

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

DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES PARA O MODELO DA SOMA-
PONDERADA-DOS-GASES-CINZAS A PARTIR DO BANCO DE DADOS HITEMP 2010

por

Leonardo Jovani Dorigon

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, fevereiro de 2012

DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES PARA O MODELO DA SOMA-
PONDERADA-DOS-GASES-CINZAS A PARTIR DO BANCO DE DADOS HITEMP 2010

por

Leonardo Jovani Dorigon

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. Cristiano Vitorino da Silva - URI

Prof. Dr. Horácio Antonio Vielmo - PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Paulo Smith Schneider - PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Francis H. R. França

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 28 de fevereiro de 2012

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Altanir Dorigon e Nelsa, por todo apoio e incentivo para a conclusão do mestrado.

Ao Professor Francis França, por toda ajuda e disposição. Não foram poucas as reuniões para a concretização desse trabalho.

Aos membros da banca avaliadora, por toda a atenção dada ao trabalho e sugestões importantes para sua melhoria.

A todos os professores do PROMEC pelo aprendizado. Fundamental para esse trabalho.

Aos colegas e amigos do GESTE por toda a parceria e amizade criada durante o período de mestrado.

Ao colega e amigo Anderson Mossi, que apesar de não estar mais entre nós, sua ajuda foi de fundamental importância para esse trabalho. Com certeza deixou um legado muito importante para o prosseguimento desse e de outros trabalhos que ainda estarão por vir.

A UFRGS que abriu as portas para o desenvolvimento desse trabalho.

A CAPES pela bolsa de estudos concedida no período.

Ao CESUP pelo recurso computacional.

*Tudo deveria se tornar o mais simples possível,
mas não simplificado.*

Albert Einstein.

RESUMO

Neste trabalho são obtidos os coeficientes do modelo da Soma-Ponderada-dos-gases-cinza (WSGG) a partir do banco de dados HITEMP 2010, permitindo o uso do modelo com os dados mais precisos disponíveis atualmente. Neste trabalho também se faz uma comparação dos valores de emitância total obtidos a partir do modelo WSGG com valores *benchmark*, obtidos nesse trabalho, mostrando uma excelente concordância. Com os coeficientes obtidos, problemas unidimensionais de transferência de calor radiante são resolvidos de modo a comparar a solução obtida pelo modelo WSGG com a solução obtida pela integração LBL (solução *benchmark*). Nas comparações, diferentes perfis de temperatura, comprimentos de trajeto, gradientes de temperatura e concentrações de espécies são utilizadas. Em todos os casos é possível verificar uma boa concordância entre os resultados WSGG e LBL. Para comparações com perfil de temperatura parabólico, verifica-se erros locais abaixo de 8%. Para perfis de temperatura cossenoidais, é possível observar erros de até 18% para alguns casos, porém com erros médios menores que 1,6%.

Palavras-chave: radiação térmica; HITEMP 2010; Soma-Ponderada-de-Gases-Cinza, coeficientes WSGG.

ABSTRACT

In this work the coefficients for the Weighted Sum-of-Gray-Gases model (WSGG) are determined from HITEMP 2010 database, allowing the use of the model with the most accurate data available nowadays. This study also makes a comparison of the total emittance values obtained from the model with benchmark values, obtained in this work, showing an excellent agreement. With the obtained coefficients, one-dimensional radiant heat transfer problems are solved in order to compare the solution obtained by the WSGG model with the solution obtained by the LBL integration (benchmark solution). In the comparisons, different temperature profiles, path lengths, temperature gradients and species concentrations are used. In all cases it is possible to verify the good agreement of the WSGG and LBL results. For comparisons with parabolic temperature profile, the local error is below 8%. For cosine temperature profile, the local error is about 18% for some cases, but with average errors less than 1,6%.

Keywords: thermal radiation, HITEMP 2010, Weighted Sum-of-Gray-Gases model, WSGG coefficients.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Revisão Bibliográfica	2
1.2	Objetivos.....	4
1.3	Organização do Trabalho.....	4
2	FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO EM MEIOS PARTICIPANTES.....	5
2.1	Corpo Negro	6
2.2	Intensidade da Radiação Térmica	7
2.3	Atenuação da Intensidade Devido à Absorção do Meio Participante.....	8
2.4	Aumento da Intensidade Devido à Emissão do Meio Participante.....	11
2.5	A Equação do Transporte Radiante	12
2.6	A Emitância Total.....	13
3	O BANCO DE DADOS ESPECTRAL	14
3.1	Mecanismos Físicos Envolvidos na Emissão e Absorção da Radiação.....	15
3.2	Alargamento Espectral.....	19
3.3	Geração dos Espectros de Seção Transversal de Absorção Espectral	21
3.4	O Efeito da Pressão Sobre o Coeficiente de Absorção Espectral e na Emitância	24
3.4.1	O efeito da pressão sobre a emitância total	28
3.5	O Efeito da Temperatura Sobre o Coeficiente de Absorção.....	31
3.6	Correção da Intensidade da Linha	32
4	MÉTODOS PARA INTEGRAÇÃO ESPECTRAL DA RTE	34
4.1	O Método Linha-Por-Linha	34
4.2	O Método da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas.....	34
5	METODOLOGIA.....	37
5.1	Convergência nos Valores de Seção Transversal de Absorção	37
5.2	Obtenção dos Espectros de Absortância.....	41
5.3	Determinação dos Coeficientes da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas	41
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	44
6.1	Comparação da Solução LBL com a Solução WSGG.....	46
6.1.1	Comparação considerando a variação da distância entre as placas	48
6.1.2	Comparação considerando a variação diferença de temperatura.....	52
6.1.3	Comparação considerando a variação na pressão parcial.....	56
6.1.4	Comparação dos coeficientes apresentados com coeficientes clássicos.....	62
7	CONCLUSÕES.....	64
7.1	Proposta de Continuidade	65
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	66

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Variação da emissividade espectral do tungstênio [Siegel e Howell, 2002].	5
Figura 2.2 – Variação da emitância espectral de um meio participante - dióxido de carbono [Siegel e Howell, 2002].	6
Figura 2.3 – Corpo negro envolvido por um detector hemisférico [Brittes, 2011].	6
Figura 2.4 – Geometria para definição da intensidade de radiação em meio participante.	8
Figura 2.5 – Absorção da radiação por um elemento infinitesimal de meio participante.	9
Figura 3.1 – Espectro do coeficiente de absorção para CO ₂ para T = 1000 K e $p_{CO_2} = 1\text{ atm}$.	16
Figura 3.2 – Graus de liberdade rotacional e vibracional para moléculas (a) diatômica (b) triatômico linear e (c) triatômico não linear [Modest 1993].	17
Figura 3.3 – Níveis de energia para uma molécula, mostrando os estados eletrônicos, vibracional e rotacional [Lindecrantz, 2010].	18
Figura 3.4 – Formas de linha para diversos tipos de alargamento.	19
Figura 3.5 – Espectro da seção transversal de absorção do CO ₂ na temperatura de 1000 K e pressão parcial de 0,1 atm.	23
Figura 3.6 – Espectro da seção transversal de absorção do H ₂ O na temperatura de 1000 K e pressão parcial de 0,1 atm.	23
Figura 3.7 – Espectro da seção transversal de absorção do H ₂ O na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.	25
Figura 3.8 – Espectro da seção transversal de absorção do CO ₂ na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.	26
Figura 3.9 – Espectro do coeficiente de absorção do H ₂ O na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.	27
Figura 3.10 – Espectro do coeficiente de absorção do CO ₂ na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.	27
Figura 3.11 – Valores de emitância total para CO ₂ calculadas para um $pL = 0,1\text{ atm}\cdot\text{m}$ e diferentes pressões parciais de CO ₂ .	28
Figura 3.12 – Valores de emitância total para H ₂ O calculadas para um $pL = 0,1\text{ atm}\cdot\text{m}$ e diferentes pressões parciais de H ₂ O.	29

Figura 3.13 – Valores de emitância total para mistura de H ₂ O e CO ₂ na proporção de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, calculadas para uma $pL = 0,1$ atm·m e diferentes valores de pressões parciais para CO ₂ e H ₂ O.	30
Figura 3.14 – Valores de emitância total para mistura de H ₂ O e CO ₂ na proporção de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, calculadas para uma $pL = 0,1$ atm·m e diferentes valores de pressões parciais para CO ₂ e H ₂ O.	30
Figura 3.15 – Espectro do coeficiente de absorção do H ₂ O na pressão parcial de 0,1 atm, e temperaturas de 1000 K e 2000 K.	31
Figura 3.16 – Espectro do coeficiente de absorção do CO ₂ na pressão parcial de 0,1 atm, e temperaturas de 1000 K e 2000 K.	32
Figura 4.1 – Gráfico representando um meio participante composto por três gases cinza para o modelo WSGG [Galarça et al., 2008].	35
Figura 5.1 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para CO ₂ em relação NL , para temperatura $T = 1500$ K, $p = 0,5$ atm, $pL = 3$ atm·m e $NP = 500.000$	38
Figura 5.2 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para H ₂ O em relação NL , para temperatura $T = 1500$ K, $p = 0,5$ atm, $pL = 3$ atm·m e $NP = 500.000$	39
Figura 5.3 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para CO ₂ em relação a NP , para temperatura $T = 1500$ K, $pL = 3$ atm·m e $NL = 800$ cm ⁻¹	40
Figura 5.4 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para H ₂ O em relação a NP , para temperatura $T = 1500$ K, $pL = 3$ atm·m e $NL = 40$ cm ⁻¹	40
Figura 6.1 – Comparação dos valores de emitância para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$	45
Figura 6.2 – Comparação dos valores de emitância para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$	45
Figura 6.3 – Configuração geométrica de duas placas planas infinitas.	46
Figura 6.4 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura parabólico e diferentes distâncias entre placas.	50
Figura 6.5 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura parabólico e diferentes distâncias entre placas.	50
Figura 6.6 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e diferentes distâncias entre placas.	51

Figura 6.7 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e diferentes distâncias entre placas.	51
Figura 6.8 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura parabólica e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.	53
Figura 6.9 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura parabólica e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.	54
Figura 6.10 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.	55
Figura 6.11 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.	56
Figura 6.12 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura parabólica e $p_{H_2O} = 0,05$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm.	57
Figura 6.13 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura parabólica e $p_{H_2O} = 0,2$ atm e $p_{CO_2} = 0,2$ atm.	58
Figura 6.14 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura parabólica e $p_{H_2O} = 0,1$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm.	59
Figura 6.15 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura parabólica e $p_{H_2O} = 0,3$ atm e $p_{CO_2} = 0,15$ atm.	59
Figura 6.16 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{H_2O} = 0,05$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm.	60

Figura 6.17 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{H_2O} = 0,2$ atm e $p_{CO_2} = 0,2$ atm.	61
Figura 6.18 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{H_2O} = 0,1$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm.	61
Figura 6.19 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{H_2O} = 0,3$ atm e $p_{CO_2} = 0,15$ atm.	62
Figura 6.20 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método WSGG, utilizando os coeficientes de Smith et al., 1982, e os coeficientes propostos nesse trabalho, para uma relação $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$ e perfil de temperatura parabólico.	63
Figura 6.21 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método WSGG, utilizando os coeficientes de Smith et al., 1982, e os coeficientes propostos nesse trabalho, para uma relação $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ e perfil de temperatura parabólica.	63

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Nomenclatura utilizada no banco de dados HITEMP [Mossi, 2011].....	15
Tabela 6.1 – Coeficientes para WSGG para mistura de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$	44
Tabela 6.2 – Coeficientes para WSGG para mistura de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$	44
Tabela 6.3 – Erros máximos e médios em função da variação da distância entre as placas. ...	49
Tabela 6.4 – Erros máximos e médios em função da diferença entre a máxima e mínima temperatura.	52
Tabela 6.5 – Erros máximos e médios em função da variação da pressão parcial de H ₂ O e CO ₂	57

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ASCII	Formato de arquivo para armazenamento digital
AFCRL	Banco de dados espectral na sua mais antiga versão
CDSDB	Banco de dados espectral para CO ₂
HITEMP	Banco de dados espectral para a temperatura de 1000 K
HITRAN	Banco de dados espectral para a temperatura de 296 K
LBL	Linha-For-Linha
RTE	Equação da Transferência Radiante
WSGG	Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas

LISTA DE SIMBOLOS

A	área, m ²
$a_{\eta S}$	espessura ótica, adimensional
a_i	coeficientes de ponderação da soma ponderada dos gases cinza, adimensional
a_{η}	coeficiente de absorção, m ⁻¹
$a_{\eta, total}$	coeficiente de absorção da mistura, m ⁻¹
$b_{i,1}$	coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, adimensional
$b_{i,2}$	coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻¹
$b_{i,3}$	coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻²
$b_{i,4}$	coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻³
$b_{i,5}$	coeficientes polinomiais para soma ponderada dos gases cinza, K ⁻⁴
C_{η}	seção transversal de absorção em função do número de onda, cm ² /molec
$C_{\eta, ij}$	seção transversal de absorção na transição i para j , cm ² /molec
C_1	constante da distribuição espectral de energia de Planck, W μ m ⁴ /(m ² sr)
C_2	constante da distribuição espectral de energia de Planck, μ mK
e_b	poder emissivo do corpo negro, W/m ²
E_i	nível de energia que o átomo ou molécula no estado i , J
E_j	nível de energia que o átomo ou molécula no estado j , J
$Erro_{max}$	maior erro obtido no espaço, na comparação LBL com WSGG, %
$Erro_{med}$	erro médio obtido, na comparação LBL com WSGG, %
E_{η}	energia da molécula no estado inferior, cm ⁻¹
$e_{\eta b}$	poder emissivo espectral do corpo negro, W/(m ² · μ m)
h	constante de Planck, J·s
i_{η}	intensidade de radiação espectral, W/(m ² · μ m·sr)
$i_{\eta, b}$	intensidade de radiação espectral emitido pelo corpo negro, W/(m ² · μ m·sr)
$i_{\eta, e}$	intensidade de radiação espectral emitido, W/(m ² · μ m·sr)
$i_{\eta, total}$	intensidade líquida de radiação espectral W/(m ² · μ m·sr)
k_i	coeficiente de absorção para WSGG, (atm·m) ⁻¹
K_{η}	coeficiente de extinção, m ⁻¹
L	distância entre duas placas infinitas, m
n	coeficiente de dependência da temperatura, adimensional
N	número de <i>Loschmidt</i> , moléculas/cm ³ ·atm
NL	faixa de linhas lidas no banco de dados, cm ⁻¹
NP	número de pontos usados na abscissa dos espectros, adimensional
p	pressão, atm
p_{CO2}	pressão parcial de CO ₂ , atm
p_{H2O}	pressão parcial de H ₂ O, atm

pL	produto da pressão por uma distância finita, atm·m
pS	produto da pressão pelo caminho, atm·m
p_s	pressão parcial de determinada substância, atm
Q	soma total de partições internas,
q_r	fluxo radiante, W/m ²
S	caminho percorrido pela radiação em um meio participante, m
S_{ij}	intensidade de linha na transição de i para j , cm ² /molécula
T	temperatura, K
T_{ref}	temperatura de referência, K
x	parâmetro de tamanho, m

SÍMBOLOS GREGOS

α_η	absortância espectral em função do número de onda, adimensional
α_λ	absortância espectral em função do comprimento de onda, adimensional
β	ângulo em relação à normal da superfície, rad
γ	meia largura de banda, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$
$\gamma_{ar,i}$	meia largura de banda causada pelo ar na linha i do banco de dados, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$
γ_i	meia largura de banda na linha i do banco de dados HITEMP 2010, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$
$\gamma_{self,i}$	meia largura de banda causada pela própria molécula, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$
δ_i	diferença de energia entre o estado inicial e final de uma molécula, cm^{-1}
ε	emitância total, adimensional
ε_η	emitância espectral em função do número de onda, adimensional
ε_λ	emitância espectral em função do comprimento de onda, adimensional
η	número de onda, cm^{-1}
η_i	número de onda na linha i do banco de dados HITEMP 2010, cm^{-1}
η_{ij}	número de onda em que ocorre a transição do nível de energia i para j , cm^{-1}
κ_η	coeficiente de absorção por unidade de pressão, m^{-1}/atm
$\kappa_{\eta,CO2}$	coeficiente de absorção por unidade de pressão do CO ₂ , m^{-1}/atm
$\kappa_{\eta,H2O}$	coeficiente de absorção por unidade de pressão do H ₂ O, m^{-1}/atm
$\kappa_{\eta,p}$	coeficiente de absorção por unidade de pressão, m^{-1}/atm
$\kappa_{\eta,\rho}$	coeficiente de absorção por unidade de massa específica, $\text{m}^{-1}/(\text{Kg}/\text{m}^3)$
λ	comprimento de onda, μm
ν	frequência de energia do fóton, 1/s
ν_{ij}	frequência em que ocorre a transição do nível de energia de i para j , 1/s
ρ	massa específica, kg/m^3
σ	constante de Stefan-Boltzmann, $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$
σ_η	coeficiente de espalhamento, m^{-1}
ω	ângulo sólido, sr
τ_η	transmitância espectral, adimensional

1 INTRODUÇÃO

O crescente consumo de energia associado à preocupação ambiental, ameaçado pela poluição causada pela queima de combustíveis fósseis, mostra a importância de se utilizar corretamente as fontes de energia. Com o uso de meios computacionais para o cálculo de uma queima mais eficiente, é possível guiar a tecnologia para equipamentos menos poluentes e mais eficientes.

