5,478×10 ⁻⁷	-2,145×10 ⁻¹⁰	2,755×10 ⁻¹⁴
2	0,430	1,778×10 ⁻²	4,946×10 ⁻⁴	-3,844×10 ⁻⁷	1,553×10 ⁻¹⁰	-2,563×10 ⁻¹⁴
3	3,145	-4,445×10 ⁻²	6,272×10 ⁻⁴	-3,953×10 ⁻⁷	6,320×10 ⁻¹¹	1,435×10 ⁻¹⁵
4	30,770	3,272×10 ⁻¹	-1,530×10 ⁻⁴	-1,794×10 ⁻⁷	1,411×10 ⁻¹⁰	-2,629×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.34 – Coeficientes do ajuste do WSGG para H₂O e pressão total de 10 atm.

j	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,034	5,673×10 ⁻¹	-1,243×10 ⁻³	1,396×10 ⁻⁶	-6,030×10 ⁻¹⁰	9,021×10 ⁻¹⁴
2	0,290	2,112×10 ⁻²	6,521×10 ⁻⁴	-6,919×10 ⁻⁷	3,495×10 ⁻¹⁰	-6,277×10 ⁻¹⁴
3	2,334	-8,642×10 ⁻²	6,001×10 ⁻⁴	-1,527×10 ⁻⁷	-9,890×10 ⁻¹¹	3,149×10 ⁻¹⁴
4	23,036	3,882×10 ⁻¹	-1,863×10 ⁻⁵	-4,341×10 ⁻⁷	2,701×10 ⁻¹⁰	-4,734×10 ⁻¹⁴

Tabela 5.35 – Coeficientes do ajuste do WSGG para H₂O e pressão total de 20 atm.

J	$\kappa_{p,j}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,021	$7,774 \times 10^{-1}$	$-2,100 \times 10^{-3}$	$2,352 \times 10^{-6}$	$-1,050 \times 10^{-9}$	$1,636 \times 10^{-13}$
2	0,198	$8,870 \times 10^{-2}$	$6,488 \times 10^{-4}$	$-8,779 \times 10^{-7}$	$5,092 \times 10^{-10}$	$-9,673 \times 10^{-14}$
3	1,754	$-1,613 \times 10^{-1}$	$6,271 \times 10^{-4}$	$7,890 \times 10^{-8}$	$-2,626 \times 10^{-10}$	$6,202 \times 10^{-14}$
4	17,464	$4,664 \times 10^{-1}$	$1,804 \times 10^{-4}$	$-7,720 \times 10^{-7}$	$4,332 \times 10^{-10}$	$-7,314 \times 10^{-14}$

Tabela 5.36 – Coeficientes do ajuste do WSGG para H₂O e pressão total de 40 atm.

j	$\kappa_{p,i}$ (atm m) ⁻¹	$b_{j,1}$	$b_{j,2}$ (K ⁻¹)	$b_{j,3}$ (K ⁻²)	$b_{j,4}$ (K ⁻³)	$b_{j,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,013	$4,149 \times 10^{-1}$	$-1,047 \times 10^{-3}$	$1,299 \times 10^{-6}$	$-6,240 \times 10^{-10}$	$1,030 \times 10^{-13}$
2	0,136	$4,675 \times 10^{-1}$	$-6,310 \times 10^{-4}$	$4,661 \times 10^{-7}$	$-8,640 \times 10^{-11}$	$-3,370 \times 10^{-15}$
3	1,326	$-2,751 \times 10^{-1}$	$1,005 \times 10^{-3}$	$-4,725 \times 10^{-7}$	$5,200 \times 10^{-11}$	$4,760 \times 10^{-15}$
4	13,317	$4,482 \times 10^{-1}$	$2,998 \times 10^{-4}$	$-7,620 \times 10^{-7}$	$-3,789 \times 10^{-10}$	$-5,958 \times 10^{-14}$

Novamente, observa-se que para o H₂O os coeficientes $\kappa_{p,j}$ ajustados ficaram mais próximos dos originais que os $b_{j,k}$ ajustados. A comparação entre os resultados de emitância total do H₂O obtidos pelos métodos LBL, WSGG e o ajuste do WSGG pode ser visualizada nas Figuras 5.20, 5.21 e 5.22.

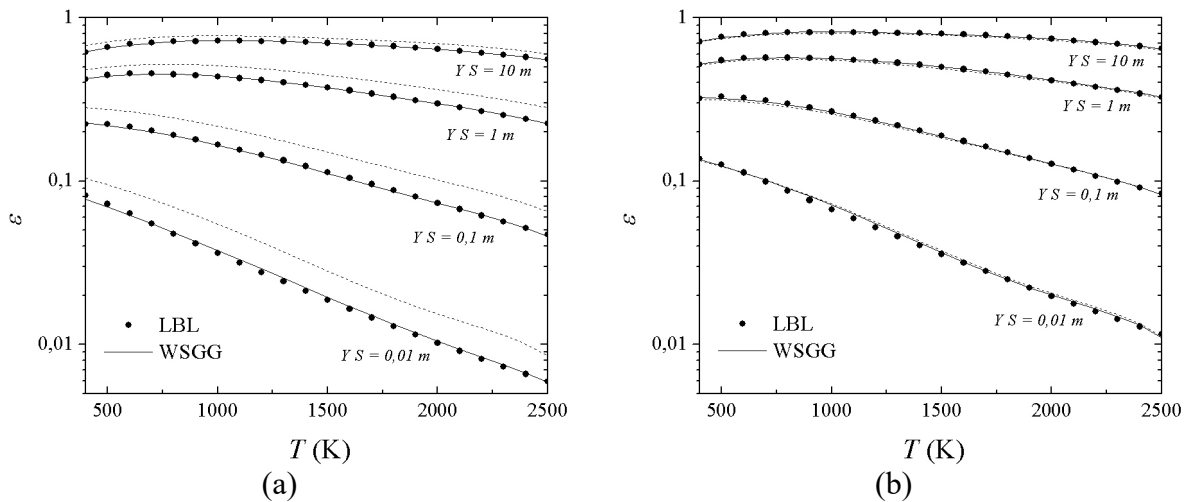


Figura 5.20 – Comparação entre as emitâncias totais do H₂O obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 1 atm; (b) 2 atm.

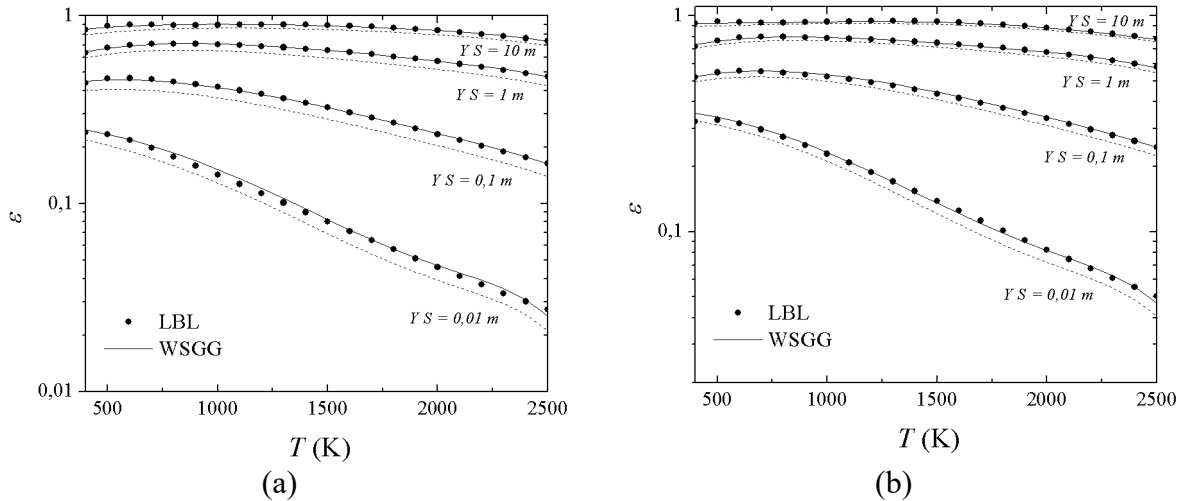


Figura 5.21 – Comparação entre as emitâncias totais do H_2O obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 5 atm; (b) 10 atm.

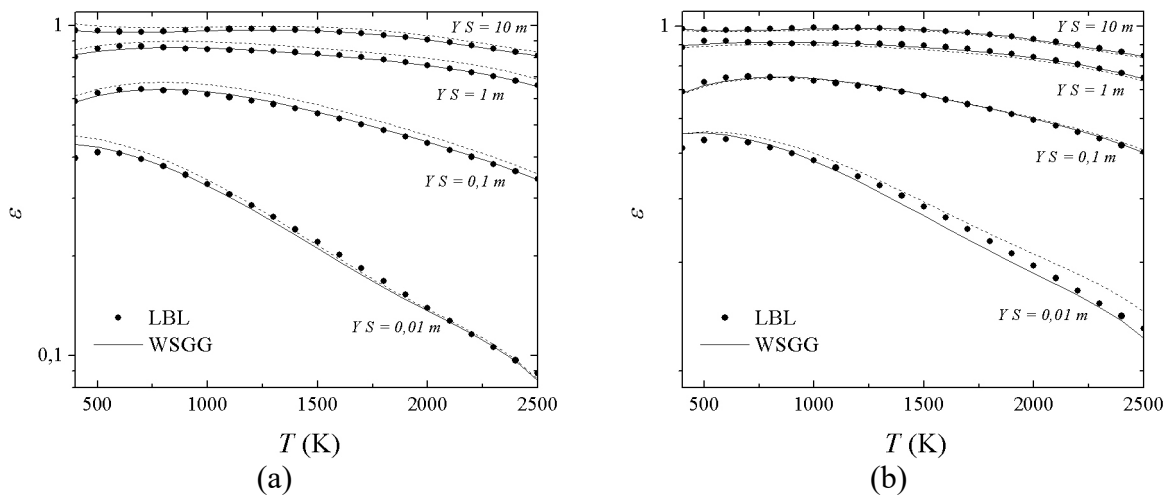


Figura 5.22 – Comparação entre as emitâncias totais do H_2O obtidas através dos métodos LBL, WSGG e ajuste do WSGG para pressões totais de: (a) 20atm; (b) 40 atm.

Os resultados de emitância total para o H_2O também mostram que os valores obtidos através do WSGG e do ajuste ficaram próximos para a maioria valores de pressão testados, com exceção da pressão de 1 atm e de alguns valores de YS para as pressões de 5 e 10 atm. Apesar de o ajuste não apresentar grandes desvios na emitância total para a maioria dos casos e para ambos CO_2 e H_2O , é possível que estes desvios no ajuste das emitâncias aumentem de forma significativa os desvios na solução da RTE, tendo em vista que até mesmo a aplicação do WSGG pode gerar desvios significativos para alguns casos, mesmo possuindo desvios muito pequenos no ajuste da emitância.