A produção de energia está fortemente dependente da queima de combustíveis fósseis, conforme a Agência Internacional de Energia (IEA – *International Energy Agency*). No Brasil, a utilização do petróleo ocupa uma percentagem de 39,1%; gás, 8,7%; e carvão, 5,6%. As perspectivas são que esses valores aumentem, conforme a publicação na revista *World Energy Technology Outlook, 2007*. Muitos produtos gerados na queima de combustíveis fósseis são nocivos, tais como monóxido de carbono. No Brasil, a preocupação com a emissão de poluentes já está evidente, a exemplo das imposições do governo para redução destas em veículos automotores.

Torna-se assim, necessária a criação de novas tecnologias para concretizar essa redução. Para tal, recursos computacionais são fortemente empregados em estudos envolvendo a queima de combustíveis, junto com softwares comerciais, capazes de obter resultados quando há reações de combustão, problemas fluidodinâmicos e transferência de calor.

Esses softwares comerciais sofrem atualizações constantes na medida em que novos estudos são publicados. Essas atualizações podem atingir tanto métodos de cálculos quanto coeficientes e modelos utilizados, quando necessário focar em um determinado problema específico ou mesmo quando eles se tornam obsoletos.

Dos fenômenos de troca térmica, a radiação ocupa importante papel quando se trata de queima de combustíveis. Este processo envolve altas temperaturas, e, conforme postulado de Planck, a energia emitida por um corpo relaciona-se à temperatura absoluta na quarta potência. Isso envolve tanto superfícies sólidas quanto os gases da própria combustão.

Devido ao enorme esforço computacional envolvido no cálculo da troca térmica radiante em gases, modelos são utilizados de modo a substituir a solução LBL. A solução LBL é empregada somente em soluções *benchmark* para validação desses modelos. Dessa forma torna-se viável a solução da equação radiante em problemas envolvendo radiação térmica.

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (*weighted-sum-of-gray-gases* - WSGG em inglês) foi proposta por Hottel e Sarofin, 1967. Esse modelo pode ser usado em softwares comerciais, tal como Fluent [Ansys Fluent 12.0 – *Getting Started Guide*, 2009] e Ansys CFX [Ansys CFX *Tutorials*, release 12.0, 2009]. Os coeficientes utilizados nesse modelo foram obtidos por Smith et al., 1982, para CO₂, H₂O e mistura de ambos, que são os principais gases envolvidos na troca térmica na combustão de hidrocarbonetos. Apesar de ultrapassados, esses coeficientes são ainda utilizados em softwares comerciais, o que pode trazer erros consideráveis. Galarça et al., 2008, obtiveram esses mesmos coeficientes utilizando banco de dados atualizados, trazendo maior confiabilidade nos resultados obtidos por meio desses.

Atualmente estão disponíveis banco de dados, tais como HITRAN, HITEMP e CDSO que fornecem parâmetros relativos às moléculas participantes na troca térmica radiante. Esses bancos de dados são atualizados frequentemente, sendo que para o HITEMP, a última atualização ocorreu em 2010, trazendo consigo uma confiabilidade maior dos dados fornecidos.

1.1 Revisão Bibliográfica

O modelo WSGG foi proposto por Hotel e Sarofin, 1967. O WSGG considera que todo o espectro pode ser representado através de poucas bandas com coeficiente de absorção uniforme. Cada banda corresponde um gás cinza. Smith et al., 1982, obtiveram as funções de ponderação e os coeficiente de absorção para misturas de vapor de água e dióxido de carbono para temperaturas de 600 K a 2400 K e pressões parciais pelo trajeto de 0,001 atm·m a 10 atm·m. Os dados para obtenção dos coeficientes foram obtidos a partir do modelo de banda larga exponencial.

Existem vários bancos de dados espectrais tais como: HITRAN (*High Resolution Transmission Molecular Absorption Database*), HITEMP (*High Temperature Molecular Spectroscopic Database*), CDSO-1000 (*Carbon Dioxide Spectroscopic Databank at 1000 K*) e CDSO-4000 (*Carbon Dioxide Spectroscopic Databank at 4000 K*). Eles trazem o comportamento espectral de vários parâmetros associados a diversas moléculas. Com ele é possível obter a absorção de cada linha espectral. Rothman et al., 1998 apresentam a versão 1996 do banco de dados HITRAN. Rothman et al., 2005, apresentam a versão 2004 do banco de dados HITAN. Rothman et al., 2010, apresentam a versão 2010 do banco de dados

HITEMP. Tashkuna et al., 2003, apresentam o banco de dados CDS-1000 e Tashkun e Perevalov, 2011, apresentam o banco de dados CDS-4000.

Para cálculo do espectro de absorção, Denison e Webb, 1993a, mostram uma formulação para sua construção detalhada. Nesse trabalho ele usa o banco de dados HITRAN para H₂O na versão de 1991, que segundo o próprio autor, apresenta uma deficiência pelo fato do banco de dados ser medido a uma temperatura de 296 K. Isso traz, como consequência, a ausência das *hot-lines* quando se consideram temperaturas mais elevadas.

Rothman et al., 2010, apresentam o banco de dados HITEMP 2010. Esse banco é a versão mais recente, sendo obtido na temperatura de 1000 K, mais adequada, portanto, em cálculos envolvendo combustão. Comparado com versões anteriores do HITEMP e do HITRAN, ele traz ainda um maior detalhamento do comportamento espectral. Entre outras moléculas, apresenta dados para vapor de água e dióxido de carbono. Apesar de obtido a uma temperatura de 1000 K, o banco de dados é compilado a uma temperatura de referência de 296 K para padronização com outros bancos de dados. Para cálculos em temperaturas diferentes de 296 K, torna-se necessária sua conversão à temperatura de utilização desejada. Para conversão, Gamache et al., 1990, criam uma rotina em linguagem de programação Fortran.

Modest, 1991, mostrou que o modelo WSGG pode ser usado em qualquer método de solução da equação da transferência radiante (*Radiative Transfer Equation* - RTE em inglês), além do método das zonas já então proposta por Hotel e Sarofin, 1967. Denison e Webb, 1993b, usam o modelo WSGG acoplado na equação da transferência radiante.

Para solução da RTE, Mossi, 2011, utiliza o método das ordenadas discretas, podendo assim obter a solução *benchmark*. Essa solução é utilizada para comparação com a solução WSGG para verificação do método e de seus coeficientes.

Yin et al., 2010, traz coeficientes para WSGG para diversas proporções de pressões parciais de p_{H_2O}/p_{CO_2} (4, 2, 1, 0,75, 0,5 e 0,25). A emitância total é obtida a partir de modelos de banda larga exponencial, o que não leva em conta a grande variação da absorção espectral em relação ao número de onda.

Galarça et al., 2008, mostram coeficientes para proporções de mistura p_{H_2O}/p_{CO_2} de 1 e 2, que representam os produtos da queima de gás natural e óleo combustível, respectivamente. Os coeficientes para WSGG foram obtidos através dos valores de emitância total, calculados a partir do banco de dados HITEMP e HITRAN, na versão 2008, com o método de Monte Carlo. Os coeficientes foram utilizados para cálculos em uma faixa de temperatura de 400 K a

2400 K, e uma faixa de produto da distância pela pressão, pL , de 0,001 atm·m a 10 atm·m. Traz também o método para obter os coeficientes para WSGG, empregando o algoritmo de Levenberg-Marquardt [Levenberg, 1944] e [Marquardt, 1963], que será o mesmo utilizado nesse trabalho.

1.2 Objetivos

Com a disponibilidade de banco de dados atualizados, como o HITEMP 2010, e a necessidade de atualização dos coeficientes utilizados no modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas, propõe-se a geração de novos coeficientes para mistura de CO₂ e H₂O. Os coeficientes são obtidos a partir de valores de emitância total, calculados a partir do HITEMP 2010. A partir desses dados, são geradas correlações para utilização no modelo WSGG, que podem ser usadas para pL de 0,001 atm·m a 10 atm·m e faixa de temperatura de 400 K a 2500 K.

1.3 Organização do Trabalho

O Capítulo 2 apresenta os fundamentos básicos na troca térmica por radiação em meios participantes. O Capítulo 3 traz uma breve descrição a respeito do banco de dados espectrais, HITEMP 2010, e os mecanismos físicos envolvidos no comportamento espectral da radiação térmica, além de equações que fornecem valores de emitância total a partir do banco de dados espectrais. Uma breve descrição da variação do comportamento espectral do coeficiente de absorção em relação à temperatura e à pressão também é feita, além da variação da emitância total em relação a esses dois fatores. O Capítulo 4 tem uma breve descrição dos métodos de cálculo da RTE, sendo eles o método LBL e WSGG. O Capítulo 5 mostra a metodologia utilizada para a obtenção dos espectros de absorção, dos valores de emitância total e do método utilizado para obtenção dos coeficientes para WSGG. O Capítulo 6 traz os resultados, mostrando os coeficientes obtidos e também uma comparação entre os valores de emitância total com os valores de emitância obtidos através dos coeficientes para WSGG, além de comparações de soluções obtidas com o método LBL e o método WSGG. Por fim, no Capítulo 7, são apresentadas as conclusões dos resultados apresentados e a proposta de continuidade para o presente trabalho.

2 FUNDAMENTOS DA RADIAÇÃO EM MEIOS PARTICIPANTES

O mecanismo da radiação térmica é compreendido como o transporte de energia térmica através de ondas eletromagnéticas emitidas por um meio sólido, líquido ou gasoso. A temperatura e a radiação térmica emitida impactam no grau de energia interna do meio. O dimensionamento de sistemas térmicos como câmaras de combustão e geradores de vapor são algumas entre as várias aplicações da análise radiante na engenharia, devido à presença de gases provenientes da queima combustível em temperaturas elevadas. Meios participantes absorvem, emitem e espalham energia radiante. Exemplos incluem: gases como o monóxido e o dióxido de carbono, o metano e o vapor de água. O ar e os gases monoatômicos são transparentes à radiação térmica. O esforço na modelagem espectral de gases participantes é justificado pela grande variação das propriedades radiantes para esses meios. A Figura 2.1 mostra as propriedades radiantes do tungstênio. Verifica-se que há uma variação suave da emissividade em relação ao comprimento de onda. Na Figura 2.2, para um meio participante, há variações mais bruscas das propriedades radiantes em relação ao número de onda. Isso acontece porque há vários tipos de transições de energia que ocorrem nos gases, compostos de moléculas, átomos, íons e elétrons livres, cada qual com diferentes níveis de energia.

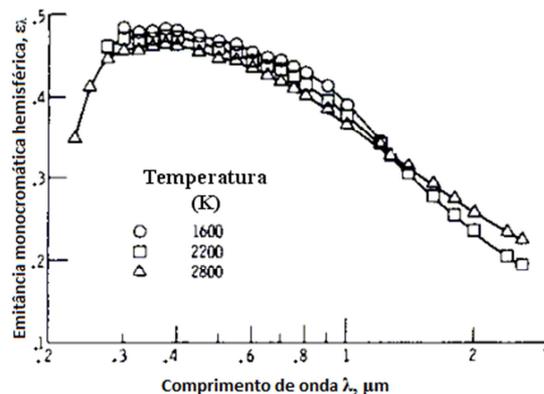


Figura 2.1 – Variação da emissividade espectral do tungstênio [adaptado de Siegel e Howell, 2002].

Em problemas de engenharia, a análise da radiação térmica geralmente envolve gases que participam com transições nos estados de vibração ou rotação, e que desse modo, têm coeficientes de absorção que variam bruscamente com o comprimento de onda. Neste caso, o fóton é absorvido ou emitido por um átomo ou molécula e não se verifica recombinação de

íons e elétrons, mas salto quântico de energia de um estado de vibração, rotação ou eletrônico para outro, de forma que esses saltos de absorção provocam variações descontínuas de energia. Os coeficientes de absorção e emissão são, então, funções que variam abruptamente com o comprimento de onda [Siegel e Howell, 2002].

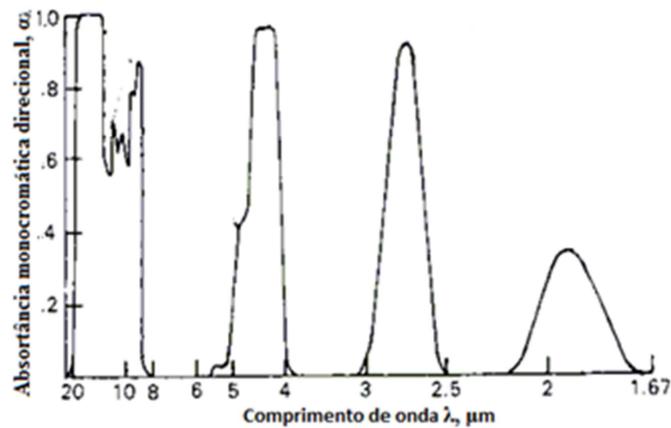


Figura 2.2 – Variação da emitância espectral de um meio participante - dióxido de carbono [adaptado de Siegel e Howell, 2002].

2.1 Corpo Negro

O corpo negro, uma idealização, absorve toda a energia radiante incidente, independente da direção e do comprimento de onda. Ainda, para uma dada temperatura, a energia radiante emitida pelo corpo negro é máxima para cada comprimento de onda e direção [Siegel e Howell, 2002].

Considere um corpo negro, em uma dada temperatura T , envolvido por um detector hemisférico que capta radiação térmica com número de onda η dentro de uma faixa $d\eta$ (Figura 2.3).

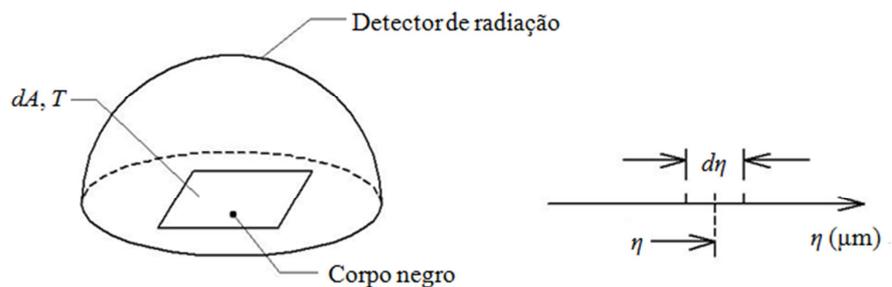


Figura 2.3 – Corpo negro envolvido por um detector hemisférico [Brittes, 2011].

O poder emissivo espectral hemisférico de corpo negro $e_{\eta b}(\eta, T)$, (W/m²μm), cuja dependência em relação ao comprimento de onda é dada pela distribuição espectral de Planck, 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 .

Da integração da distribuição espectral de Planck, mostrada na Equação 2.1, em todos os comprimentos de onda, resulta a relação conhecida como lei de Stefan-Boltzmann, dada pela Equação 2.2.

$$i_{\eta, b} = \frac{2C_1\eta^3}{e^{C_2\eta/T} - 1} \quad (2.1)$$

onde T (K) é a temperatura, η (cm⁻¹) é o número de onda e C_1 e C_2 são constantes que valem, respectivamente: $0,59552137 \times 10^8$ Wμm⁴/(m²sr) e $1,4387752 \times 10^4$ μmK.

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

onde e_b (W/m²) é o poder emissivo total do corpo negro e $\sigma = 5,6704 \times 10^{-8}$ W/(m²K⁴) é a constante de Stefan-Boltzmann [Siegel e Howell, 2002].

2.2 Intensidade da Radiação Térmica

Considera-se a Figura 2.4, na qual o elemento de área dA está contido em um meio participante, a intensidade de radiação i_η é definida como a energia radiante emitida por uma área infinitesimal dA , por unidade de tempo, por unidade de ângulo sólido $d\omega$, área projetada na direção normal a i_η e em um intervalo do espectro $d\eta$, conforme a Equação 2.3.

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

onde i_η é dado em W/(m²·μm·sr).

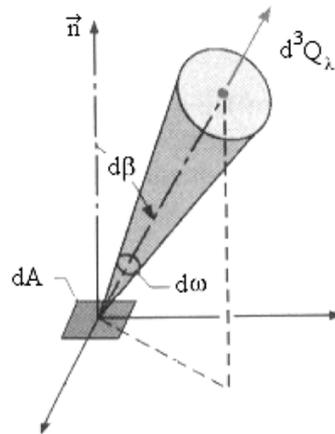


Figura 2.4 – Geometria para definição da intensidade de radiação em meio participante.

Uma importante consequência desta definição é que a intensidade mantém-se constante quando não há atenuação ou emissão no meio. Para um meio participante, a intensidade de radiação varia conforme o trajeto.

Tem-se ainda que a intensidade de radiação do corpo negro relaciona-se com o poder emissivo do corpo negro, da seguinte forma:

$$i_{\eta,b} = \pi e_{\eta,b} \quad (2.4)$$

onde $i_{\eta,b}$ é a intensidade de radiação térmica emitida por um corpo negro [Siegel e Howell, 2002].

2.3 Atenuação da Intensidade Devido à Absorção do Meio Participante

A intensidade de radiação espectral i_{η} que incide perpendicularmente a um volume infinitesimal, com comprimento dS , absorve e espalha radiação, conforme a Figura 2.5. Para quantificar a quantidade infinitesimal de radiação absorvida e espalhada pelo elemento dS , um coeficiente de proporcionalidade K_{η} é introduzido.

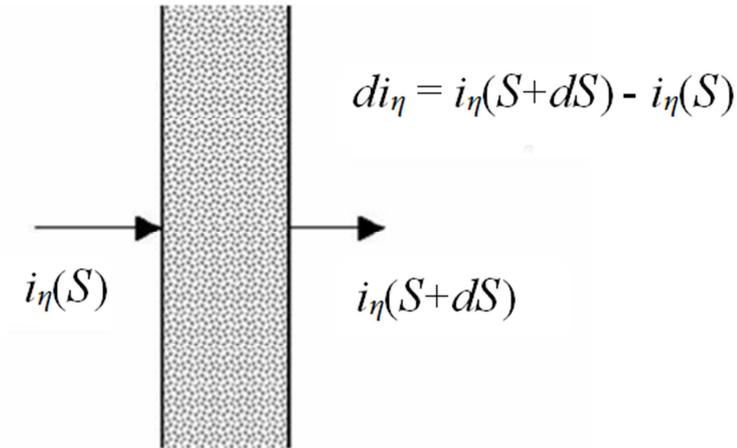


Figura 2.5 – Absorção da radiação por um elemento infinitesimal de meio participante.

Dessa forma, a radiação reduz-se ao longo do caminho conforme a Equação 2.5:

$$di_\eta = -K_\eta(S)i_\eta dS \quad (2.5)$$

O coeficiente K_η é definido como coeficiente de extinção. Ele é função da temperatura, pressão, concentração do meio e do número de onda da radiação incidente. Logo, para um meio não uniforme, ele torna-se função da posição. Para determinar a quantidade de radiação que chega a um determinado ponto, integra-se a Equação 2.5 ao longo do caminho percorrido S conforme a Equação 2.6.

$$\int_{i_\eta(0)}^{i_\eta(S)} \frac{di_\eta}{i_\eta} = -\int_0^S K_\eta(S) dS \quad (2.6)$$

A intensidade $i_\eta(S)$ é dada conforme a Equação 2.7:

$$i_\eta(S) = i_\eta(0) \exp\left[-\int_0^S K_\eta(S) dS\right] \quad (2.7)$$

na qual $i_\eta(0)$ é a intensidade de radiação na origem do caminho.

Verifica-se como consequência da proporcionalidade dada pela Equação 2.7, que a radiação ao longo de um caminho é atenuada exponencialmente conforme Lei de Bourger [Siegel e Howell, 2002].

O coeficiente de extinção dado pela soma da absorção e do espalhamento do meio. Ela é escrita da seguinte forma:

$$K_{\eta}(\eta, T, P) = a_{\eta}(\eta, T, P) + \sigma_{\eta}(\eta, T, P) \quad (2.8)$$

na qual a_{η} é o coeficiente de absorção e σ_{η} é coeficiente de espalhamento. O primeiro mostra a capacidade do meio em absorver a radiação. Ela depende das propriedades termodinâmicas do fluido e do comprimento de onda da radiação incidente sobre ele. O segundo quantifica o espalhamento da radiação para fora do caminho S , e assim como o coeficiente de absorção, ele também depende das propriedades termodinâmicas e do número de onda da radiação incidente.

Para determinação dos coeficientes do método WSGG, não é considerado atenuação devido ao espalhamento, pois tanto o H_2O quanto o CO_2 não espalham energia de forma significativa. Com isso, $K_{\eta} = a_{\eta}$. A Equação 2.5 é então representada da seguinte forma:

$$di_{\eta} = -a_{\eta}(S)i_{\eta}dS \quad (2.9)$$

Considera-se ainda um meio com pressão, temperatura e concentração uniformes. Assim o coeficiente de absorção a_{η} torna-se independente da posição S . Dessa forma, a intensidade de radiação pode ser escrita por:

$$i_{\eta}(S) = i_{\eta}(0)\exp(-a_{\eta}S) \quad (2.10)$$

na qual $a_{\eta}S$ é a espessura ótica. Ela é a capacidade do meio em absorver a radiação. Essa capacidade é dada tanto pelas propriedades do meio quanto pela distância S . Assim, quanto maior a espessura ótica, maior será atenuação da radiação.

O coeficiente de absorção tem forte dependência da massa específica do meio. Quanto maior a massa específica, maior a atenuação da radiação devido à absorção. O coeficiente de absorção pode ser reescrita da seguinte forma [Siegel e Howell, 2002] e [Modest, 1993]:

$$K_{\eta,\rho} = \frac{a_{\eta}}{\rho} \quad (2.11)$$

onde ρ é a massa específica das espécies participantes e $\kappa_{\eta,\rho}$ é o coeficiente de absorção por unidade de massa específica. Essa forma de representar esse coeficiente é mais conveniente, pois a partir de um mesmo $\kappa_{\eta,\rho}$ pode-se calcular o coeficiente de absorção para diferentes massas específicas. Porém deve-se tomar cuidado ao representá-lo dessa forma, pois apesar de aparentemente tornar-se independente da massa específica, essa ainda influencia na largura de cada banda no espectro, sendo esse assunto visto mais adiante nesse trabalho.

Como apresentado por Smith et al., 1982 e por Modest, 1993, o coeficiente de absorção é escrito em função da pressão parcial das espécies participantes. Dessa forma, seguindo a mesma linha de raciocínio, escreve-se da seguinte forma:

$$\kappa_{\eta,p} = \frac{a_{\eta}}{p} \quad (2.12)$$

na qual p é a pressão parcial do meio participante e $\kappa_{\eta,p}$ é o coeficiente de absorção por unidade de pressão. As limitações do uso dessa relação continuam as mesmas para $\kappa_{\eta,\rho}$. Para abreviação da escrita, adota-se $\kappa_{\eta} = \kappa_{\eta,p}$ sendo apenas esse o coeficiente utilizado nesse trabalho.

2.4 Aumento da Intensidade Devido à Emissão do Meio Participante

Na medida em que a intensidade de radiação i_{η} passa através de um meio participante, em uma determinada direção, a energia é absorvida e a intensidade é atenuada. Porém ao mesmo tempo em que ocorre a atenuação, tem-se sua energia aumentada devido à emissão do meio.

A energia total quantificada ao longo de um caminho S depende do próprio comprimento desse caminho e da energia contida no meio. Desde que o meio esteja em equilíbrio termodinâmico, tem-se que a intensidade de radiação emitida é dada pelo produto da energia emitida por um corpo negro multiplicado pelo coeficiente de absorção e pelo trajeto percorrido. Assim, obtém-se o diferencial de intensidade emitida ao longo de dS da seguinte forma:

$$di_{\eta,e} = a_{\eta}(S)i_{\eta,b}(\eta)dS \quad (2.13)$$

na qual o coeficiente de proporcionalidade a_η , daqui em diante chamado de coeficiente de absorção, é o mesmo, tanto para emissão e absorção, desde que o meio esteja em equilíbrio termodinâmico.

Da mesma forma em que foi obtida a intensidade de radiação em função do caminho S para a atenuação, obtém-se similarmente para o aumento da radiação devido à emissão, da seguinte forma:

$$i_\eta(S) = i_{\eta,b}(\eta)[1 - \exp(-a_\eta S)] \quad (2.14)$$

Com isso pode-se obter a equação completa da intensidade espectral de radiação ao longo de um caminho S , considerando os efeitos da atenuação e da emissão do meio participante. Ela é dada por:

$$i_\eta(\eta, S) = i_\eta(\eta, 0) \exp(-a_\eta S) + i_{\eta,b}(\eta)[1 - \exp(-a_\eta S)] \quad (2.15)$$

na qual $\exp(-a_\eta S)$ é a parcela de energia transmitida de $i_\eta(\eta, 0)$, ou transmitância espectral, τ_η . Desta forma, $(1 - \exp(-a_\eta S))$ é a parcela que é absorvida de $i_\eta(\eta, 0)$, ou seja, a absorptância espectral α_η . Assim, a Equação 2.15 também pode ser escrita da seguinte forma:

$$i_\eta(\eta, S) = i_\eta(\eta, 0)\tau_\eta(\eta, S) + i_{\eta,b}(\eta)\alpha_\eta(\eta, S) \quad (2.16)$$

2.5 A Equação do Transporte Radiante

Considerando-se um meio que emite e absorve energia, tem-se que diferencial do total de intensidade de energia radiante, $di_{\eta,total}$, que percorre o diferencial de caminho, dS , será a soma da parcela absorvida com a parcela emitida. Assim, somando-se a Equação 2.9 e Equação 2.13, tem-se que:

$$di_{\eta,total} = di_{\eta,e} + di_\eta = a_\eta(S)i_{\eta,b}(\eta)dS - a_\eta(S)i_\eta dS \quad (2.17)$$

Ou ainda, conforme apresentado por Modest, 1993, a equação do transporte radiante pode ser representada da seguinte forma simplificada:

$$\frac{di_{\eta, total}}{ds} = a_{\eta}(i_{\eta, b} - i_{\eta}) \quad (2.18)$$

2.6 A Emitância Total

A emitância total ε é o quanto um meio participante é capaz de emitir energia, comparada com a energia emitida por um corpo negro. A emitância espectral ε_{η} é a mesma comparação, porém é para cada número de onda que compõe o seu espectro, tendo assim uma dependência no espectro na radiação emitida. A emitância total é a integração em todo o espectro da intensidade de radiação emitida por um meio participante comparada ao poder emissivo total de um corpo negro [Siegel e Howell, 2002]. É obtida pela Equação 2.19:

$$\varepsilon(S) = \pi^0 \frac{\int_0^{\infty} i_{\eta, b}(\eta) \varepsilon_{\eta}(\eta, S) d\eta}{\int_0^{\infty} i_{\eta, b}(\eta) d\eta} \quad (2.19)$$

Utilizando a Lei de Kirchhoff, $\varepsilon_{\eta} = \alpha_{\eta}$, e substituindo a absorptância espectral por $(1 - \exp(-a_{\eta} S))$, e ainda $a_{\eta} = p \cdot \kappa_{\eta}$, obtém-se a seguinte equação para a emitância total:

$$\varepsilon(S) = \pi^0 \frac{\int_0^{\infty} i_{\eta, b}(\eta) [1 - \exp(-\kappa_{\eta} p S)] d\eta}{\sigma T^4} \quad (2.20)$$

na qual pS é o produto da pressão parcial pelo caminho, dado em atm·m.

3 O BANCO DE DADOS ESPECTRAL

O banco de dados HITEMP, junto com o banco de dados HITRAN, apresenta vários parâmetros relativos a moléculas, em função do número de onda. A partir deles é possível gerar os espectros de absorção de um meio participante.

O programa para obtenção do banco de dados foi inicialmente financiado pela Força Aérea dos EUA, e culminou com a primeira edição pública, chamado de *Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation – AFCRL*. A primeira edição foi lançada em fita magnética, e foi disponibilizada gratuitamente.

O banco de dados HITRAN foi obtido através de medições na temperatura ambiente (296 K), de forma que para a obtenção dos dados para temperaturas mais elevadas os dados são interpolados matematicamente. Já o banco de dados HITEMP, apresenta dados obtidos na temperatura de 1000 K, sendo o uso deste mais apropriado para cálculos que envolvam combustão, pois a temperatura envolvida nesses processos pode passar seguramente de 2000 K [Galarça, 2010].

O HITEMP e o HITRAN são constantemente atualizados, de forma a aumentar a sua confiabilidade [Rothman et al., 2010]. A versão anterior ao HITEMP 2010 foi lançada em 2008. Nessa versão, os parâmetros eram obtidos para as moléculas de H₂O, CO₂ e CO. Já o HITEMP 2010 apresenta parâmetros para as moléculas de H₂O, CO₂, CO, NO e OH e inclui uma quantidade maior de linhas se comparado com a versão anterior. Para a molécula de H₂O, o número de linhas do banco de dados é de mais de 114 milhões, referente a 6 isótopos da molécula e cobrindo uma faixa de espectro de 0,0001 cm⁻¹ a 30000 cm⁻¹. Para o CO₂, o número de linhas é de mais de 11 milhões, referente a 7 isótopos e uma faixa espectral de 5 a 12785 cm⁻¹. Se comparado com a versão anterior, HITEMP 2008, o número de linhas do banco de dados para H₂O e CO₂ são um pouco mais de 1,2 milhão e 1 milhão, respectivamente.

O banco de dados está em formato ASCII, com extensão de arquivo digital “.par”. O tamanho dos arquivos é de 17,2 Gigabytes para H₂O e de 1,68 Gigabytes para CO₂, sendo que na versão anterior, esses valores eram, respectivamente, 124 Megabytes e 100 Megabytes. Esse aumento no tamanho dos arquivos traz por consequência um aumento do tempo de processamento computacional para a geração de um espectro de absorção, podendo ser de 14 vezes maior, se comparado ao tempo necessário utilizando o banco de dados HITEMP 2008. Na Tabela 3.1 verifica-se o significado de cada parâmetro contido no banco de dados.

Tabela 3.1– Nomenclatura utilizada no banco de dados HITEMP [Mossi, 2011].

Parâmetro	Descrição
Mol	Número da molécula.
Iso	Número do isótopo.
η	Número de onda no vácuo, em cm^{-1} .
S	Intensidade, em $\text{cm}^{-1}/(\text{molec} \times \text{cm}^{-2})$.
A	Coefficiente de Einstein, s^{-1} .
γ_{ar}	Alargamento da meia largura pelo ar, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.
γ_{self}	Alargamento da meia largura, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.
E''	Energia do estado mais baixo, cm^{-1} .
n	Coefficiente de dependência da temperatura.
δ	Deslocamento da linha por pressão do ar, $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$.
v'	Índice quântico global do estado superior.
v''	Índice quântico global do estado inferior.
Q'	Números quânticos do estado superior.
Q''	Números quânticos do estado inferior.
ierr	Índices de precisão para frequência, intensidade e alargamento pelo ar.
iref	Índices para tabelas de referência correspondentes à frequência, intensidade e meia largura.
*	Marcação para as linhas calculadas com um algoritmo de acoplamento.
g'	Peso estatístico do estado superior.
g''	Peso estatístico do estado inferior.

3.1 Mecanismos Físicos Envolvidos na Emissão e Absorção da Radiação

Quando comparado aos sólidos opacos, o comportamento espectral dos gases é consideravelmente mais complexo. A variação das propriedades dos sólidos opacos em relação ao número de onda é relativamente suave. Nos gases, porém, há grandes variações conforme o número de onda, como pode ser visto na Figura 3.1.

Um gás participante é composto por moléculas, átomos, íons ou elétrons livres, que podem assumir diferentes níveis de energia. Em uma molécula, seus átomos formam um sistema dinâmico com modos de vibração e rotação em níveis específicos de energia, vistos na Figura 3.2.

Torna-se conveniente utilizar o fóton como forma de explicar a absorção e a emissão de energia. O fóton é a unidade básica de energia radiante. A emissão de energia é a liberação de fótons, de forma que na absorção de radiação, há a captura de fótons pela molécula ou átomo. Na emissão tem-se a energia da molécula diminuída; na absorção, a energia é aumentada. Esse aumento ou diminuição envolve níveis discretos de energia.