6 RESULTADOS DE FLUXO DE CALOR E TERMO FONTE RADIATIVO

6.1 Efeito da pressão total nos resultados do método LBL

Primeiramente, analisa-se o efeito da pressão total nos resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo obtidos através do método LBL para ambos CO_2 e H_2O e para todos os perfis de temperatura estudados. As Figuras 6.1, 6.2 e 6.3 ilustram os efeitos da pressão na solução LBL do CO_2 para os Perfis 1, 2 e 3, respectivamente.

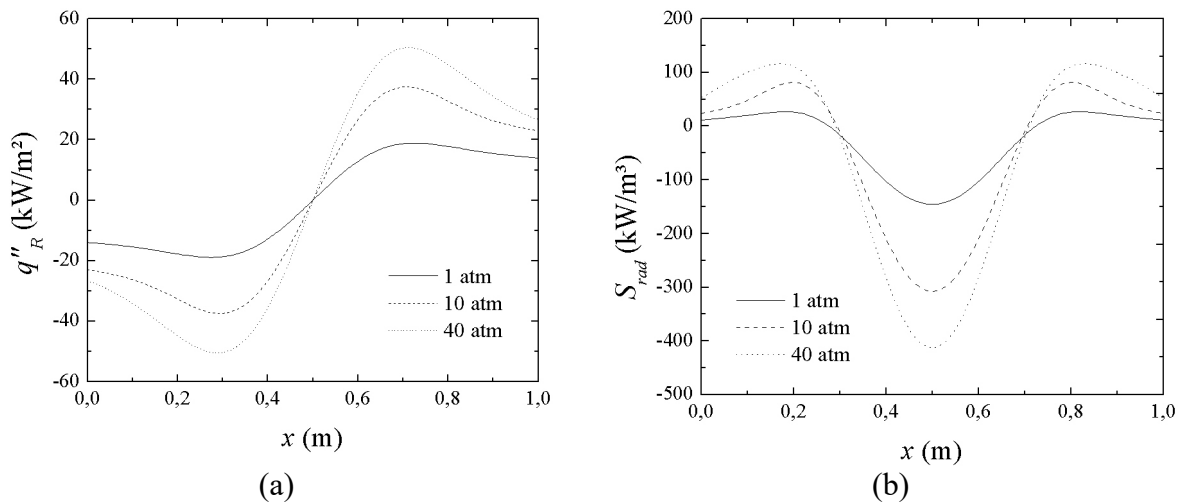


Figura 6.1 – Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 1 para CO_2 : (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

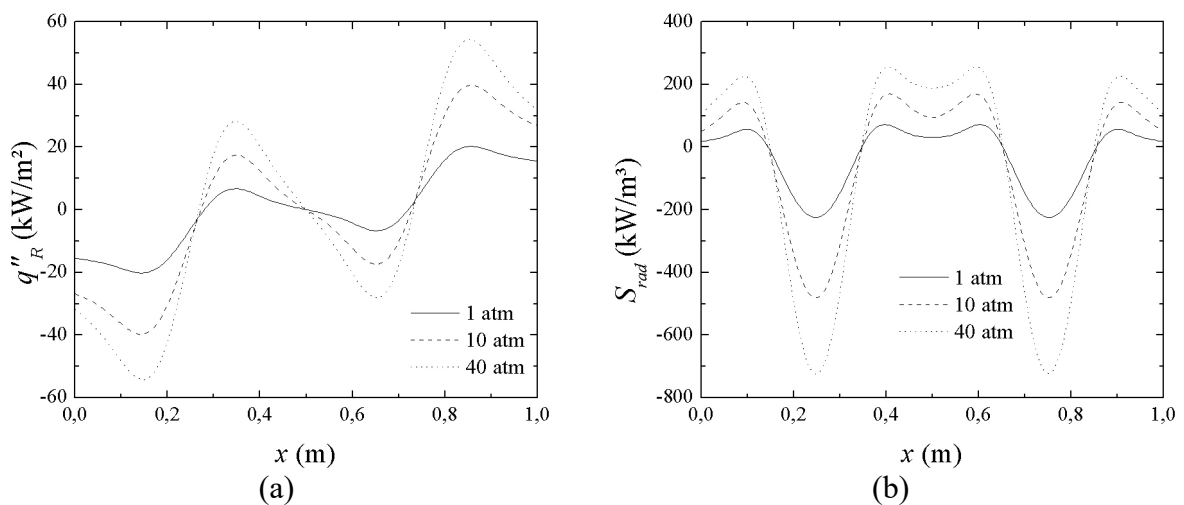


Figura 6.2 – Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 2 para CO_2 : (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

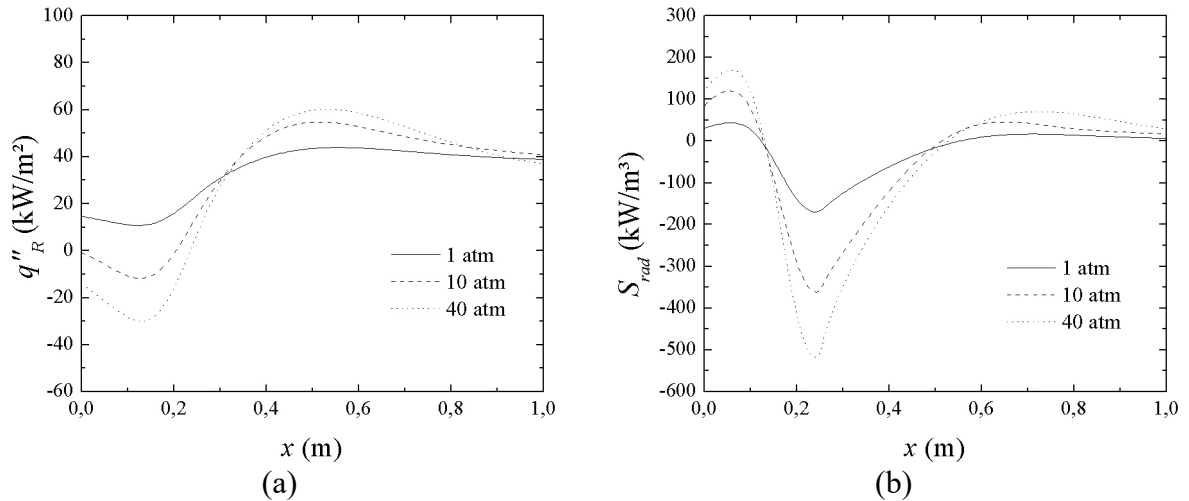


Figura 6.3 – Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 3 para CO₂: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

De acordo com as figuras apresentadas, o efeito da pressão total é mais acentuado nos resultados do termo fonte radiativo, ilustrados nas Figuras 6.1(b), 6.2(b) e 6.3(b). Além disso, dentre estes, destaca-se o Perfil 2, que possui efeito mais significativo próximo de $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m.

A mesma análise é feita para os efeitos da pressão na solução LBL do H₂O para os Perfis 1, 2 e 3, conforme as Figuras 6.4, 6.5 e 6.6, respectivamente. Analisando os resultados, nota-se que o efeito da pressão no H₂O é ainda mais significativo que no CO₂ para ambos fluxo de calor e termo fonte radiativo e para todos os perfis analisados. Para o H₂O o efeito também parece ser mais acentuado nos resultados de termo fonte, principalmente no Perfil 2.

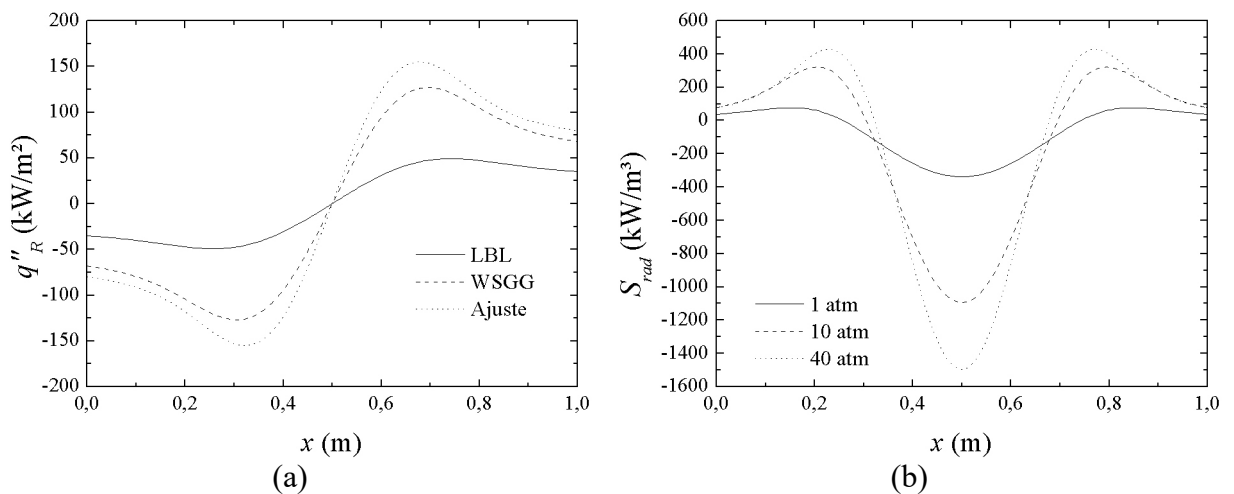


Figura 6.4 – Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 1 para H₂O: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

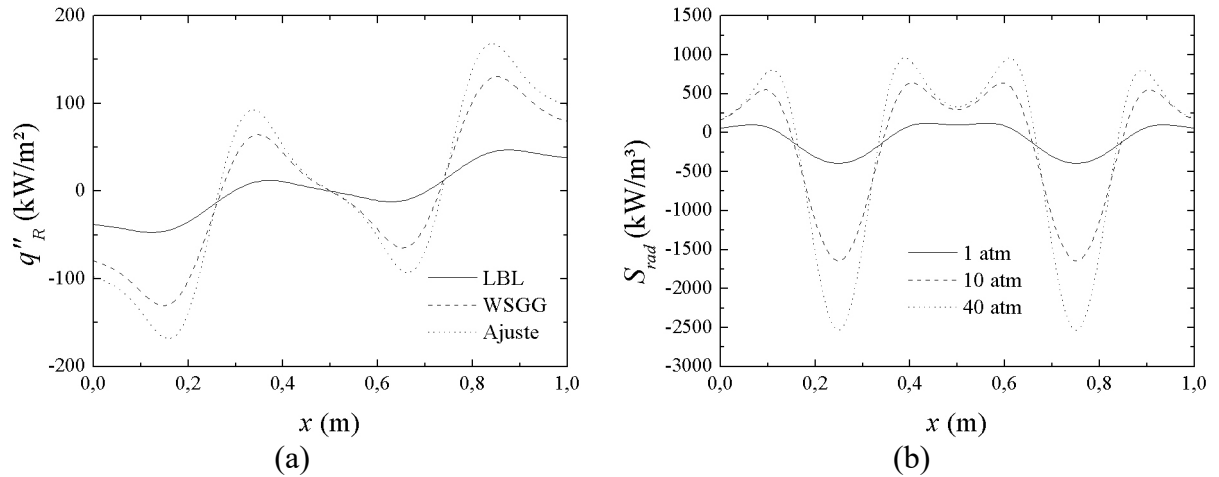


Figura 6.5 – Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 2 para H₂O: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

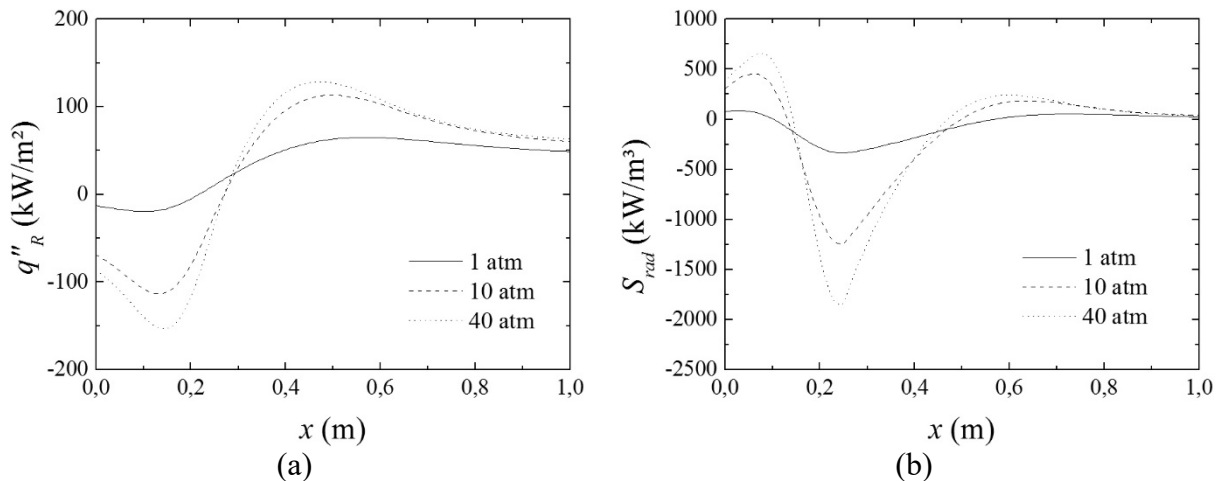


Figura 6.6 – Efeito da pressão total nos resultados do método LBL utilizando o Perfil 3 para H₂O: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

O efeito da pressão no fluxo de calor e no termo fonte radiativo se comporta de forma proporcional ao valor dos mesmos, sendo maior nos valores de pico e vale. Além disso, o efeito da pressão parece reduzir conforme a pressão aumenta, principalmente para o H₂O, sendo que o efeito de 1 a 10 atm é maior que o de 10 a 40 atm.

Analisando-se o comportamento do fluxo de calor e do termo fonte radiativo nas Figuras 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5 e 6.6, observa-se que o fluxo comporta-se da forma esperada, sendo proporcional ao negativo do gradiente de temperatura e resultando nos fluxos nulos nas posições de máximos e mínimos de temperatura, conforme pode ser observado nos Perfis 1, 2 e 3 na Figuras 4.4. Sendo assim, o fluxo de calor apresenta máximos e mínimos onde ocorrem os maiores gradientes de temperatura dos perfis. Um comportamento semelhante a este

também é observado no termo fonte radiativo, sendo que de acordo com as Equações (3.3) e (3.4) o termo fonte equivale ao negativo do gradiente do fluxo ao longo do gás participante, resultando no termo fonte possuir máximos e mínimos nas regiões onde ocorrem os maiores gradientes do fluxo e no termo fonte ser nulo para os casos em que o fluxo assume valores máximos ou mínimos.

6.2 Resultados do WSGG e do ajuste do WSGG para o CO₂

Os resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo obtidos através do ajuste do WSGG apresentam desvios com relação ao WSGG e ao LBL que variam com o aumento da pressão, sendo que o comportamento destes desvios varia em função da espécie química analisada e do perfil de temperaturas. As Figuras 6.7, 6.8 e 6.9 mostram uma comparação entre os resultados de fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo do CO₂ para o Perfil 1 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm, respectivamente.

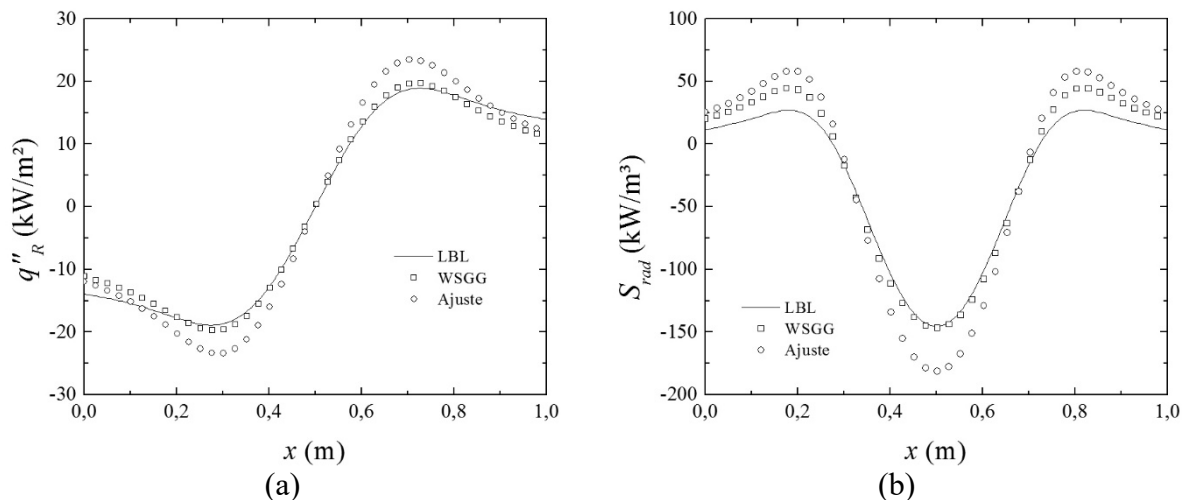


Figura 6.7 – Comparação entre os resultados do Perfil 1, para CO₂ a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

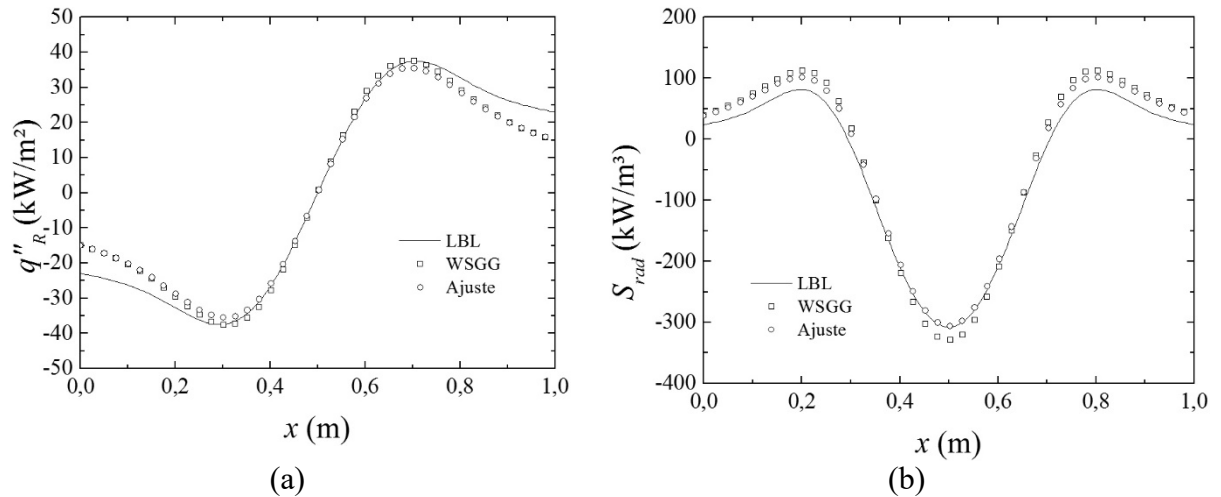


Figura 6.8 – Comparação entre os resultados do Perfil 1, para CO₂ a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG, e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

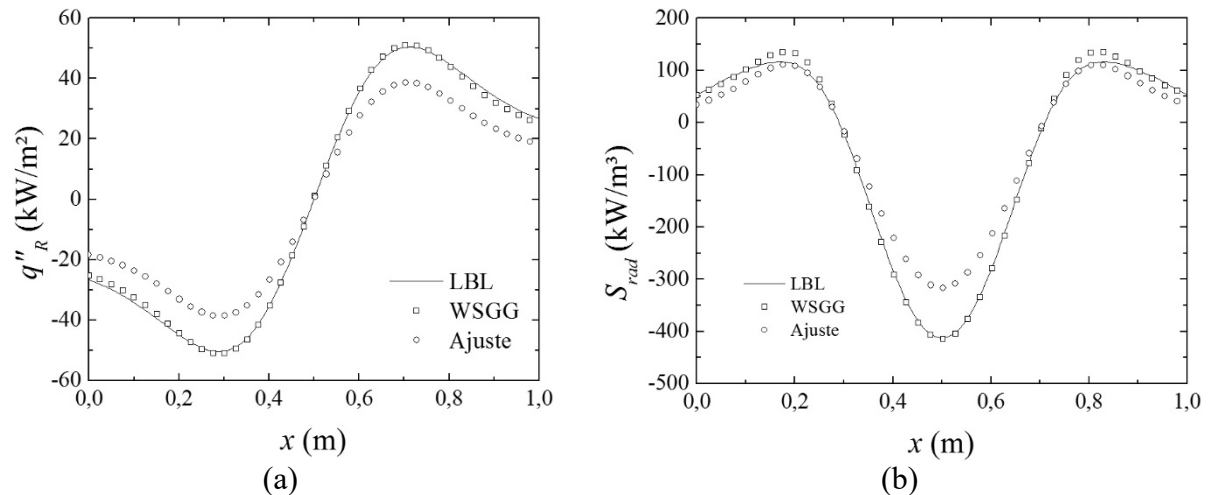


Figura 6.9 – Comparação entre os resultados do Perfil 1, para CO₂ a 40atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

As Figuras 6.7(a) e 6.8(a) mostram que o fluxo de calor radiativo para as pressões de 1 e 10 atm obtidos através do WSGG apresentam desvios maiores próximos da parede, que tendem a diminuir com o aumento da pressão. As figuras também mostram que os desvios do ajuste com relação ao LBL variam em função da pressão, sendo menores para a pressão de 10 atm e maiores para pressões de 1 e 40 atm. Os valores dos desvios máximo e médio do fluxo de calor e termo fonte radiativo obtidos através do WSGG e do ajuste do WSGG para as pressões de 1, 10 e 40 atm estão apresentados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 – Desvios percentuais do fluxo de calor e termo fonte radiativo para CO₂ com o Perfil 1 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

Pressão total (atm)	WSGG				Ajuste do WSGG			
	q_R''		S_R		q_R''		S_R	
	$\delta_{max}(\%)$	$\delta_{med}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{med}(\%)$	$\delta_{max}(\%)$	$\delta_{med}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{med}(\%)$
1	14,83	5,08	12,11	6,34	25,21	12,81	24,73	15,93
10	21,36	8,23	11,39	7,33	21,18	8,65	7,29	5,13
40	3,59	1,69	5,10	1,73	23,56	19,90	23,17	7,52

Os valores presentes na tabela mostram que os desvios médios para o WSGG são maiores na pressão de 10 atm e menores na pressão de 40 atm. Para o ajuste os desvios médios são menores na pressão de 10 atm e maiores na pressão de 40 atm, conforme mostram as Figuras 6.8 e 6.9.