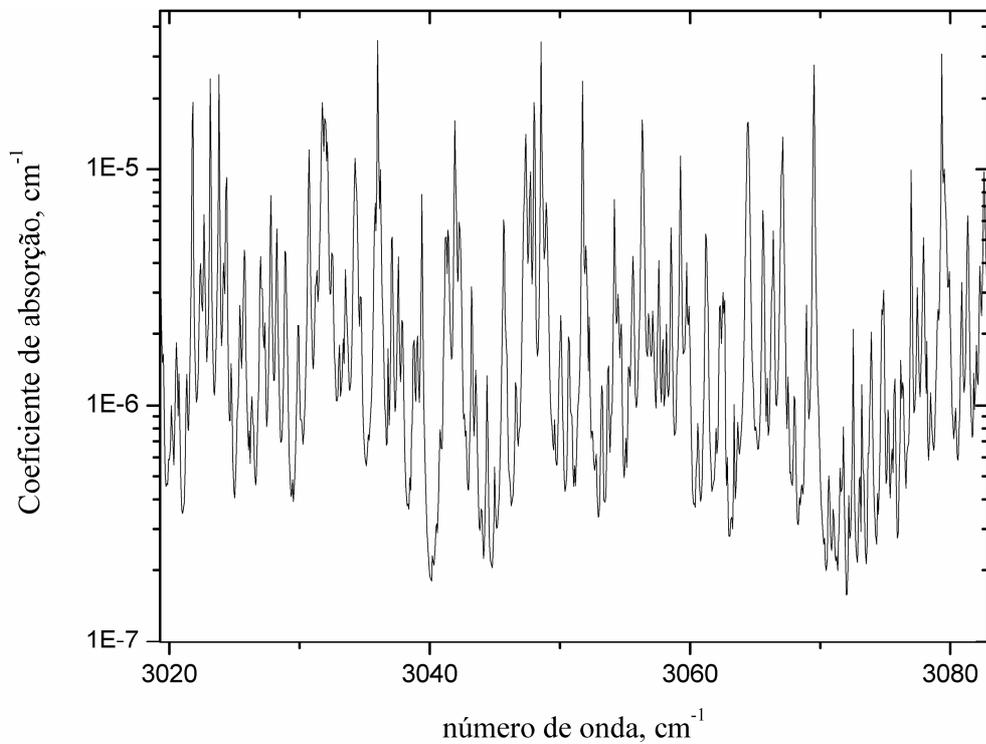


Figura 3.1 – Espectro do coeficiente de absorção para CO_2 para $T = 1000 \text{ K}$ e $p_{\text{CO}_2} = 1 \text{ atm}$.

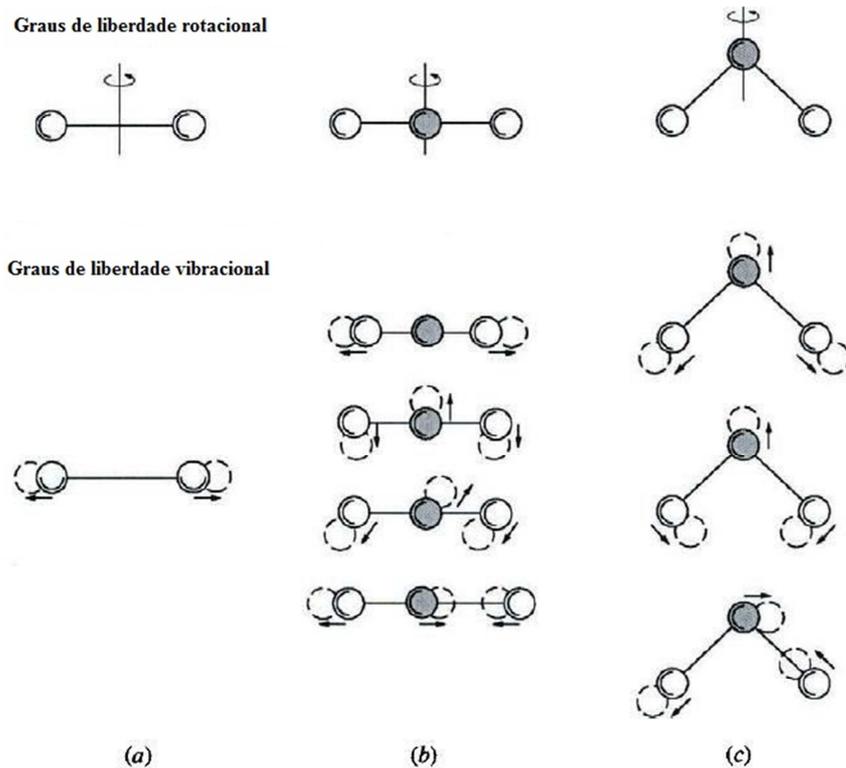


Figura 3.2 – Graus de liberdade rotacional e vibracional para moléculas (a) diatômica (b) triatômico linear e (c) triatômico não linear [Modest 1993].

A magnitude com que ocorre a transição de energia está relacionada à frequência com que ocorre a emissão ou a absorção. A energia de um fóton é dada por $h\nu$, na qual h é a constante de Planck e ν é a frequência da energia do fóton. Como a mudança de estado de energia de um átomo ou molécula envolve níveis discretos, tem-se que a energia é dada por:

$$E_i - E_j = h\nu_{ij} \quad (3.1)$$

na qual E_i e E_j são os níveis de energia que o átomo ou molécula podem assumir e ν_{ij} é a frequência em que ocorre a transição do nível de energia de i para j . Para as condições normalmente encontradas em problemas de radiação térmica em engenharia, esses níveis de energia são fixos entre as transições. Dessa forma, apenas frequências específicas de radiação estarão associadas ao aumento ou redução da energia da molécula ou átomo, o que significa dizer que haverá emissão ou absorção da radiação apenas em determinados números de onda. Como consequência, tem-se um espectro de absorção de radiação com centenas de milhares de picos. Esses picos, que deveriam teoricamente ser representadas por linhas de espessura

infinitesimal, possuem uma espessura finita ocasionada pelo alargamento da banda. Esse assunto será abordado mais adiante.

Os níveis de energia quânticos são dados pela mudança de estado da molécula ou átomo. Esses estados podem ser rotacional, vibracional e eletrônico.

Os estados de rotação e vibração estão sempre acoplados e eles são os mais importantes para cálculos de troca térmica nas temperaturas encontradas em problemas típicos de engenharia, pois se situam no infravermelho. Para cada modo de vibração, existem vários modos de rotação. A Figura 3.3 mostra o diagrama de energia potencial para uma molécula diatômica, indicando os diferentes níveis de energia que a molécula pode assumir. Transições entre níveis de rotação no mesmo estado de vibração envolvem pouca energia, o que significa que baixas frequências de radiação são envolvidas para ocasionar a mudança de estado, sendo importantes nas faixas abaixo do infravermelho. Para transições de níveis de rotação em diferentes níveis de vibração abrange uma quantia maior de energia, o que envolve frequências maiores de radiação. Essas frequências estão situadas próximas ao infravermelho. Para transição vibracional-rotacional de um determinado nível eletrônico para outro nível eletrônico, quantidades maiores de energia estão envolvidas, e conseqüentemente maiores frequências de radiação, envolvendo regiões visíveis do espectro e ultravioleta [Siegel e Howell, 2002].

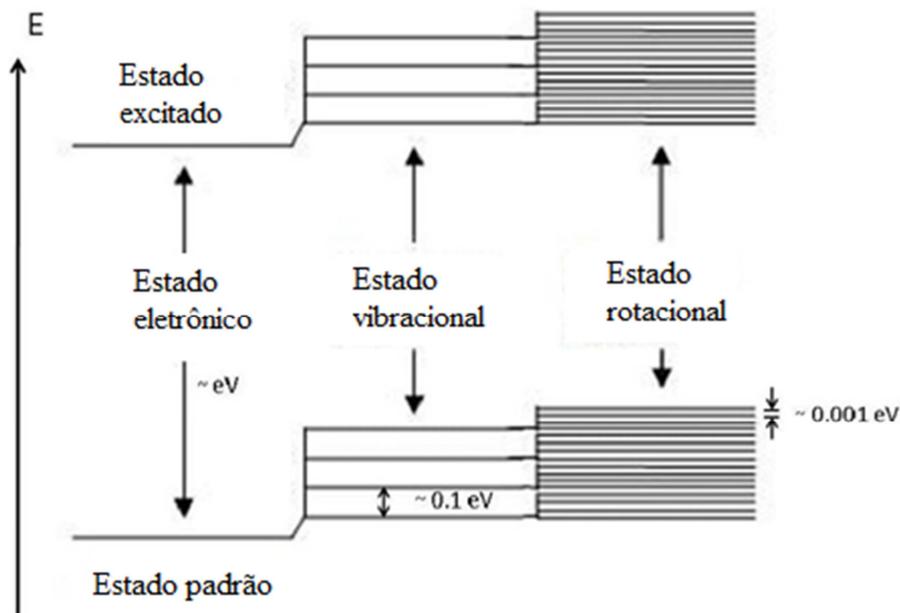


Figura 3.3 – Níveis de energia para uma molécula, mostrando os estados eletrônicos, vibracional e rotacional [adaptado de Lindecrantz, 2010].

3.2 Alargamento Espectral

Verificando-se a equação $E_i - E_j = hv_{ij}$, apenas frequências específicas estariam associadas á emissão ou absorção de radiação, e o espectro deveria ser representado por linhas verticais nos pontos onde ocorreria a emissão e absorção. Essas linhas, chamadas de linhas absorção, deveriam emitir e absorver uma pequena quantidade de energia. Outros efeitos, porém, causam um alargamento dessa linha, podendo dessa forma emitir e absorver energia em regiões em torno da frequência de transição ν_{ij} . Alguns desses mecanismos de alargamento são o natural, Doppler, por colisão e Stark.

Para uma determinada linha de absorção, o mecanismo de alargamento estabelece a *forma da linha*, conforme pode ser mostrado na Figura 3.4. Uma característica importante é a meia largura γ . Ela define a metade da largura da banda na metade de sua altura. Ela serve para melhor descrever a forma da linha e é calculada conforme o mecanismo de alargamento.

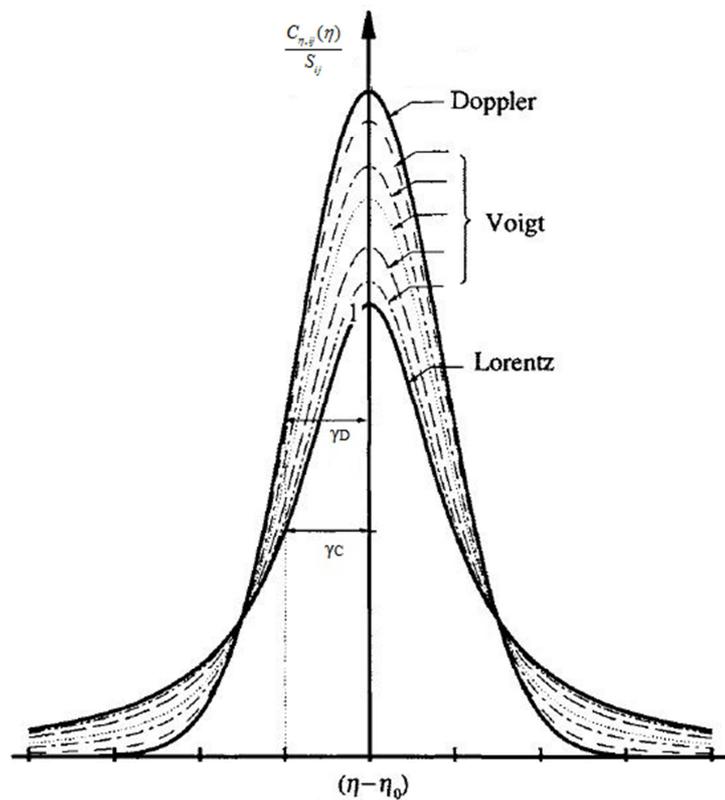


Figura 3.4 – Formas de linha para diversos tipos de alargamento [Modest, 1993].

A intensidade da linha S_{ij} , obtida pelo banco de dados HITEMP 2010, é dada pela integral da seção transversal de absorção, $C_{\eta,ij}$, em relação ao número de onda, sendo calculada pela seguinte equação:

$$S_{ij} = \int_0^{\infty} C_{\eta,ij}(\eta) d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} C_{\eta,ij}(\eta) d(\eta - \eta_{ij}) \quad (3.2)$$

As magnitudes de S_{ij} e de $C_{\eta,ij}(\eta)$ dependem do número de moléculas que estão em transição do nível de energia i para o nível de energia j , e da massa específica do gás. Fazendo-se a razão $C_{\eta,ij}(\eta)/S_{ij}$, tende-se a cancelar o efeito da massa específica na magnitude de $C_{\eta,ij}(\eta)$. Dessa forma é possível observar o efeito da massa específica na mudança da forma da linha, na qual será visto nos fenômenos responsáveis pelo alargamento da linha [Siegel e Howell, 2002].

Alargamento Natural

O cálculo do alargamento natural é dado pela Equação 3.3:

$$\frac{C_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_n/\pi}{\gamma_n^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.3)$$

na qual γ_n é a meia largura para o alargamento natural, S_{ij} é a intensidade de linha e η é o número de onda.

Esse alargamento tem a forma do perfil de Lorentz e é simétrico em torno de η_{ij} . O alargamento natural normalmente é negligenciado em aplicações de engenharia, sendo muito pequeno se comparado aos outros mecanismos de alargamento.

Alargamento Doppler

O cálculo do alargamento Doppler é dado pela seguinte equação:

$$\frac{C_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{1}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left[-(\eta - \eta_{ij})^2 \frac{\ln 2}{\gamma_D^2}\right] \quad (3.4)$$

na qual γ_D é a meia largura para o alargamento Doppler. Esse alargamento ganha importância em altas temperaturas [Siegel e Howell, 2002].

Alargamento Stark

Esse tipo de alargamento acontece na presença de fortes campos elétricos, na qual as moléculas de gases são fortemente perturbadas.

Alargamento por Colisão

O alargamento por colisão tem sua expressão baseada no pelo perfil de Lorentz. Seu cálculo é dado pela seguinte equação:

$$\frac{C_{\eta,ij}(\eta)}{S_{ij}} = \frac{\gamma_c / \pi}{\gamma_c^2 + (\eta - \eta_{ij})^2} \quad (3.5)$$

na qual γ_c é a meia largura para o alargamento por colisão. Uma expressão aproximada para γ_c é dada por:

$$\gamma_c = \frac{1}{2\pi c} \frac{4\sqrt{\pi} D^2 p}{(MkT)^{1/2}} \quad (3.6)$$

na qual D é o diâmetro dos átomos ou moléculas e p é a pressão do gás.

Conforme Siegel e Howell, 2002, dos alargamentos apresentados, o mais importante é o alargamento por colisão, pois ele tem grande influência na região infravermelha, importante em fenômenos de transferência de calor.

3.3 Geração dos Espectros de Seção Transversal de Absorção Espectral

Para um determinado número de onda, gera-se o espectro da seção transversal de absorção somando-se o $C_{\eta,ij}(\eta)$ de todas as transições S_{ij} importantes em torno de $C_{\eta}(\eta)$. Para o banco de dados HITEMP 2010, as transições importantes estão a uma faixa anterior e posterior de linhas em torno de η . Para saber a faixa necessária para convergência, deve-se fazer um estudo de independência em relação ao tamanho da faixa usada.

Dessa forma, calcula-se o coeficiente de absorção pela seguinte equação:

$$C_{\eta}(\eta) = \sum_{\eta-NC}^{\eta+NC} \frac{S_i(T)}{\pi} \frac{\gamma_i}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (3.7)$$

na qual C_{η} é a seção transversal de absorção, S_i é a intensidade da linha para cada linha do banco de dados em um determinado número de onda, η_i , NC é a faixa de dados em torno de η que é lida no banco de dados para cálculo de C_{η} , e γ_i é a meia largura para cada transição, que é calculada da seguinte forma:

$$\gamma_i = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n p_s \gamma_{self,i} + (1 - p_s) \gamma_{ar,i} \quad (3.8)$$

na qual $\gamma_{self,i}$ é a meia largura devido ao alargamento da própria molécula em questão, $\gamma_{ar,i}$ é o alargamento devido ao ar, p_s é a pressão parcial do meio participante, n é o coeficiente de dependência da temperatura e T_{ref} é a temperatura de referência em que está compilado o banco de dados. Os dados γ_{self} , γ_{ar} são fornecidos pelo banco de dados. O valor da pressão parcial da substância deve ser menor ou igual a 1 atm, com pressão total de 1 atm.

Assim, é possível gerar um espectro para os valores de seção transversal de absorção, variando-se η para as regiões de interesse, normalmente entre valores de $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ a $1 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, região importante para a radiação térmica.

O espectro da seção transversal de absorção deve apresentar uma resolução de dezenas de milhares de pontos no eixo das abscissas para que se possam representar os diversos picos de absorção mais importantes de determinada substância. Para determinar o número de pontos, é feito um estudo de independência em relação ao número escolhido.

As Figura 3.5 e 3.6 apresentam os espectros da seção transversal de absorção para as moléculas de CO_2 e H_2O , respectivamente. Ambos os espectros foram calculados na temperatura de 1000 K e na pressão parcial de 0.1 atm.