Para o Perfil 2, a comparação entre os resultados de fluxo de calor radiativo e termo fonte radiativo do CO₂ de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm está presente nas Figuras 6.10, 6.11 e 6.12, respectivamente.

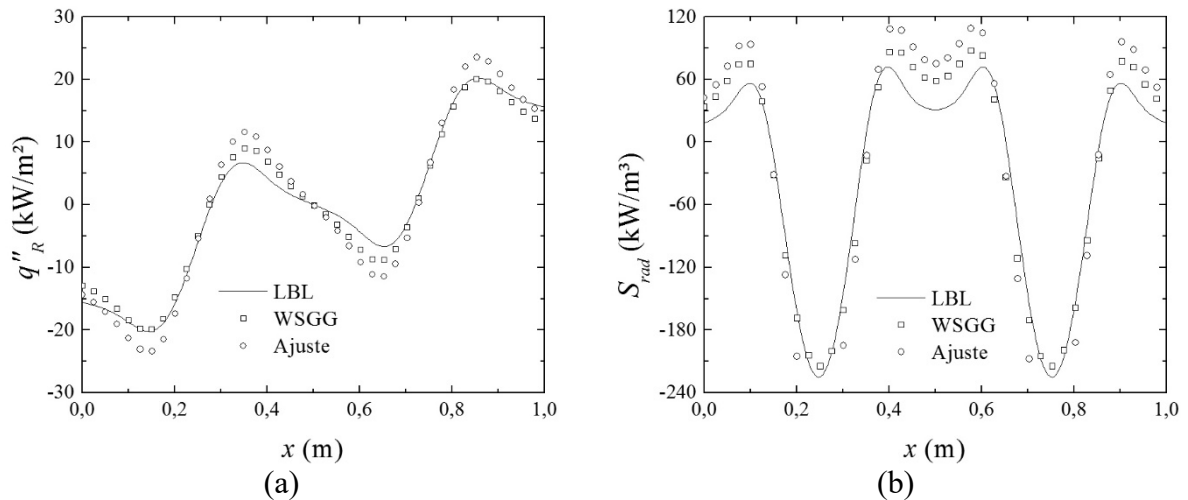


Figura 6.10 – Comparação entre os resultados do Perfil 2, para CO₂ a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

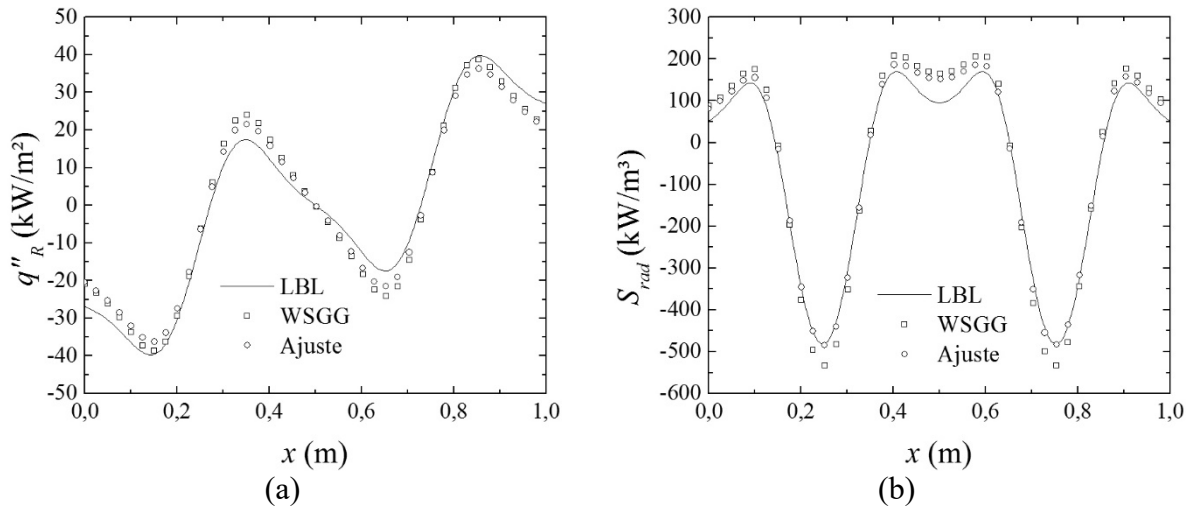


Figura 6.11 – Comparação entre os resultados do Perfil 2, para CO₂ a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

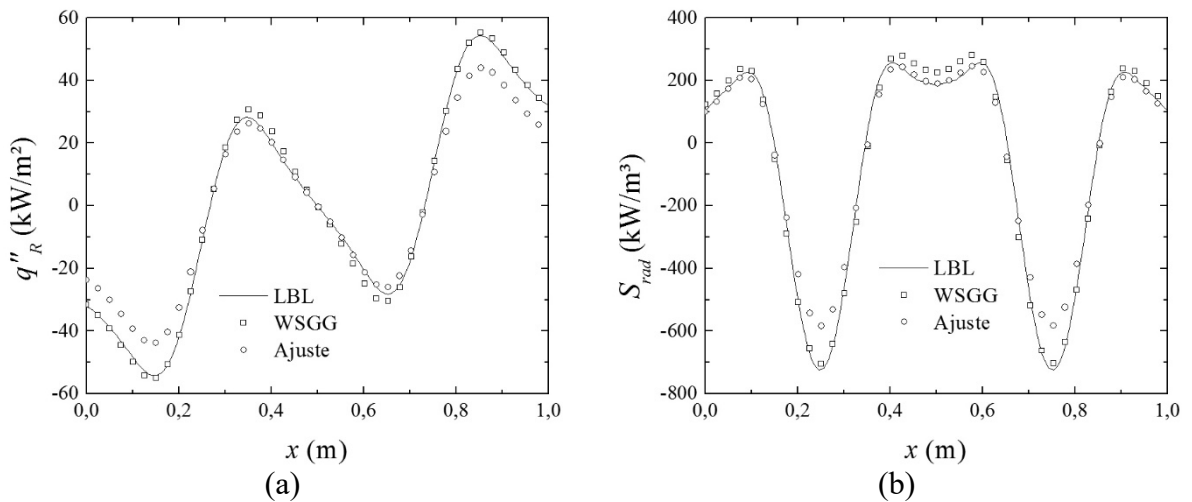


Figura 6.12 – Comparação entre os resultados do Perfil 2, para CO₂ a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

Novamente, de acordo com as Figuras 6.10, 6.11 e 6.12, os desvios do fluxo e do termo fonte radiativo obtidos pelo WSGG parece reduzir conforme a pressão aumenta enquanto o ajuste apresenta desvios elevados para as pressões de 1 e 40 atm, apresentando melhores resultados para a pressão intermediária de 10 atm. Esse comportamento se comprova na Tabela 6.2, que mostra os desvios para o fluxo de calor e termo fonte radiativo para o Perfil 2.

Tabela 6.2 – Desvios percentuais do fluxo de calor e termo fonte radiativo para CO₂ com o Perfil 2 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

Pressão total (atm)	WSGG				Ajuste do WSGG			
	q_R''		S_R		q_R''		S_R	
	$\delta_{max}(\%)$	$\delta_{med}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{med}(\%)$	$\delta_{max}(\%)$	$\delta_{med}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{med}(\%)$
1	13,92	6,07	15,31	7,98	25,49	11,48	23,63	16,28
10	16,74	8,94	14,53	7,84	16,28	8,97	11,62	3,90
40	7,51	2,20	8,29	3,59	19,42	9,02	19,39	5,43

A tabela mostra que o desvio médio do WSGG é mínimo para a maior pressão de 40 atm enquanto o do ajuste é mínimo para a pressão de 10 atm, sendo que este efeito também está presente nos resultados do Perfil 3, conforme mostram as Figuras 6.13, 6.14 e 6.15, para as pressões de 1, 10 e 40 atm, respectivamente.

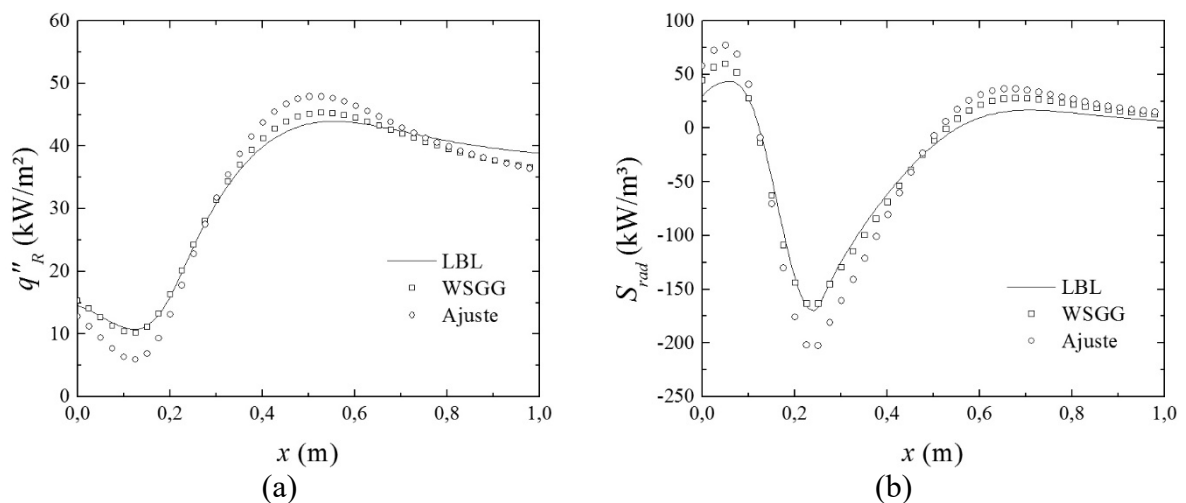


Figura 6.13 – Comparação entre os resultados do Perfil 3, para CO₂ a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

Para este perfil, no entanto, os desvios parecem ser mais reduzidos para o WSGG, sendo que o maior desvio médio é da ordem de 5%, conforme mostra a Tabela 6.3, que ilustra os resultados dos desvios do Perfil 3 para todas as pressões analisadas. A tabela mostra que os menores desvios são para 40 atm para o WSGG e 10 atm para o ajuste, de forma semelhante aos outros perfis.