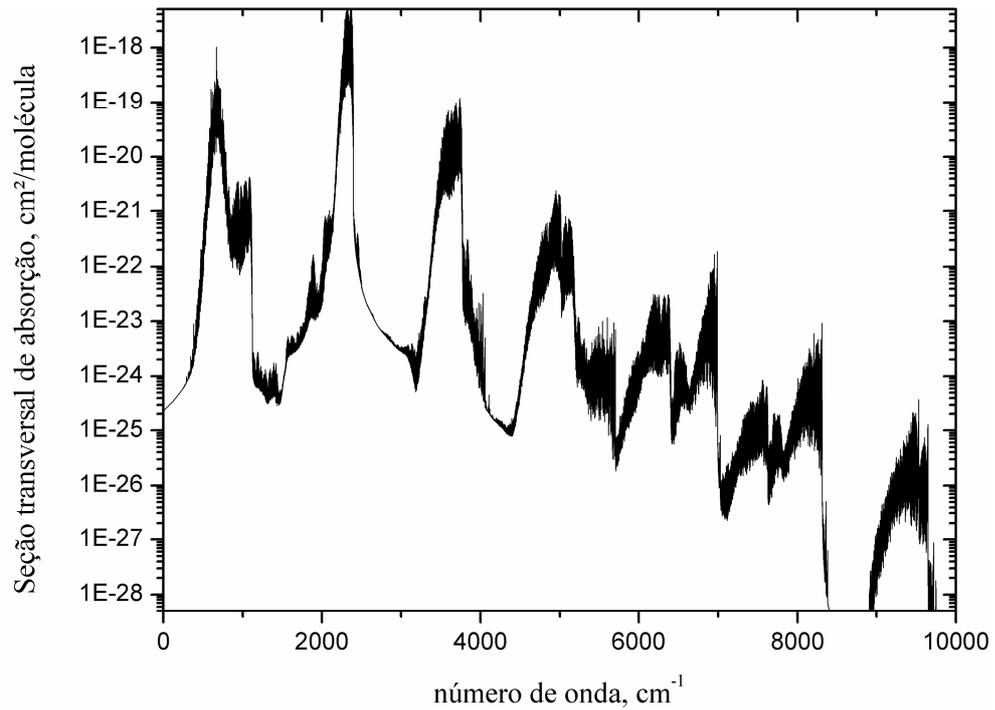


Figura 3.5 – Espectro da seção transversal de absorção do CO₂ na temperatura de 1000 K e pressão parcial de 0,1 atm.

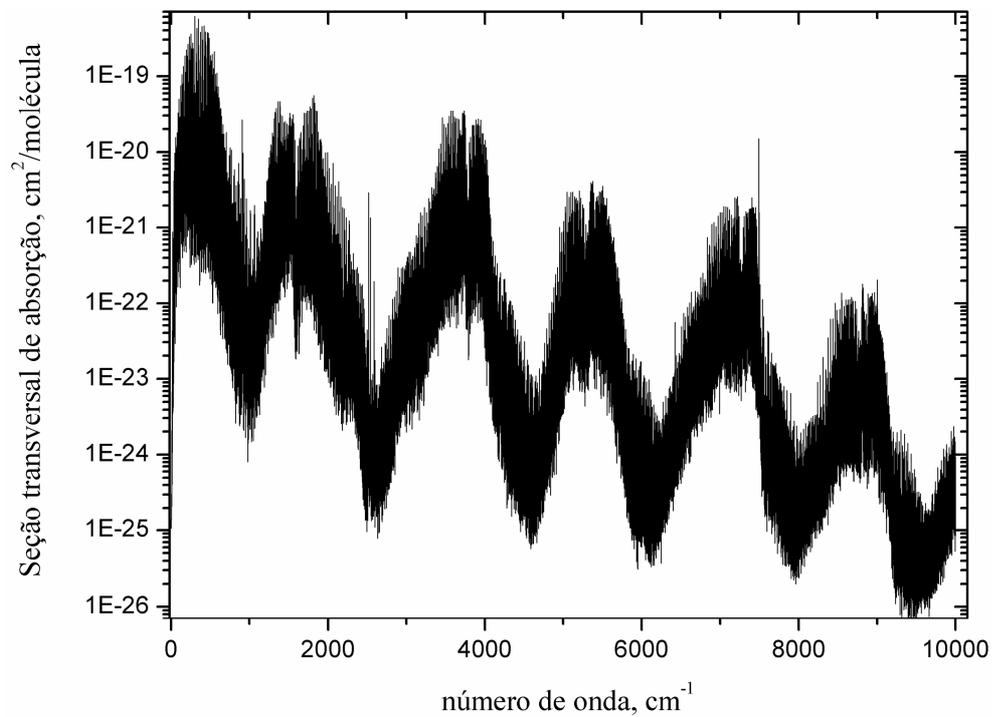


Figura 3.6 – Espectro da seção transversal de absorção do H₂O na temperatura de 1000 K e pressão parcial de 0,1 atm.

Com valores de seção transversal de absorção, obtém-se o coeficiente de absorção por unidade de pressão, em unidades de $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$, da seguinte forma:

$$\kappa_{\eta} = NC_{\eta} \quad (3.9)$$

na qual N é o número de *Loschmidt*, dependente da temperatura, dado pela seguinte equação: [Killinger e Plutov, 2009].

$$N = 2,479 \times 10^{19} \left(\frac{296}{T} \right) \quad (3.10)$$

na qual N tem unidades de moléculas/ $\text{cm}^3 \cdot \text{atm}$ e T é a temperatura em Kelvin. Assim, pode-se obter o coeficiente de absorção pela relação $a_{\eta} = p\kappa_{\eta}$, na qual p é a pressão em que foi obtido κ_{η} .

O coeficiente de absorção a_{η} é obtido para cada gás em separado. No caso de uma mistura, para quantificar o efeito de mais de um gás atuando simultaneamente, tal como CO_2 e H_2O , o coeficiente de absorção total é dado pela soma dos coeficientes de absorção individuais, ou seja:

$$a_{\eta, \text{total}} = p_{\text{CO}_2} \kappa_{\eta, \text{CO}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} \kappa_{\eta, \text{H}_2\text{O}} \quad (3.11)$$

onde $a_{\eta, \text{total}}$ é o coeficiente de absorção total da mistura, em m^{-1} .

3.4 O Efeito da Pressão Sobre o Coeficiente de Absorção Espectral e na Emitância

A pressão parcial da substância tem influência tanto nos valores do coeficiente de absorção espectral quanto nos valores de emitância total. Esse último, por sua vez, influenciado pelo primeiro. Verificando a Equação 2.20, reescrita abaixo, nota-se que quanto maior o produto pS , maior o valor da emitância. O aumento de p ou S para esse caso tem o mesmo efeito, pois se aumenta o número de moléculas participantes em um determinado caminho S .

$$\varepsilon(S) = \pi^0 \frac{\int_{-\infty}^{\infty} i_{\eta,b}(\eta)[1 - \exp(-\kappa_{\eta} pS)] d\eta}{\sigma T^4} \quad (3.12)$$

A mudança de κ_{η} também influencia o valor de emitância. A influência da variação da pressão parcial sobre κ_{η} pode ser vista verificando a dependência desse por C_{η} , e esse último influenciado pela largura de banda γ , conforme pode ser visto na Equação 3.8. A mudança de γ é devido ao aumento no número de colisões entre as moléculas devido ao aumento da pressão. Como C_{η} depende do alargamento, tem-se o espectro da seção transversal de absorção modificado. A Figura 3.7 mostra a comparação do espectro da seção transversal de absorção de H₂O gerado a uma temperatura de 1000 K, com pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm, evidenciando a influência da pressão sobre a seção transversal de absorção. A Figura 3.8 mostra a mesma comparação, porém para CO₂.

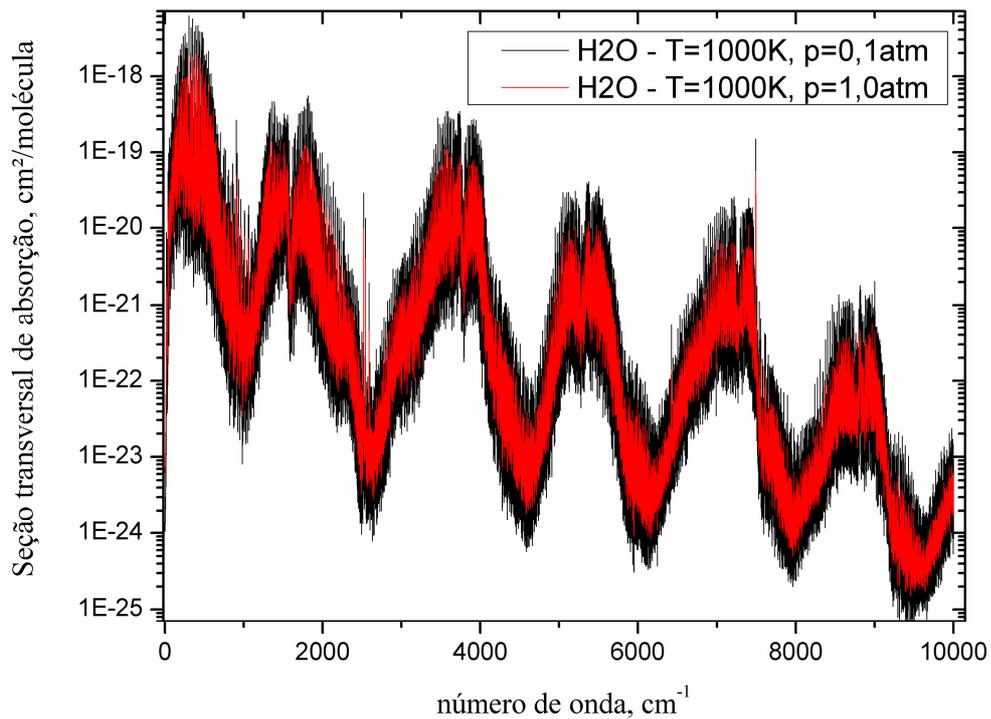


Figura 3.7 – Espectro da seção transversal de absorção do H₂O na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.

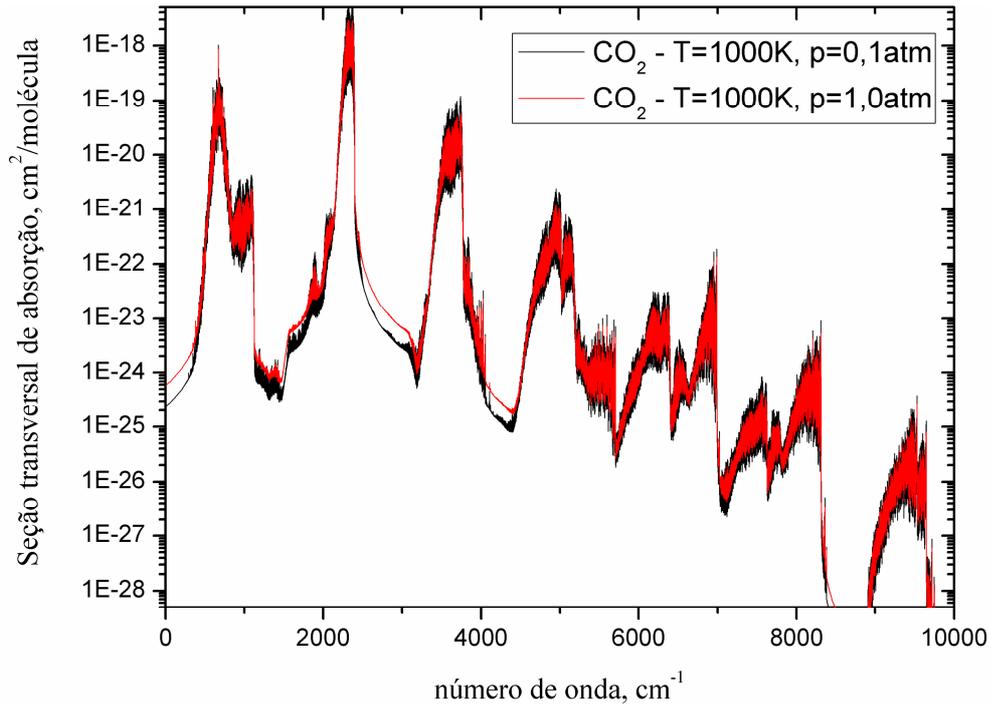


Figura 3.8 – Espectro da seção transversal de absorção do CO_2 na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.

Verifica-se então que a emitância total sofre dois fenômenos distintos quando há a mudança na pressão parcial: o aumento do número de moléculas no caminho a ser percorrido pela radiação e o alargamento da banda devido ao aumento das colisões entre as moléculas.

Pode-se quantificar também a influência da pressão sobre o coeficiente de absorção. Pela Equação 2.12 e Equação 3.9 obtém-se o coeficiente de absorção espectral a partir da seção transversal de absorção, escrita conforme equação abaixo:

$$a_\eta = pNC_\eta \quad (3.13)$$

Assim, obtém-se o gráfico do coeficiente de absorção dado pela Figura 3.9, comparando os espectros gerados para H_2O a uma temperatura de 1000 K, com pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm. Verifica-se que a dependência do espectro de absorção com relação à pressão é acentuada. Esse é um comportamento esperado devido novamente às duas influências da pressão sobre o coeficiente de absorção: o aumento do número de moléculas em um determinado caminho e o aumento na largura da banda devido ao aumento das colisões entre as moléculas. Na Figura 3.10 é feita a mesma comparação para CO_2 .

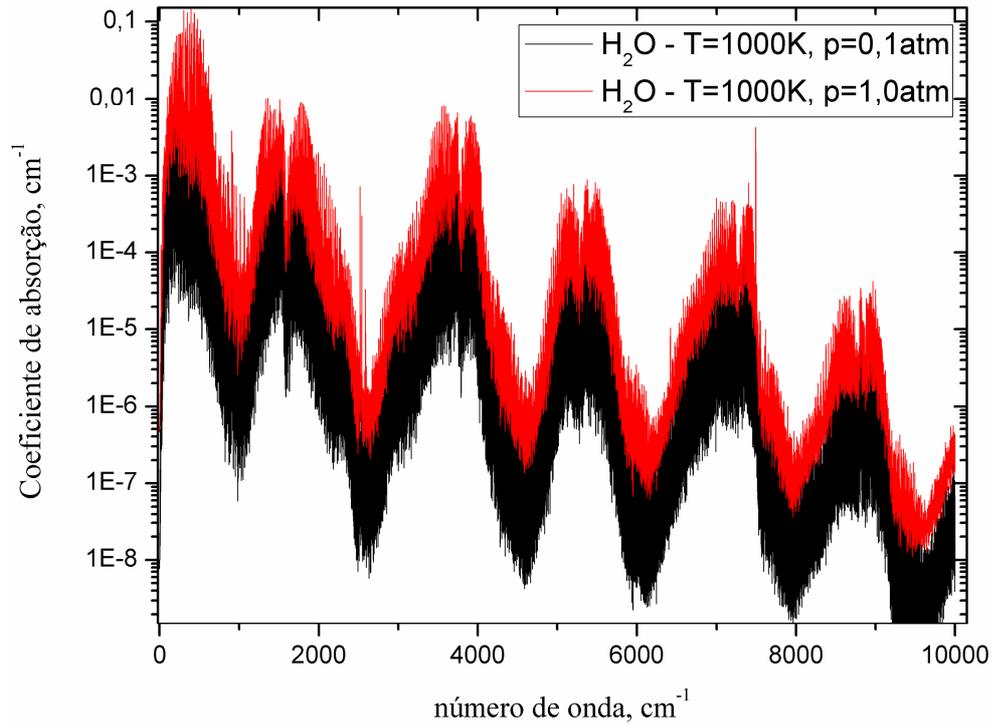


Figura 3.9 – Espectro do coeficiente de absorção do H₂O na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.

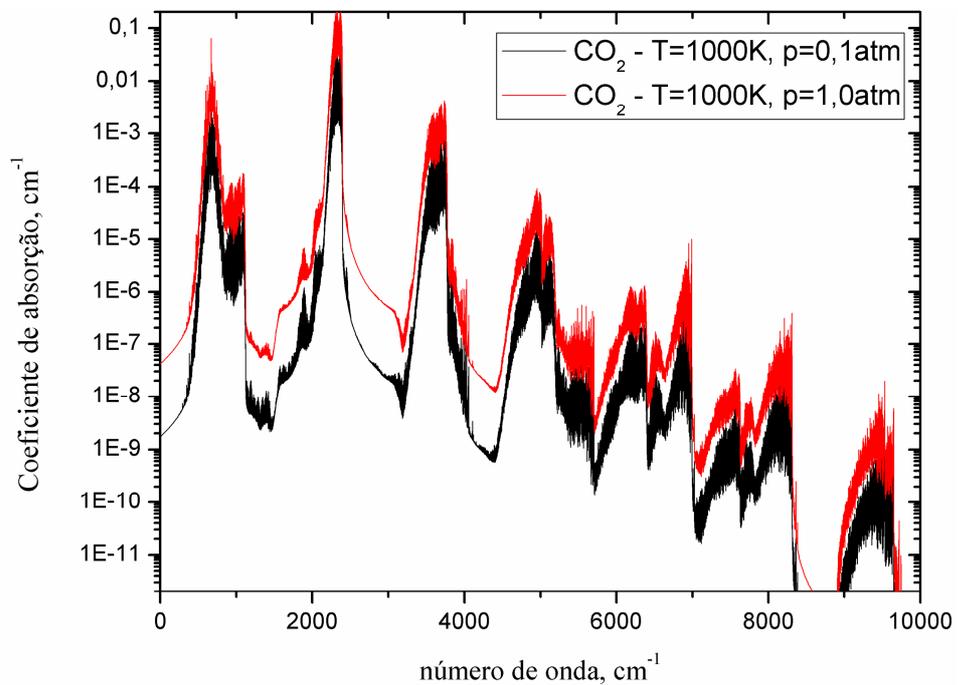


Figura 3.10 – Espectro do coeficiente de absorção do CO₂ na temperatura de 1000 K, na pressões parciais de 0,1 atm e 1,0 atm.