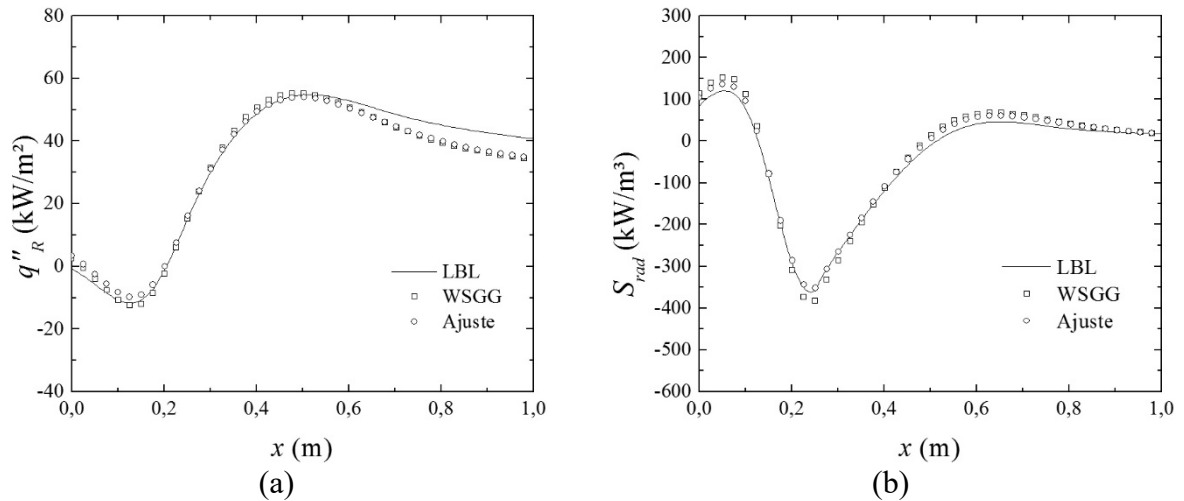


Figura 6.14 – Comparação entre os resultados do Perfil 3, para CO₂ a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

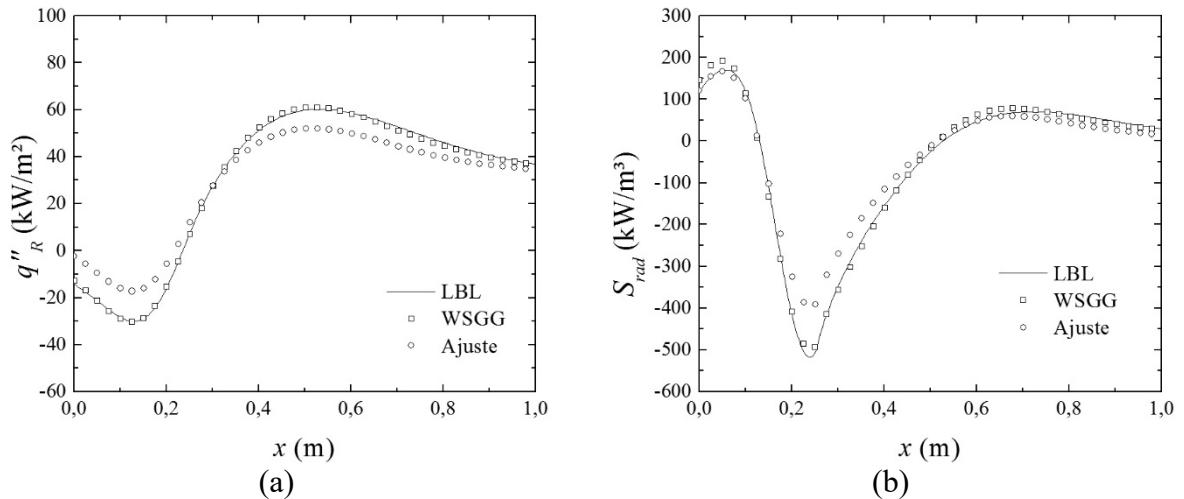


Figura 6.15 – Comparação entre os resultados do Perfil 3, para CO₂ a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

Tabela 6.3 – Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para CO₂ com o Perfil 3 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

Pressão total (atm)	WSGG				Ajuste do WSGG			
	q''_R		S_R		q''_R		S_R	
	$\delta_{max}(\%)$	$\delta_{med}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{med}(\%)$	$\delta_{max}(\%)$	$\delta_{med}(\%)$	$\zeta_{max}(\%)$	$\zeta_{med}(\%)$
1	5,67	2,21	10,25	4,71	11,02	5,69	21,94	11,58
10	12,11	5,11	10,04	4,71	11,20	5,11	5,34	2,88
40	2,78	1,24	5,81	1,89	21,30	11,93	23,29	5,59

As Figuras 6.7, 6.10 e 6.13, mostram os resultados de fluxo e de termo fonte radiativo para o CO₂ a 1atm, com $Y = 0,1$ e para os Perfis 1, 2 e 3, respectivamente. Esses resultados concordam com os obtidos por Ziemniczak, 2014, para as mesmas condições.

6.3 Resultados do WSGG e do ajuste do WSGG para o H₂O

As Figuras 6.16, 6.17 e 6.18 mostram uma comparação entre os resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo do H₂O para o Perfil 1 e pressões totais de 1, 10 e 40 atm, respectivamente.

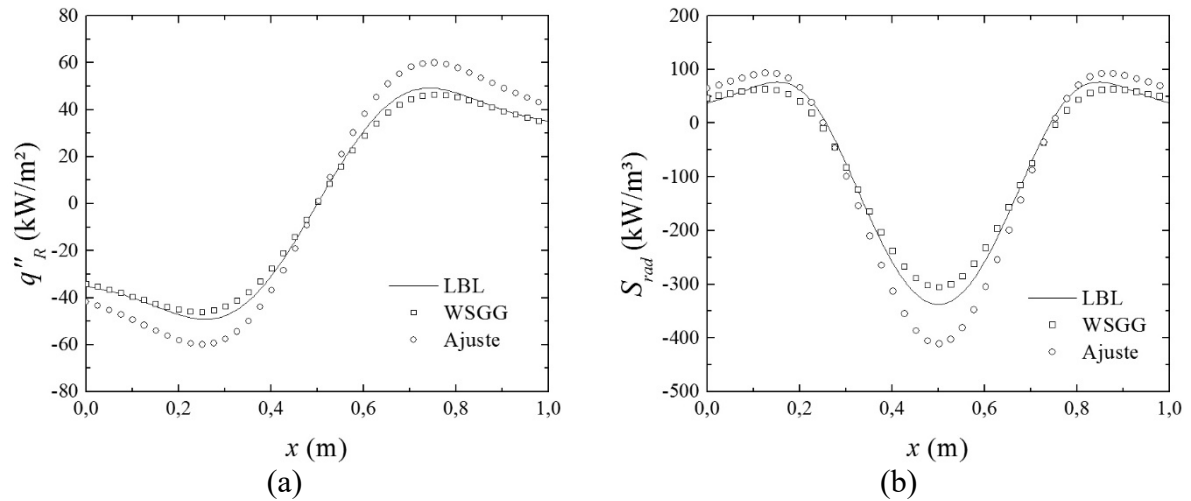


Figura 6.16 – Comparação entre os resultados do Perfil 1, para H₂O a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

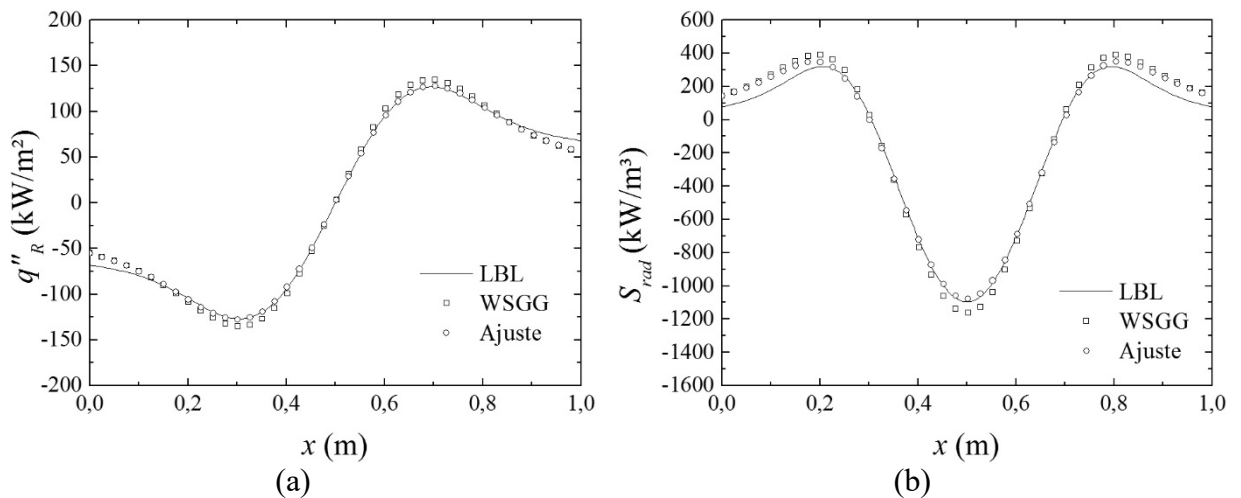


Figura 6.17 – Comparação entre os resultados do Perfil 1, para H₂O a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