Dessa forma, devem-se utilizar pressões para a geração dos espectros de acordo com a pressão real no meio em que se deseja calcular a troca térmica radiante. Para verificar os limites de pressão, um estudo será apresentado neste trabalho.

3.4.1 O efeito da pressão sobre a emitância total

A fim de mostrar a dependência da emitância total em relação à pressão parcial em que se calcula o espectro de absorção, geraram-se gráficos para emitância total de CO_2 e H_2O em relação à temperatura. Utilizaram-se diversas pressões parciais, porém mantendo-se sempre um mesmo valor de pL . Aumentando-se o valor de p , deve-se diminuir o valor da distância L na mesma proporção, a fim de se comparar todos os resultados para um mesmo produto pL . No presente estudo, adotou-se $pL = 0,1 \text{ atm}\cdot\text{m}$.

Na Figura 3.11 comparam-se os valores obtidos para CO_2 para diferentes pressões parciais. Verifica-se que para pressão parcial de até $0,2 \text{ atm}$, pouco variam os valores, mostrando que o CO_2 tem pouca dependência no valor de p_{CO_2} , desde que se mantenha um mesmo valor de pL . Verifica-se, por outro lado, uma variação importante para $p_{\text{CO}_2} = 1,0 \text{ atm}$, porém pressões parciais nesse patamar não são comumente encontrados em processos de combustão.

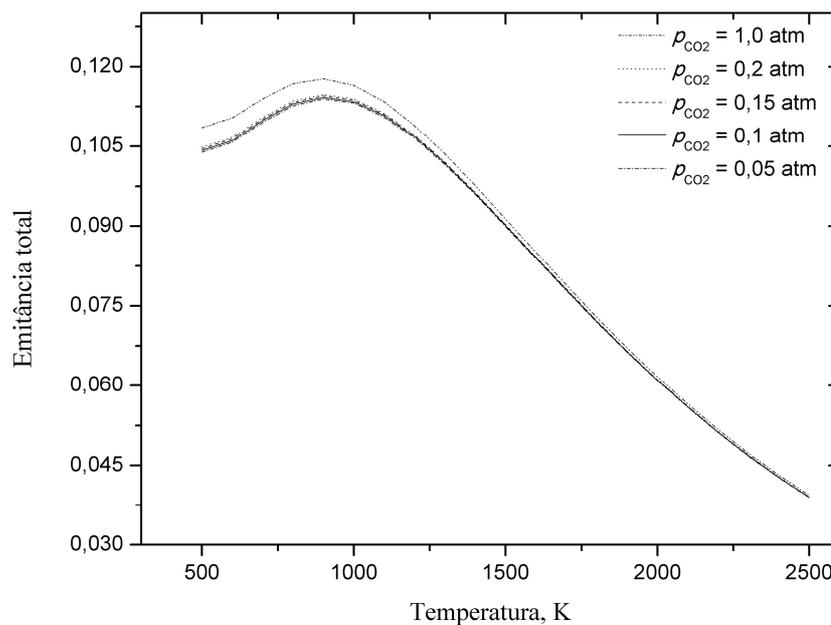


Figura 3.11 – Valores de emitância total para CO_2 calculadas para um $pL = 0,1 \text{ atm}\cdot\text{m}$ e diferentes pressões parciais de CO_2 .

Repetindo-se o mesmo para H_2O , verifica-se na Figura 3.12 a grande variação que há na comparação dos valores para $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1 \text{ atm}$ e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2 \text{ atm}$. Dessa forma, conclui-se a forte dependência da emitância total do H_2O em relação à pressão parcial, mesmo para um valor fixo de pL .

O mesmo estudo é feito para mistura de H_2O com CO_2 . A Figura 3.13 mostra a comparação da influência das pressões parciais sobre o valor da emitância total, mantendo-se a proporção de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ e na Figura 3.14 mantendo-se proporção $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$. Em ambas verifica-se a dependência em relação à pressão parcial, devido à influência do comportamento de H_2O sobre a mistura.

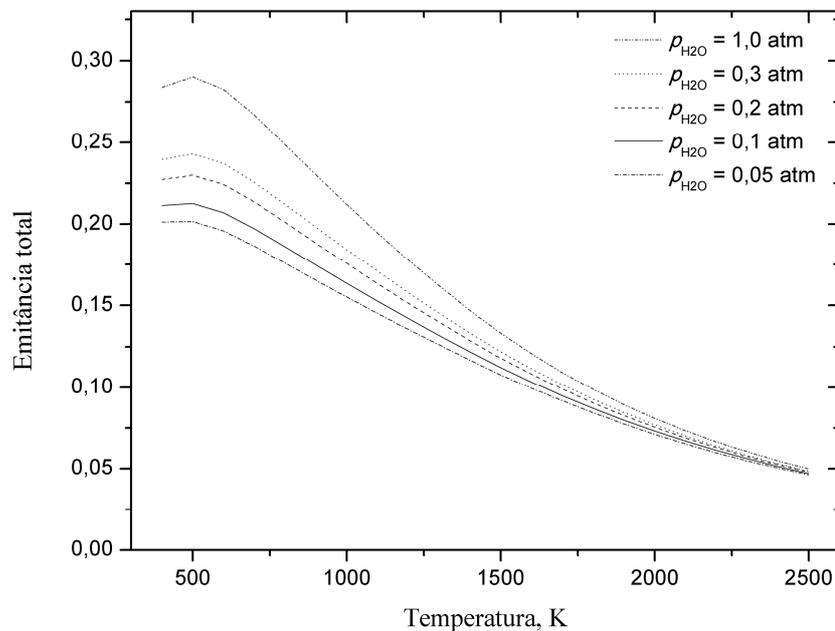


Figura 3.12 – Valores de emitância total para H_2O calculadas para um $pL = 0,1 \text{ atm}\cdot\text{m}$ e diferentes pressões parciais de H_2O .

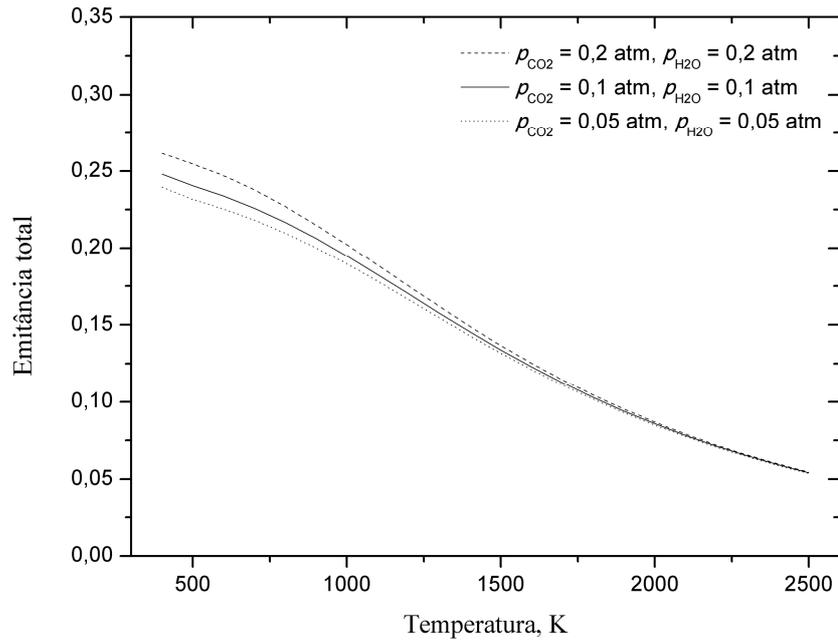


Figura 3.13 – Valores de emitância total para mistura de H₂O e CO₂ na proporção de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, calculadas para uma $pL = 0,1 \text{ atm}\cdot\text{m}$ e diferentes valores de pressões parciais para CO₂ e H₂O.

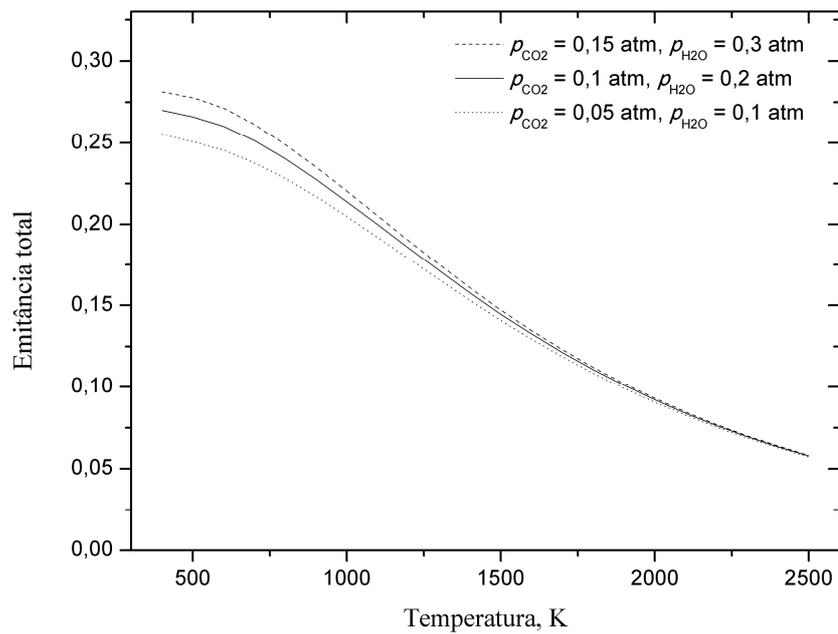


Figura 3.14 – Valores de emitância total para mistura de H₂O e CO₂ na proporção de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, calculadas para uma $pL = 0,1 \text{ atm}\cdot\text{m}$ e diferentes valores de pressões parciais para CO₂ e H₂O.

3.5 O Efeito da Temperatura Sobre o Coeficiente de Absorção

Assim como o espectro de absorção depende da pressão do meio participante, ele depende também da temperatura, como se pode verificar na Equação 3.8 e Equação 3.10. A Figura 3.15 mostra a comparação de dois espectros do coeficiente de absorção de H_2O , ambas a uma pressão parcial de 0,1 atm e temperaturas de 1000 K e 2000 K. A Figura 3.16 mostra a comparação do espectro do coeficiente de absorção do CO_2 nas mesmas condições descritas para H_2O .

No cálculo de C_η , a partir da Equação 3.7 e Equação 3.8, a intensidade da linha S_i também depende da temperatura em que se encontra o meio. Dessa forma, ao utilizar temperaturas diferentes da temperatura em que está compilado o banco de dados, deve-se fazer a correção da intensidade da linha. Essa correção é descrita a seguir.

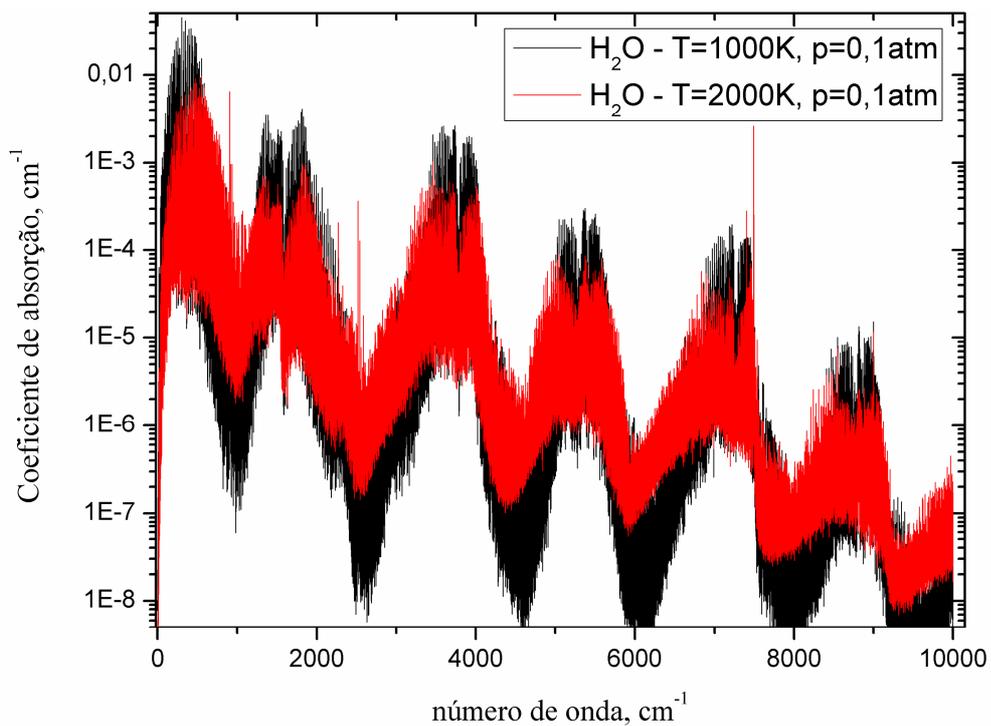


Figura 3.15 – Espectro do coeficiente de absorção do H_2O na pressão parcial de 0,1 atm, e temperaturas de 1000 K e 2000 K.

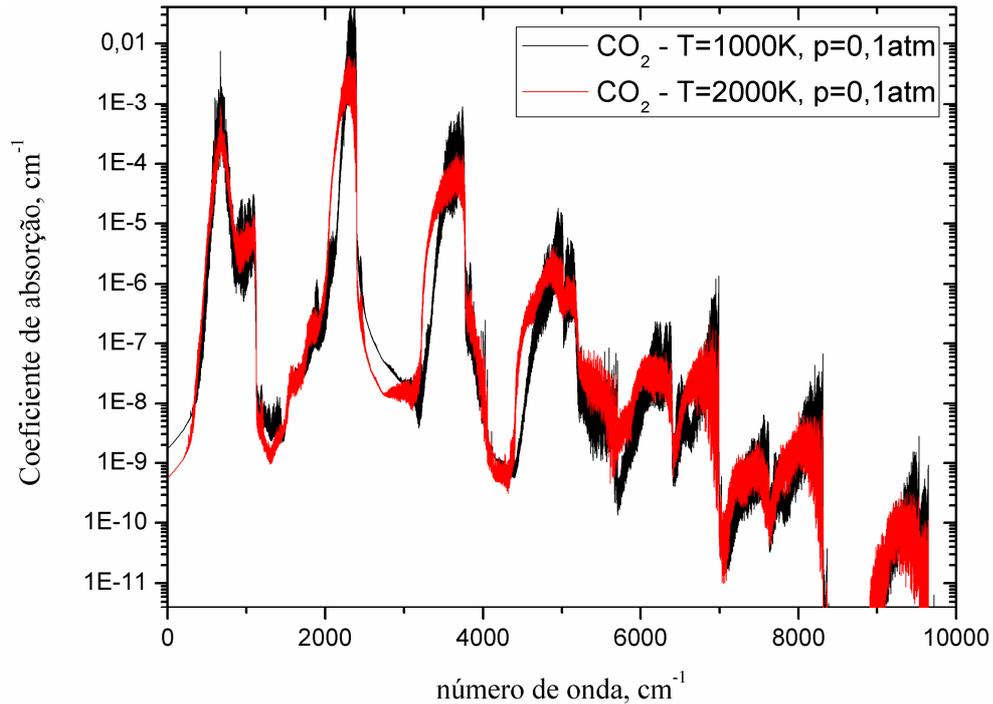


Figura 3.16 – Espectro do coeficiente de absorção do CO₂ na pressão parcial de 0,1 atm, e temperaturas de 1000 K e 2000 K.

3.6 Correção da Intensidade da Linha

Apesar do banco de dados do HITEMP 2010 ser obtido na temperatura de 1000 K, a intensidade da linha S_i é convertida para temperatura de referência $T_{ref} = 296$ K de modo que o banco de dados fique padronizado com outros bancos de dados, tais como HITRAN. Dessa forma, para cálculos envolvendo temperaturas diferentes da temperatura de referência, deve-se aplicar uma conversão, dada pela seguinte Equação 3.14:

$$S_i(T) = S_i(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \frac{\exp(-C_2 E_\eta / T)}{\exp(-C_2 E_\eta / T_{ref})} \frac{[1 - \exp(-C_2 \delta_i / T)]}{[1 - \exp(-C_2 \delta_i / T_{ref})]} \quad (3.14)$$

na qual E_η é a energia da molécula no estado inferior (cm^{-1}) e δ_i é a diferença de energia entre o estado inicial e final [Rothman et al., 2010]. $Q(T)$ é a soma total de partições internas e ela depende exclusivamente da molécula em questão, do seu isótopo e de sua temperatura. Ela é dada pela soma de todos os estados de energia, tais eles vibracional, rotacional, torsional, elétrico [Fisher et al., 2003].