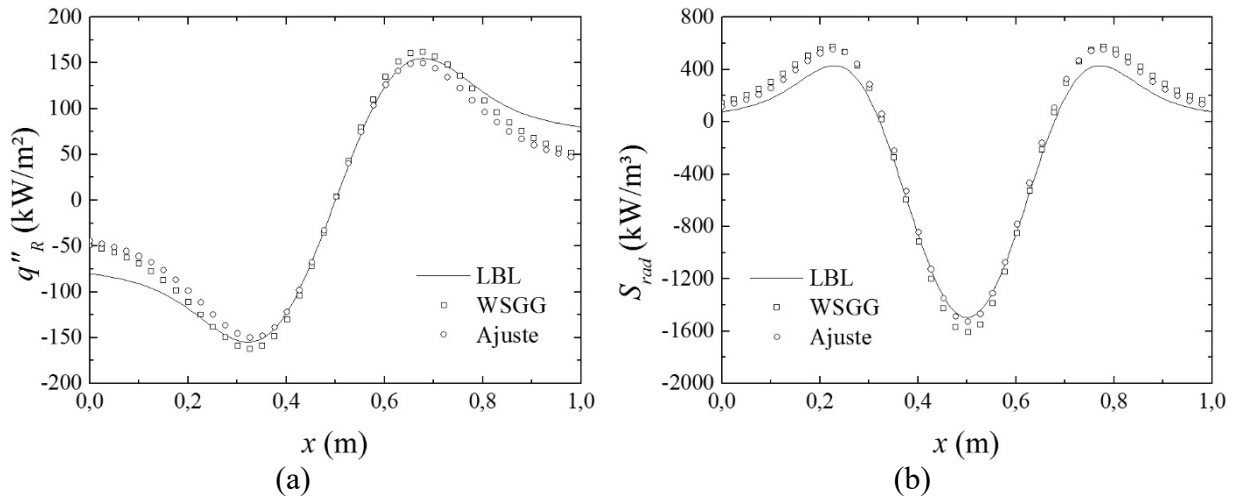


Figura 6.18 – Comparação entre os resultados do Perfil 1, para H₂O a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

Para a pressão total de 1atm, o fluxo de calor e o termo fonte radiativo obtidos através do WSGG apresentam pequenos desvios ao longo de todo o domínio, sendo que estes os desvios aumentam com o aumento da pressão. No entanto, o ajuste apresenta um comportamento diferente, sendo que os menores desvios são observados na pressão intermediária de 10 atm, de forma semelhante ao observado no CO₂. Os valores de todos os desvios máximos e médios para H₂O com o Perfil 1 estão apresentados na Tabela 6.4.

Tabela 6.4– Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para H₂O com o Perfil 1 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

Pressão total (atm)	WSGG				Ajuste do WSGG			
	q''_R		S_R		q''_R		S_R	
	δ_{max}	δ_{med}	ζ_{max}	ζ_{med}	δ_{max}	δ_{med}	ζ_{max}	ζ_{med}
1	7,56	3,85	9,26	4,44	22,13	16,69	21,91	8,92
10	10,18	4,52	8,54	5,23	9,86	2,09	7,27	3,17
40	20,07	7,60	10,40	6,49	22,92	9,93	8,28	5,10

Para o Perfil 2, os resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo do H₂O podem ser visualizados nas Figuras 6.19, 6.20 e 6.21, para as pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

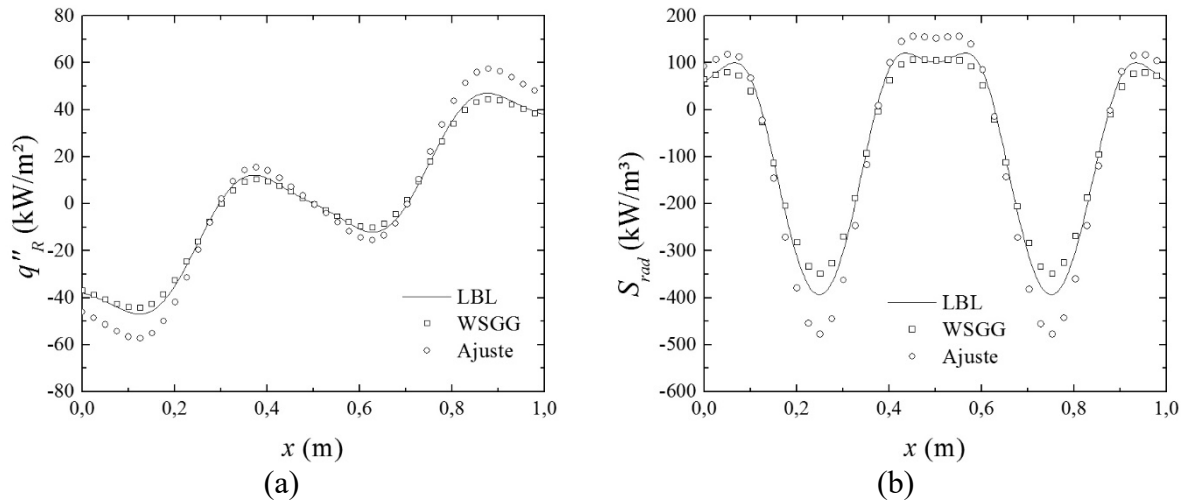


Figura 6.19 – Comparação entre os resultados do Perfil 2, para H₂O a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

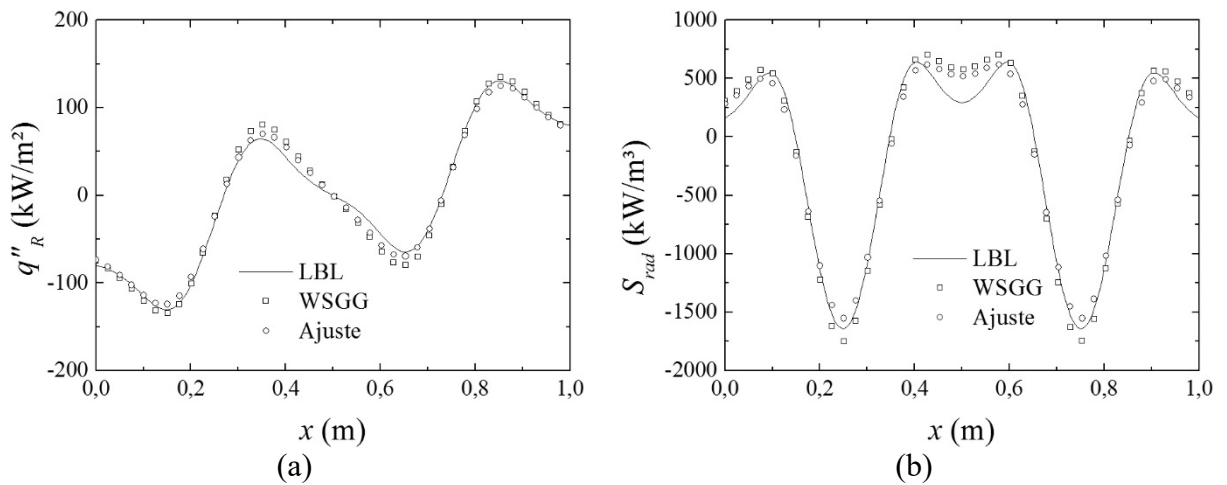


Figura 6.20 – Comparação entre os resultados do Perfil 2, para H₂O a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

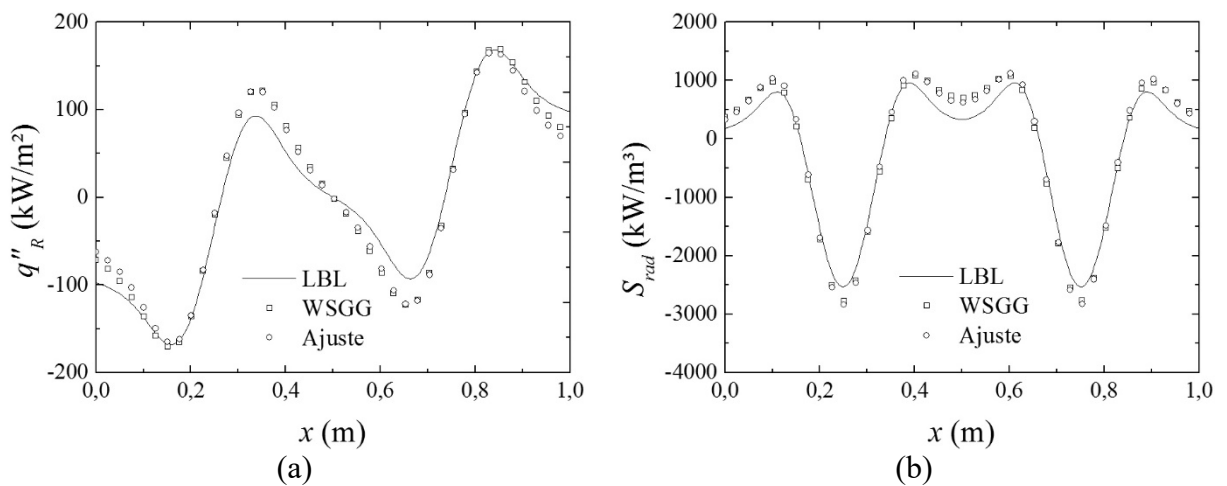


Figura 6.21 – Comparação entre os resultados do Perfil 2, para H₂O a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

De maneira semelhante ao Perfil 1, os desvios de ambas as grandezas tendem a aumentar com a pressão para o método WSG enquanto os desvios do ajuste parecem ser menores para a pressão de 10 atm. Esse comportamento concorda com o observado na Tabela 6.5, que apresenta os valores dos desvios máximos e médios para o fluxo e termo fonte radiativo.

Tabela 6.5 – Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para H₂O com o Perfil 2 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

Pressão total (atm)	WSGG				Ajuste do WSGG			
	q''_R		S_R		q''_R		S_R	
	δ_{max}	δ_{med}	ζ_{max}	ζ_{med}	δ_{max}	δ_{med}	ζ_{max}	ζ_{med}
1	6,23	2,98	11,16	5,17	22,27	11,64	21,61	10,03
10	14,29	5,98	17,09	6,59	9,44	4,01	13,72	5,60
40	19,74	14,67	14,67	7,79	20,88	10,16	12,02	7,56

Os resultados do Perfil 3 para o H₂O podem ser visualizados nas Figuras 6.22, 6.23 e 6.24, para as pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