A soma total das partições internas pode ser obtida pela rotina na linguagem de programação Fortran, disponibilizada por Gamache et al., 1990, em seu endereço eletrônico de internet http://faculty.uml.edu/robert_gamache. A rotina possui valores de Q já calculados para diversas moléculas em seus diferentes isótopos. Ela também leva em conta a abundância de cada isótopo na composição da substância. Os valores de Q estão calculados em intervalos de temperatura de 25 K. Necessitando desse valor em uma temperatura diferente daquelas obtidas por Gamache, uma interpolação Lagrangiana de ordem quatro é feita com os valores já obtidos. A única limitação das rotinas disponibilizadas é que elas devem ser usadas para temperaturas maiores de 70 K e menores de 3000 K, faixa suficiente para o desenvolvimento desse trabalho.

4 MÉTODOS PARA INTEGRAÇÃO ESPECTRAL DA RTE

4.1 O Método Linha-For-Linha

O método LBL resolve a equação do transporte radiante considerando toda a variação espectral do coeficiente de absorção para diferentes temperaturas e concentrações encontradas nas misturas de gases resultantes da combustão. Dessa forma, a equação a ser resolvida para cada direção S , considerando um meio que não espalha, tem a seguinte forma:

$$\frac{\partial i_{\eta}}{\partial S} = -\kappa_{\eta} i_{\eta} + \kappa_{\eta} i_{\eta,b} \quad (4.1)$$

na qual $i_{\eta,b}$ é a emissão do corpo negro que é obtida por:

$$i_{\eta,b} = \frac{2C_1 \eta^3}{e^{C_2 \eta/T} - 1} \quad (4.2)$$

Com a solução do transporte radiante é possível obter o divergente do fluxo radiante, pela seguinte equação:

$$\nabla \cdot \vec{q} = \int_0^{4\pi} \int_0^{\infty} (-\kappa_{\eta} i_{\eta} + \kappa_{\eta} i_{\eta,b}) d\eta d\omega \quad (4.3)$$

Este método é o que fornece os resultados mais precisos e que são usados como solução *benchmark* na validação de modelos de gases, como por exemplo, o modelo WSGG.

4.2 O Método da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas

O modelo WSGG vem a substituir a integração das propriedades no espectro pelo somatório de um pequeno número de gases cinza a fim de simular as propriedades de gases reais. Dessa forma, divide-se o espectro em regiões onde o coeficiente de absorção pode ser considerado constante. A representação do meio com três gases cinza e com janelas transparentes, onde o coeficiente de absorção pode ser considerado zero para aquelas regiões,

é mostrado na Figura 4.1. Esse método foi introduzido por Hottel e Sarofin, 1967. A partir deste modelo, pode-se demonstrar que a integração da emitância espectral conduz ao seguinte resultado para a emitância total ao longo de um caminho S :

$$\varepsilon(pS) = \sum_{i=1}^I a_i(T) [1 - \exp(-k_i pS)] \quad (4.4)$$

na qual k_i é o coeficiente de absorção e a_i é o correspondente coeficiente de ponderação para o i -ésimo gás cinza. Esse último é dependente apenas da temperatura do gás. Fisicamente, o fator de ponderação a_i corresponde à fração de energia de um corpo negro na região do espectro correspondente ao coeficiente de absorção do gás cinza k_i .

Smith et al., 1983, propôs que os coeficientes de ponderação a_i fossem representados por um polinômio, da seguinte forma:

$$a_i(T) = \sum_{j=1}^J b_{i,j} T^{j-1} \quad (4.5)$$

na qual $b_{i,j}$ corresponde aos coeficientes polinomiais. Para I gases cinza e ordem de polinômio $J-1$, tem-se $I(J+1)$ coeficientes para serem determinados.

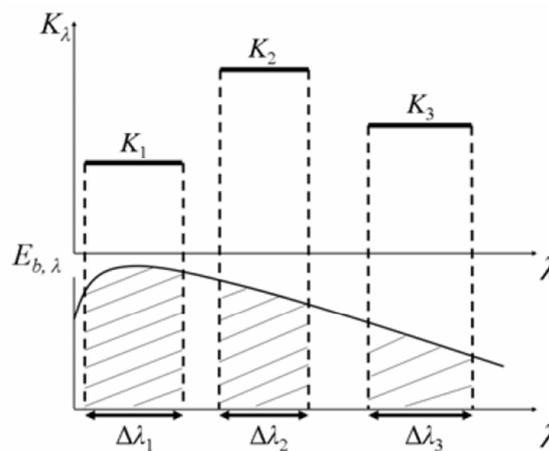


Figura 4.1 – Gráfico representando um meio participante composto por três gases cinza para o modelo WSGG [Galarça et al., 2008].

Smith et al., 1983, obteve coeficientes polinomiais para ajustar valores de emitância total de mistura gasosa de vapor de água e dióxido de carbono para temperatura de 600 K à temperatura de 2400 K e produto de pressão parcial pelo caminho de 0.001 atm·m até 10 atm·m. Denison e Webb, 1993b mostraram que o método WSGG pode ser usado na equação da transferência radiante como mostrado na Equação 4.6.

$$\frac{di_i}{dS} = \kappa_i \left(a_i \frac{\sigma T^4(s)}{\pi} - i_i(s) \right) \quad (4.6)$$

Com sua solução, é possível obter a o divergente do fluxo de calor com o método WSGG similarmente como se obtém através do método LBL.

5 METODOLOGIA

Para a obtenção dos coeficientes WSGG, primeiramente são gerados os espectros de seção transversal de absorção. Para geração desses é utilizada a linguagem de programação Fortran, com a formulação descrita nos fundamentos nesse texto. São gerados espectros para 22 temperaturas e para diferentes pressões parciais, no total 3, totalizando 66 espectros que darão origem aos valores de emitância total, após feita a mistura dos componentes conforme o produto de combustão desejado. Para cálculo da emitância total, é feita a integração em todo esse espectro, para diversos produtos de comprimento pelo trajeto, também utilizando a linguagem de programação Fortran. Após esse passo, os valores de emitância total são informados a um software comercial, na qual se faz um *fitting* com a equação WSGG, gerando os coeficientes da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas. Com esses coeficientes são obtidas diversas soluções, que são comparadas com a solução *Benchmark* LBL. Os passos descritos nessa seção estão melhores detalhados nas seções subsequentes.

5.1 Convergência nos Valores de Seção Transversal de Absorção

Um passo necessário na solução é a verificação da convergência nos valores de emitância total calculados a partir da integração das linhas de absorção. As variáveis que podem afetar o resultado são a faixa de linhas lidas no banco de dados, NL , e o número de pontos usados na abscissa dos espectros de seção transversal de absorção, NP . Esse último define a resolução do espectro gerado, na qual tem em sua abscissa o número de onda, η . Para o cálculo do valor da seção transversal de absorção em um determinado número de onda η e para um determinado valor de NL , são lidas todas as linhas do banco de dados compreendidas no intervalo $\eta - NL$ e $\eta + NL$.

O estudo de convergência é feito para cada substância individualmente, no caso, CO_2 e H_2O . São utilizados também valores intermediários aos que serão utilizados nesse trabalho quanto às temperaturas e pressões. Dessa forma, escolheu-se $T = 1500 \text{ K}$ e $p_s = 0,5 \text{ atm}$. Para cálculo da emitância a partir da seção transversal de absorção, utilizou-se um valor de $pL = 3.0 \text{ atm}\cdot\text{m}$.

Para convergência em relação a NL , utiliza-se um valor sabidamente elevado de NP igual a 500.000, já que nesse ponto ainda não se sabe o valor necessário para a convergência

em relação a NP . Como critério de convergência, adota-se um erro percentual menor que 0,2%, comparado ao valor de emitância total obtido a o valor de NL anterior.

Para CO_2 , utilizaram-se valores de NL que variam de 50 cm^{-1} a 1400 cm^{-1} . Os valores de emitância obtidos são mostrados na Figura 5.1. A partir dela, verifica-se que os valores convergem com valor de NL igual a 800 cm^{-1} . Comparando com o valor obtido para $NL = 1400\text{ cm}^{-1}$, obtém-se um erro percentual de 0,13%.

Para H_2O , utilizaram-se valores de NL que variam de 10 cm^{-1} a 100 cm^{-1} . Os valores de emitância obtidos são mostrados na Figura 5.2. Verifica-se que com $NL = 40\text{ cm}^{-1}$ já é possível obter bons valores de emitância total, com erro percentual de 0,06%, quando comparado ao valor de emitância calculado para $NL = 100\text{ cm}^{-1}$.

A explicação de NL ser maior para a molécula de CO_2 , quando comparado a H_2O , é devido à maior quantidade de número de linhas de transição existentes no banco de dados para a molécula de H_2O , impactando uma maior resolução. Dessa forma, para um determinado valor de NL , uma maior quantidade de linhas é lida no banco de dados do H_2O , quando comparado à quantidade de linhas que seriam lidas no banco de dados do CO_2 .

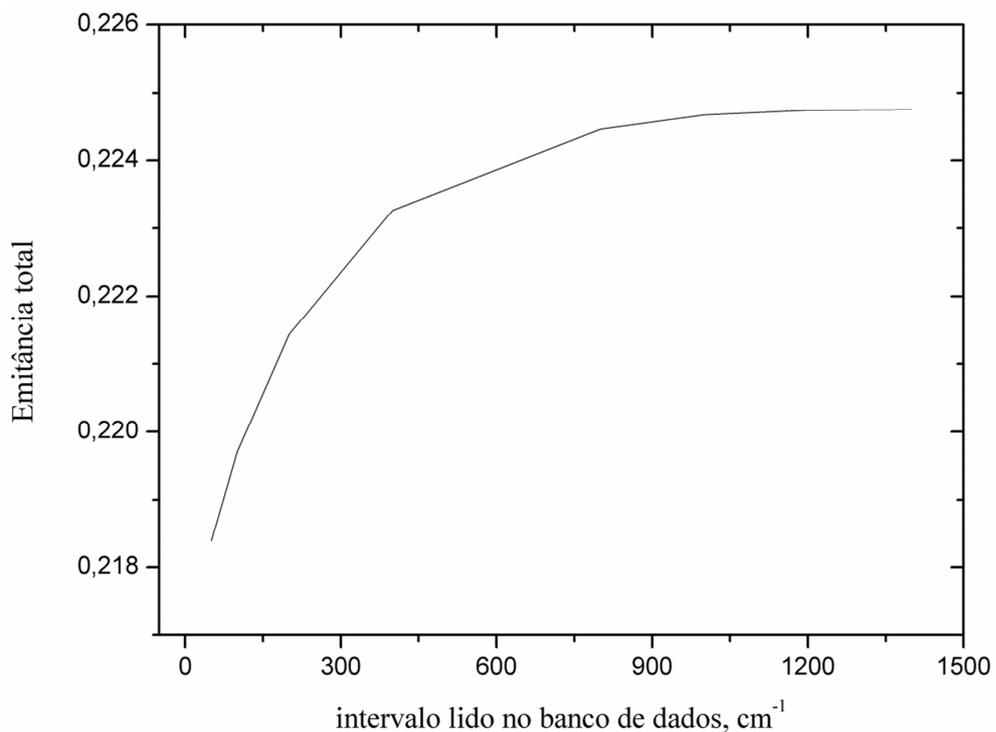


Figura 5.1 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para CO_2 em relação NL , para temperatura $T = 1500\text{ K}$, $p = 0,5\text{ atm}$, $pL = 3\text{ atm.m}$ e $NP = 500.000$.

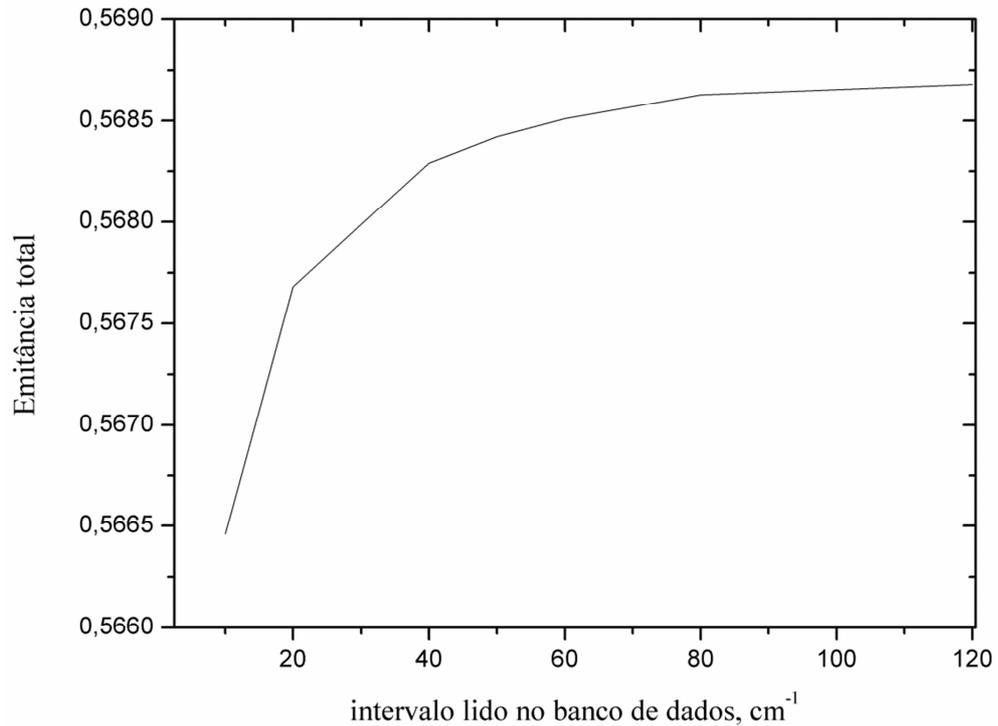


Figura 5.2 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para H₂O em relação NL , para temperatura $T = 1500$ K, $p = 0,5$ atm, $pL = 3$ atm.m e $NP = 500.000$.

Para verificação da convergência em relação à NP , geraram-se os espectros com os valores obtidos de NL na etapa anterior. Os valores de emitância obtidos para CO₂ e H₂O são mostrados na Figura 5.3 e Figura 5.4, respectivamente. Como critério de convergência, adota-se um erro percentual menor que 0,2%, comparado ao valor de emitância total obtido a o valor de NP anterior.

Para CO₂, verifica-se que um valor de $NP = 150.000$ está satisfatório. Comparando o valor da emitância nesse ponto com o obtido para $NP = 400.000$, verifica-se um erro percentual de apenas 0,05%. Para H₂O, calcula-se o erro para os mesmos valores de NP usados para CO₂. Verifica-se assim um erro de 0,09% para H₂O, que pode ser considerado um erro pequeno. Com isso, para uniformização dos espectros que serão obtidos para a obtenção das correlações, utilizam-se $NP = 150.000$, tanto para CO₂ quanto para H₂O.

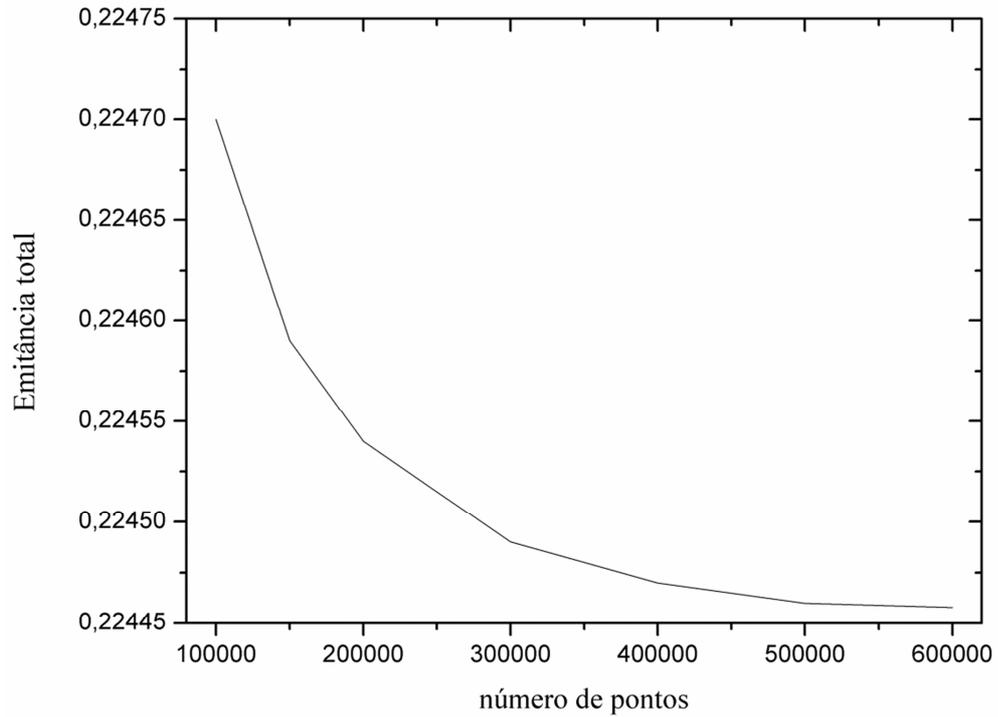


Figura 5.3 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para CO₂ em relação a NP , para temperatura $T = 1500$ K, $pL = 3$ atm·m e $NL = 800$ cm⁻¹.