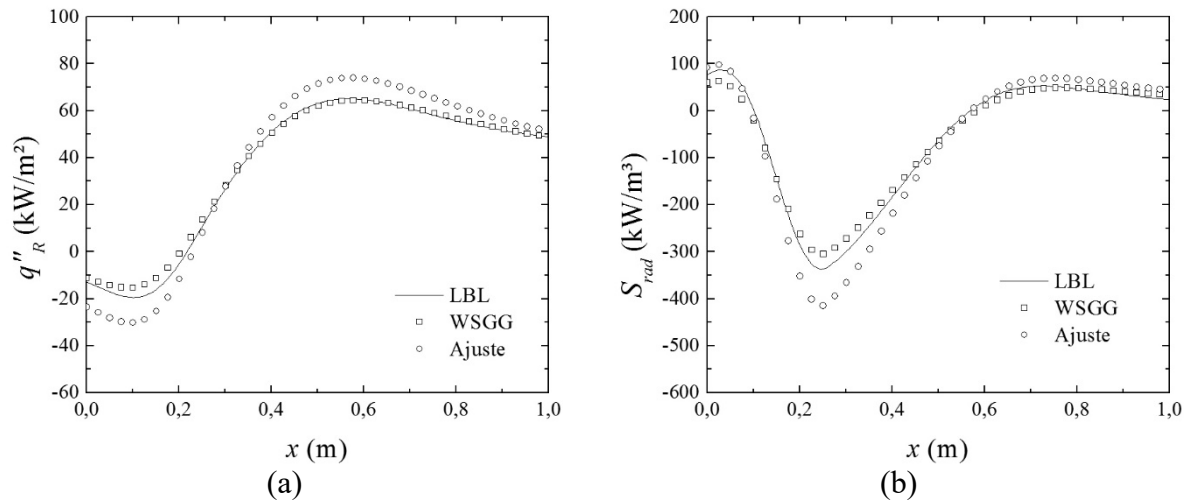


Figura 6.22 – Comparação entre os resultados do Perfil 3, para H₂O a 1 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

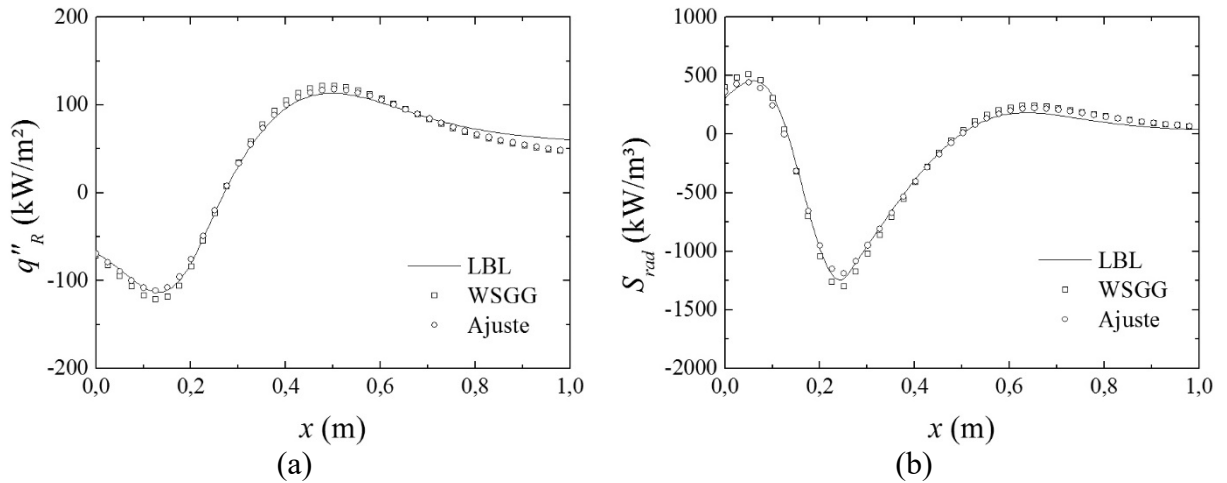


Figura 6.23 – Comparação entre os resultados do Perfil 3, para H₂O a 10 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

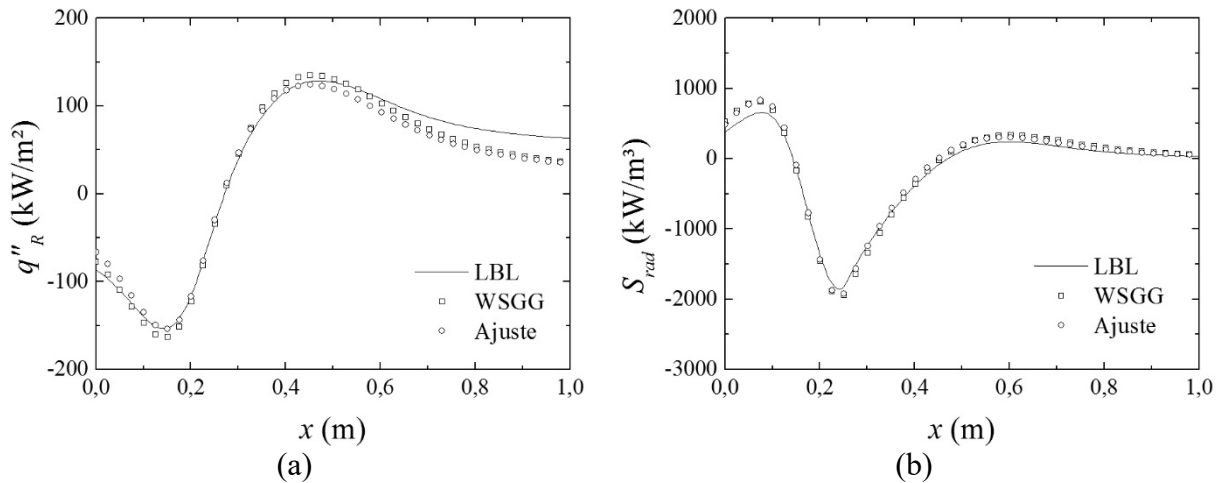


Figura 6.24 – Comparação entre os resultados do Perfil 3, para H₂O a 40 atm, obtidos através do LBL, WSGG e ajuste do WSGG: (a) fluxo de calor radiativo; (b) termo fonte radiativo.

A Figura 6.22 mostra que os desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para o Perfil 3 foram pequenos para a pressão de 1 atm, de forma semelhante aos Perfis 1 e 2, e aumentam conforme a pressão aumenta, de acordo com as Figuras 6.23 e 6.24. Por fim, os valores dos desvios máximos e médios para o Perfil 3 podem ser visualizados na Tabela 6.6, para todos os valores de pressão total analisados.

Tabela 6.6 – Desvios do fluxo de calor e termo fonte radiativo para H₂O com o Perfil 3 de temperaturas e pressões totais de 1, 10 e 40 atm.

Pressão total (atm)	WSGG				Ajuste do WSGG			
	q_R''		S_R		q_R''		S_R	
	δ_{max}	δ_{med}	ζ_{max}	ζ_{med}	δ_{max}	δ_{med}	ζ_{max}	ζ_{med}
1	7,31	2,26	9,42	3,74	17,07	10,30	23,11	8,05
10	12,54	5,80	7,76	3,73	3,62	3,62	6,74	2,61
40	17,87	7,11	9,80	3,99	8,52	8,52	9,38	3,54

Analisando as Tabelas 6.4, 6.5 e 6.6, nota-se que os desvios dos resultados do WSGG para o H₂O aumentam conforme a pressão aumenta para todos os perfis analisados. Esse efeito é justamente o contrário do observado para o CO₂ indicando que o WSGG é mais adequado para aplicações com CO₂ em alta pressão. No entanto, mesmo para os casos de 40 atm, onde os desvios são maiores, a magnitude dos desvios máximos e médios não é muito diferente dos desvios para CO₂ em pressão atmosférica, conforme mostram as Tabelas 6.1, 6.2 e 6.3, e por isso, o modelo é aplicável para ambas as espécies.

As Figuras 6.16, 6.19 e 6.22, mostram os resultados de fluxo e de termo fonte radiativo para o H₂O a 1atm, com $Y = 0,2$ e para os Perfis 1, 2 e 3, respectivamente. Esses resultados concordam com os obtidos por Ziemniczak, 2014, para as mesmas condições.

7 CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou uma metodologia de obtenção dos coeficientes do WSGG aplicável para altas pressões e foi capaz de obter novos coeficientes para CO_2 e H_2O que apresentam bons resultados de emitância total para temperaturas entre 400 e 2500 K e pressões totais de 1, 2, 5, 10, 20 e 40 atm. Além disso, os coeficientes do WSGG foram ajustados em função da pressão para generalizar o método para todo o intervalo de 1 a 40 atm. A partir dos coeficientes originais e dos coeficientes ajustados, os resultados de fluxo de calor e termo fonte radiativo foram comparados com a solução LBL, e os desvios entre as soluções foram calculados. Por fim, o efeito da pressão total foi analisado em todos os resultados citados, colaborando para o entendimento de como a pressão total atua na radiação térmica de gases participantes em alta pressão.

A obtenção dos espectros de absorção, necessária para a determinação dos coeficientes do WSGG, demonstrou o efeito da pressão total na seção transversal de absorção para ambos CO_2 e H_2O . O aumento da pressão total fez com que a amplitude da variação do valor da seção transversal ao longo do espectro reduzisse, concordando com os resultados obtidos por Pearson et al., 2014. Esse comportamento mostra que a alteração da pressão total deve alterar os valores de emitância total, do fluxo de calor radiativo e do termo fonte radiativo, pois todos são função da seção transversal de absorção. Além disso, nota-se que o efeito da pressão é maior de 1 a 10 atm que de 10 a 40 atm, concluindo-se que o efeito da pressão total reduz conforme a pressão aumenta e deve estabilizar para pressões maiores que 40 atm.

Isso também foi observado no estudo do efeito da pressão na solução LBL, pois os valores de fluxo de calor e termo fonte radiativo variam mais de 1 a 10 atm que de 10 a 40 atm. Além disso, o efeito da pressão se mostrou maior no H_2O que no CO_2 , o que é justificável, pois a molécula do H_2O apresenta um maior número de linhas espectrais. Apesar disso, o efeito da pressão verificado no fluxo de calor e no termo fonte radiativo das duas espécies foi bastante significativo.

Ao ajustar-se os coeficientes do WSGG em função da pressão observaram-se alguns efeitos interessantes. O primeiro deles é que, mesmo para curvas com índices de correlação em torno de $R^2 = 0,98$ para o ajuste de $\kappa_{p,j}$, os resultados de emitância total obtidos a partir dos coeficientes ajustados apresentaram desvios significativos. Os desvios entre os resultados de emitância do WSGG e do ajuste somente foram aceitáveis para curvas extremamente bem

ajustadas. No entanto, o mesmo não foi verificado para o ajuste dos coeficientes $b_{j,k}$ que mesmo tendo casos em que as curvas apresentam $R^2 < 0,8$, os resultados de emitância não foram significativamente afetados. Isso mostra que a emitância total calculada pelo método do WSGG é muito mais sensível aos coeficientes $\kappa_{p,j}$ que os coeficientes $b_{j,k}$. Uma possível explicação para esse fenômeno é o fato de os coeficientes $\kappa_{p,j}$ representarem uma propriedade radiativa enquanto os coeficientes $b_{j,k}$ representam apenas o ajuste polinomial dos fatores de ponderação do WSGG. Além disso, o simples fato de o ajuste dos coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ ter sido bem sucedido, já é um grande avanço no estudo do desenvolvimento de novos coeficientes do WSGG para altas pressões.

Outro resultado interessante foi o efeito da pressão nos desvios das soluções de fluxo de calor e termo fonte radiativo do WSGG em relação aos do LBL. Para o CO_2 , os desvios para todos os perfis de temperatura reduziram conforme a pressão foi aumentada, mostrando que o modelo desenvolvido neste trabalho é adequado para aplicações de CO_2 em alta pressão. No entanto, para o H_2O o efeito foi oposto, pois o desvio aumentou em função do aumento da pressão para todos os perfis. Um argumento válido é que o H_2O tenha um pior desempenho em altas pressões devido ao maior número de linhas espectrais em seu espectro de absorção. Esse resultado também pode ser relacionado com o fato de o H_2O ter se mostrado mais sensível ao efeito da pressão na solução do LBL.

Ainda assim, os desvios para H_2O , mesmo para o pior caso de 40 atm, não são muito diferentes dos que outros autores já encontraram para outros coeficientes do WSGG. Sendo assim, conclui-se que o WSGG desenvolvido neste trabalho é aplicável para ambos CO_2 e H_2O em condições de alta pressão, para as frações molares de respectivamente, $Y = 0,1$ e $Y = 0,2$ e temperaturas variando de 400 a 2500 K.

7.1 Proposta de continuidade

Uma boa alternativa de continuidade desse estudo é avaliar outros perfis de alargamento, utilizando os estudos mais recentes em modelagem das linhas espectrais do CO_2 e H_2O , tendo em vista melhorar os resultados do LBL e investigar se há alguma mudança no efeito da pressão. Ainda na modelagem espectral, seria interessante testar outros modelos espectrais mais avançados que o WSGG, como o SLW, por exemplo, para avaliar se este comportamento dos desvios se verifica apenas para o WSGG e avaliar o desempenho relativo entre os métodos.

Aumentar a aplicabilidade dos resultados desenvolvidos neste trabalho para outros valores de fração molar, permitindo a utilização de uma metodologia de solução de meios participantes com perfis de concentração não homogêneos. Outras maneiras de aumentar a aplicabilidade seria testar novos perfis de temperatura, que sejam mais representativos das condições reais de combustão em alta pressão, e testar o desempenho do modelo para problemas bidimensionais e tridimensionais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alberti, M.; Weber, R.; Mancini, M. Re-creating Hottel's emissivity charts for carbon dioxide and extending them to 40 bar pressure using HITEMP-2010 data base. **Journal of Combustion and Flame**, v. 162, p. 597–612, 2015.

Becher, V.; Goanta, A.; Spliethoff, H. Validation of spectral gas radiation models under oxyfuel conditions – Part C: Validation of simplified models, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 11, p. 34-51, 2012.

Bordbar, M.H.; Węcel, G.; Hyppänen, T. A line by line based weighted sum of gray gases model for inhomogeneous CO₂-H₂O mixture in oxy-fired combustion. **Journal of Combustion and Flame**, v. 161, p. 2435–2445, 2014.

Brittes, R. **Proposição de um método híbrido em projetos inversos de cavidade radiante**, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2011.

Brittes, R.; Centeno, F.R.; Ziemniczak, A.; França, F.H.R. WSGG model correlations to compute nongray radiation from carbon monoxide in combustion applications, **Journal of Heat Transfer**, v. 139, p. 041202-041208, 2017.

Cassol, F.; Brittes, R.; França, F.H.R.; Ezekoye, O.A. Application of the weighted-sum-of-gray-gases model for media composed of arbitrary concentrations of H₂O, CO₂ and soot, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 79, p. 796-806, 2014.

Centeno, F.R., França, F.H.R., Cassol, F., Dorigon, L., Silva, C.V. Evaluation of new WSGG model correlations on radiative source term in a 2D axisymmetric turbulent diffusion flame, 14th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, 2012.

Centeno, F.R.; Cassol, F.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R.; Silva, C.V. Comparison of different WSGG correlations in the computation of thermal radiation in a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane-air flame, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 35, p. 419-430, 2013.

Centeno, F.R.; Brittes, R.; França, F.H.R.; Ezekoye, O. A. Evaluation of gas radiation heat transfer in a 2D axisymmetric geometry using the line-by-line integration and WSGG models, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 156, p. 1-11, 2015.

Chen, Z.; Qin, X.; Xu, B.; Ju, Y.; Liu, F. Studies of radiation absorption on flame speed and flammability limit of CO₂ diluted methane flames at elevated pressures, Proceedings of the Combustion Institute, v. 31, p. 2693-2700, 2007.

Chu, H.; Gu, M.; Consalvi, J.L.; Liu, F. Effects of total pressure on non-grey gas radiation transfer in oxy-fuel combustion using the LBL, SNB, SNBCK, WSGG and FSCK methods. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 172, p. 24–35, 2016.

Chu, H.; Gu, M.; Consalvi, Gu; M., J.L.; Liu, F. Calculations of radiative heat transfer in an axisymmetric jet diffusion flame at elevated pressures using different gas radiation models. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 172, p. 24–35, 2017.

Dorigon, L.J. **Determinação de coeficientes do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza a partir do banco de dados HITEMP 2010**, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS, 2012.

Dorigon, L.J.; Duciak, G.; Brittes, R.; Cassol, F.; Galarça, M.; França, F.H.R. WSGG correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures, **International Journal of Heat and Mass transfer**, v.64, p. 863-873, 2013.

Hottel, H.C.; Sarofim, A.F. **Radiative Transfer**, McGraw-Hill, New York, 1967.

Howell, J.R.; Siegel, R.; Mengüç, M.P. **Thermal Radiation Heat Transfer**. Taylor & Francis, New York, 2011.

Incropera F.P.; DeWitt, D.P.; Bergman, T.L.; Lavine, A.S. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**, 6ª edição, LTC, Rio de Janeiro, 2008.

Kangwanpongpan, T.; França, F.H.R., da Silva, R.C., Schneider, P.S.; H.J. New correlations for the weighted-sum-of-gray-gases model in oxy-fuel conditions based on HITEMP 2010 database, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 55, p. 7419-7433, 2012.

Kassi, S.; Campargue, A.; Mondelain, D.; Tran, H. High pressure Cavity Ring Down Spectroscopy: Application to the absorption continuum of CO₂ near 1.7 μm , **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 167, p. 97-104, 2015.

Kez, V.; Liu, F.; Consalvi, J.L.; Ströhle, J.; Epple, B. A comprehensive evaluation of different radiation models in a gas turbine combustor under conditions of oxy-fuel combustion with dry recycle, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 172, pp. 121–133, 2016.

Modest, M.F. The weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary solution methods in radiative transfer, **Journal of Heat Transfer**, v. 113, p. 650-656, 1991.

Modest, M.F. **Radiative Heat Transfer**, McGraw-Hill, New York, 2003.

Pearson, J.T., Webb, B.W., Solovjov, V.P., Ma, J. Effect of total pressure on the absorption line blackbody distribution function and radiative transfer in H₂O, CO₂, and CO. **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 143, p. 100–110, 2014.

Rothman, L.S., Rinsland, C.P., Goldman, A., Massie, S.T., Edwards, D.P., Flaud, M., Perrin, A., Camy-Peyret, C., Dana, V., Mandin, Y., Chroeder, J., A. Mccann, Gamache, R.R., Wattson, R.B., Yoshino, K., Chance, K.V., Jucks, K.W., Brown, L.R., Nemtchinov, V., Varanasi, P. The HITRAN molecular spectroscopic database and Hawks (HITRAN

Atmospheric Workstation): 1996 edition, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 60, p. 665-710, 1998.

Rothman, L.S., Rinsland, C.P., Goldman, A., Massie, S.T. The HITRAN molecular spectroscopic Database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Workstation): 2004 Edition, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 60, p. 665-710, 2005.

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Barber, R.J.; Dothe, H.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Perevalov, V.I.; Tashkun, S.A.; Tennyson, J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 2139-2150, 2010.

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Babikov, Y.; Barde, A.; Chris Benner, D.; Bernath, P.F.; Birk, M.; Bizzocchi, L.; Boudon, V.; Brown, L.R.; Campargue, A.; Chance, K.; Cohen, E.A.; Coudert, L.H.; Devi, V.M.; Drouin, B.J.; Fayt, A.; Flaud, J.-M.; Gamache, R.R.; Harrison, J.J.; Hartmann, J.-M.; Hill, C.; Hodges, J.T.; Jacquemart, D.; Jolly, A.; Lamouroux, J.; Le Roy, R.J.; Li, G.; Long, D.A.; Lyulin, O.M.; Mackie, C.J.; Massie, S.T.; Mikhailenko, S.; Müller, H.S.P.; Naumenko, O.V.; Nikitin, A.V.; Orphal, J.; Perevalov, V.; Perrin, A.; Polovtseva, E.R.; Richard, C.; Smith, M.A.H.; Starikova, E.; Sung, K.; Tashkun, S.; Tennyson, J.; Toon, G.C.; Tyuterev, V.I.; Wagner, G. The HITRAN2012 molecular spectroscopic database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 130, p. 4-50, 2013.

Rothman, L.S.; Wattson, R.B.; Gamache, R.R.; Schoeder, J.; McCann, A. HITRAN WAWKS and HITEMP: High-temperature molecular database, *Proceedings of SPIE*, v. 2471, p. 105-111, 1995.

Siegel, R.; Howell, J.R. **Thermal Radiation Heat Transfer**. 4th edition, Taylor & Francis, New York – London, 2002.

Silva, R.B. **Proposição de um método híbrido em projetos inversos de cavidade radiante**, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS, 2011.

Silva, R.B. **Desenvolvimento de um novo modelo para integração espectral da RTE em problemas não homogêneos e não isotérmicos**, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS, 2015.

Smith, T.F., Shen, Z.F. and Friedman, J.N. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model, **Journal of Heat Transfer**, v. 104, p. 602-608, 1982.

Stefani, S., Piccioni, G., Snels, M., Grassi, D., Adriani A. Experimental CO₂ absorption coefficients at high pressure and high, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 117, p. 21–28, 2013.

Tran, H., Boulet, C., Stefani, S., Snels, M., Piccioni, G. Measurements and modelling of high pressure pure CO₂ spectra from 750 to 8500 cm⁻¹. I—central and wing regions of the allowed vibrational bands, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 112, p. 925-936, 2011.

Wall, T.; Stanger, R.; Santos, S. Demonstrations of coal-fired oxy-fuel technology for carbon capture and storage and issues with commercial deployment, **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 5, p. 5–15, 2011.

Wang, A.; Modest, M.F. Importance of combined Lorentz-Doppler broadening in high-temperature radiative heat transfer applications, **Journal of Heat Transfer**, v. 126, p. 858-861, 2004.

Ziemniczak, A. **Geração de novas correlações da soma-ponderada-de-gases-cinza para espécies individuais de gases participantes**, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS, 2014.