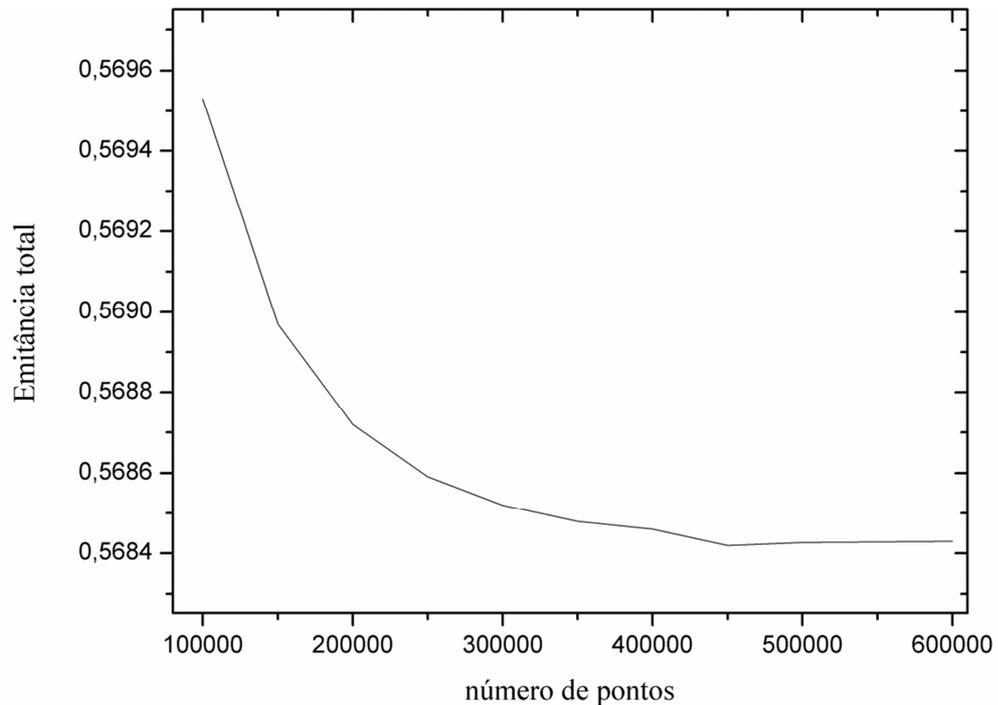


Figura 5.4 – Gráfico de convergência do valor da emitância total para H₂O em relação a NP , para temperatura $T = 1500$ K, $pL = 3$ atm·m e $NL = 40$ cm⁻¹.

5.2 Obtenção dos Espectros de Absortância

Dada a verificação da convergência nos valores de emitância tanto em relação a NP quanto a NL , para cada pressão parcial de interesse, são obtidos os espectros das linhas de absorção nas temperaturas de 400 K a 2500 K, com intervalos de temperatura de 100 K, totalizando 22 espectros. Para CO_2 , são gerados espectros para $p_{CO_2} = 0,1$ atm. Para H_2O , $p_{H_2O} = 0,1$ atm e $p_{H_2O} = 0,2$ atm. Para cada temperatura, faz-se a mistura de substância: para uma proporção de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, utilizam-se os espectros obtidos a $p_s = 0,1$ atm tanto para CO_2 quanto para H_2O e uma pressão parcial de 0,8 atm de N_2 , que é transparente a radiação térmica, e para uma proporção de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ utilizam-se os espectros obtidos para $p_{H_2O} = 0,2$ atm e $p_{CO_2} = 0,1$ atm e uma pressão parcial de 0,7 atm de N_2 . Dessa forma, as misturas possuem uma pressão total de 1 atm, pressões comumente usadas em câmaras de combustão de caldeiras e fornos.

Para fins de avaliação das correlações do modelo para posterior uso em pressões distintas das apresentadas acima, geram-se também espectros com outras pressões parciais em torno das pressões em que as correlações serão geradas. Dessa forma, geraram-se os espectros para se obter uma proporção de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, com mistura de H_2O e CO_2 nas pressões parciais de $p_{H_2O} = 0,05$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm, e também para a mistura de $p_{H_2O} = 2,0$ atm e $p_{CO_2} = 2,0$ atm. Para uma proporção de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, consideram-se as misturas de H_2O e CO_2 com pressões parciais de $p_{H_2O} = 0,1$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm, e também para a mistura de $p_{H_2O} = 0,3$ atm e $p_{CO_2} = 0,15$ atm.

5.3 Determinação dos Coeficientes da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas

Para geração dos coeficientes, calcula-se primeiramente a emitância para uma determinada mistura, para cada temperatura e valores de pL . Dessa forma, para uma determinada mistura, calcularam-se os 24 valores de emitância para pL de 0,0001 atm·m a 10 atm·m, com 22 valores intermediários de temperatura, totalizando, para cada mistura, 528 valores de emitância.

Para obter os coeficientes de absorção e os fatores de ponderação dependente da temperatura, Smith et al., 1982, empregara a técnica de Fletcher-Powell para ajustá-los, a partir do modelo de banda larga exponencial. Nesse trabalho é usado o método de regressão múltipla não linear de Levenberg-Marquardt para obtenção dos fatores de ponderação e

coeficiente de absorção a partir de dados já calculados de emitância através da Equação 3.12 [Levenberg, 1944] e [Marquardt, 1963].

O método de Levenberg-Marquardt é usado primeiramente para ajustar os coeficientes de absorção. Para usá-lo, é necessário manipular a equação do método WSGG, que é reescrita abaixo:

$$\varepsilon(pL) = \sum_{i=1}^4 a_i(T) [1 - \exp(-k_i pL)] \quad (5.1)$$

Smith et al., 1982, consideraram três gases cinzas para representar o espectro ao longo do número de onda. O motivo pelo qual poucos gases cinza foram utilizados se explica devido ao fato da simplicidade de cálculo, uma vez que mais gases cinzas deixaria o cálculo mais trabalhoso. Nesse trabalho considera-se quatro gases cinzas, uma vez que, com a disponibilidade de recursos computacionais, esse fator não torna-se preocupante.

Aplicando-se o somatório nos dois lados da equação em relação aos valores de temperaturas em que foram obtidos os valores de emitância total, e manipulando os somatórios no lado direito da equação, tem-se:

$$\sum_{T=400K}^{2500K} \varepsilon(pL) = \sum_{i=1}^4 \left\{ \left[\sum_{T=400K}^{2500K} a_i(T) \right] [1 - \exp(-k_i pL)] \right\} \quad (5.2)$$

Assume-se nesse caso que o coeficiente de absorção por unidade de pressão, k_i , é independente da temperatura, que é uma das premissas fundamentais do modelo WSGG:

Desta forma, no lado esquerdo da equação, para um valor constante de pL , soma-se todos os valores de emitância total em todas as temperaturas. No lado direito da equação ter-se-á como incógnita os valores de k_i e os valores do somatório, em todas as temperaturas, de $a_i(T)$. Reescrevendo a equação abaixo para exemplificar, tem-se:

$$\sum_{T=400K}^{2500K} \varepsilon(pL) = \sum_{i=1}^4 \left\{ \left[\sum_{T=400K}^{2500K} a_i(T) \right] [1 - e^{-k_i pL}] \right\} \quad (5.3)$$

$$\sum_{T=400K}^{2500K} \varepsilon(pL) = \left[\sum_{T=400K}^{2500K} a_1(T) \right] \left[1 - e^{-k_1 pL} \right] + \dots + \left[\sum_{T=400K}^{2500K} a_4(T) \right] \left[1 - e^{-k_4 pL} \right] \quad (5.4)$$

Aplica-se esse somatório para diversos valores constantes de pL , obtendo-se assim diversas equações para serem ajustadas pelo método de Levenberg-Marquardt. Nesse trabalho foram utilizados 24 valores constantes de pL , obtendo-se assim, 24 equações.

Para facilitar a obtenção das correlações, foi utilizado um software comercial com a ferramenta de relação de fatores múltiplos através de regressão não linear. No software deve-se entrar com os valores da soma das emitâncias e os valores de pL em que as mesmas foram obtidas, além de informar ao programa a equação em que se queira ajustar os valores de k_i , representado pelo lado direito da Equação 5.3 e reescrita abaixo na seguinte forma:

$$A_1(1 - \exp(-k_1 pL)) + \dots + A_4(1 - \exp(-k_4 pL)) \quad (5.5)$$

na qual A_1 a A_4 são os valores do somatório de $a_i(T)$, em todas as temperaturas, para os quatro gases cinzas, e k_i o valor do coeficiente de absorção desejado. Os valores de A_1 a A_4 não terão utilidade nesse trabalho.

Após determinados os coeficientes de absorção, usam-se os valores de k_i obtidos para a determinação dos valores de ponderação $a_i(T)$ do modelo WSGG. Para isso, devem ser informados ao software, para uma determinada temperatura, os valores de emitância total e seu respectivo valor de pL . Deve-se informar também a equação a ser ajustada, Equação 5.3. Reescrevendo o lado direito dela tem-se:

$$a_1(1 - \exp(-k_1 pL)) + \dots + a_4(1 - \exp(-k_4 pL)) \quad (5.6)$$

sendo que os valores de k_i já foram determinados no passo anterior. Dessa forma, obtêm-se os valores de $a_i(T)$, para cada temperatura e para cada i gás cinza.

Com os valores de $a_i(T)$ obtidos, faz-se um ajuste polinomial de ordem 4 em relação a temperatura, para cada i gás cinza. Dessa forma, são determinados cinco coeficientes polinomiais para cada gás cinza.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir da metodologia mostrada, obtiveram-se os valores dos coeficientes de absorção por unidade de pressão, k_i , e os coeficientes polinomiais, $b_{i,j}$. A Tabela 6.1 – mostra os valores dos coeficientes para soma-ponderada-de-gases-cinza para a proporção de pressão parcial $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$. A Tabela 6.2 mostra os coeficientes para a proporção de pressão parcial $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

Tabela 6.1 – Coeficientes para WSGG para mistura de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$.

i	k_i (atm·m) ⁻¹	$b_{i,1}$	$b_{i,2}$ (K ⁻¹)	$b_{i,3}$ (K ⁻²)	$b_{i,4}$ (K ⁻³)	$b_{i,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,187	7,197E-02	8,724E-04	-9,690E-07	4,651E-10	-7,917E-14
2	1,723	1,107E-01	3,397E-04	-2,467E-07	4,647E-11	-1,039E-15
3	12,484	2,091E-01	-6,423E-05	-3,200E-08	1,718E-11	-2,105E-15
4	144,938	7,092E-02	6,586E-05	-1,278E-07	5,577E-11	-7,709E-15

Tabela 6.2 – Coeficientes para WSGG para mistura de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

i	k_i (atm·m) ⁻¹	$b_{i,1}$	$b_{i,2}$ (K ⁻¹)	$b_{i,3}$ (K ⁻²)	$b_{i,4}$ (K ⁻³)	$b_{i,5}$ (K ⁻⁴)
1	0,192	5,617E-02	7,844E-04	-8,563E-07	4,246E-10	-7,440E-14
2	1,719	1,426E-01	1,795E-04	-1,077E-08	-6,971E-11	1,774E-14
3	11,370	1,362E-01	2,574E-04	-3,711E-07	1,575E-10	-2,267E-14
4	111,016	1,222E-01	-2,327E-05	-7,492E-08	4,275E-11	-6,608E-15

Para comparação dos valores de emitância que são obtidos pelo método WSGG com os valores *benchmark* de emitância total, obtidos nesse trabalho, faz-se a plotagem dos resultados. A Figura 6.1 mostra a comparação para uma mistura $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$. A Figura 6.2 mostra essa mesma comparação para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

Para valores abaixo de 10 atm·m, verifica-se uma ótima concordância entre os valores de emitância total obtidos através do método WSGG com os valores *benchmark*. Para valores de pL igual a 10 atm·m verifica-se uma divergência visível nos valores ajustados com os valores exatos, tanto para o caso $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, quanto para o caso $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$. Porém, considerando-se uma pressão parcial de mistura de H₂O e CO₂ de 0,2 atm e 0,3 atm, para o primeiro e segundo caso, respectivamente, ter-se-ia um comprimento L de 50 m e 33,33 m, respectivamente. Como essas dimensões dificilmente são alcançadas em câmaras de combustão, o desvio significativo de ajuste verificado no gráfico terá pouca influência nas resoluções de problemas de engenharia utilizando o método WSGG.

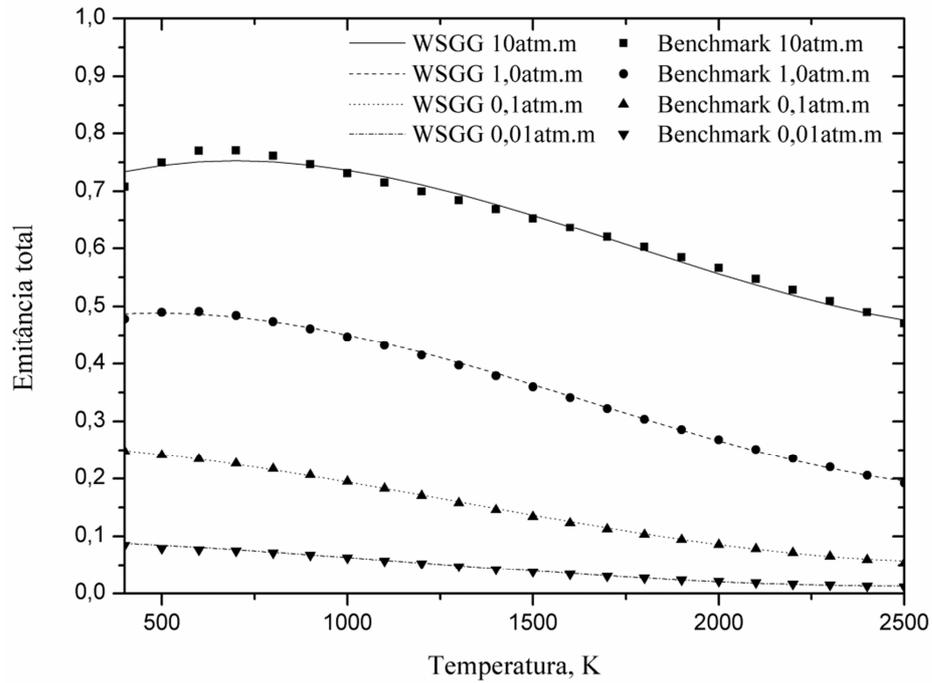


Figura 6.1 – Comparação dos valores de emitância para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$.

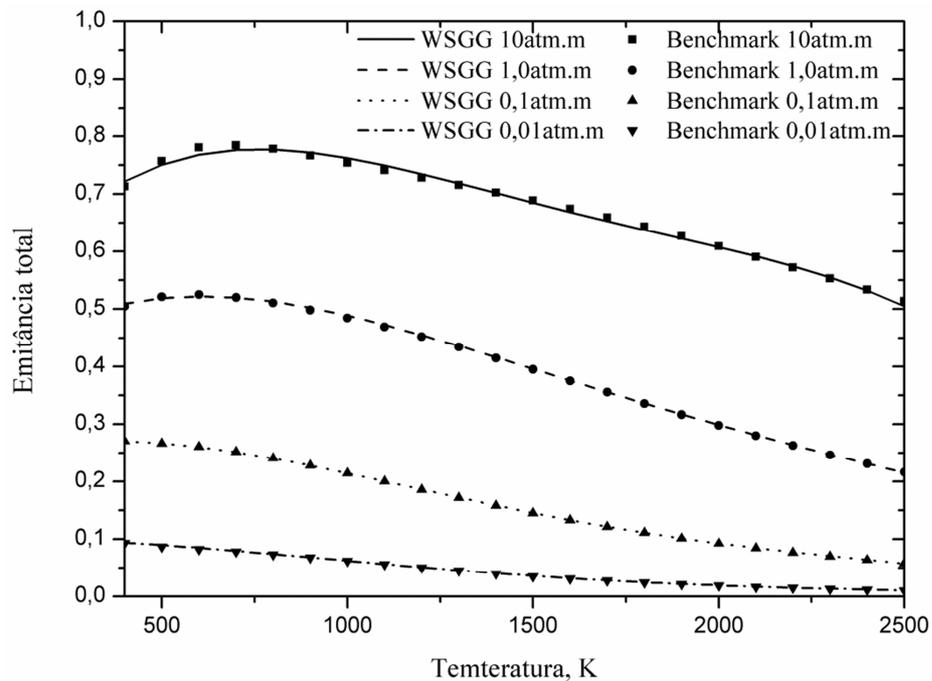


Figura 6.2 – Comparação dos valores de emitância para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

Com o intuito de testar os coeficientes obtidos, resolvem-se problemas com funções de temperaturas conhecidas, tornando viável a comparação dos resultados obtidos pelo método

WSGG com o resultado obtido através do método LBL, sendo esse último, a solução *benchmark*.

6.1 Comparação da Solução LBL com a Solução WSGG

Para comparação das soluções obtidas pelo do método WSGG com a solução LBL, consideram-se duas placas planas infinitas paralelas com meio participante entre elas. As superfícies das placas planas são consideradas negras. O resultado de interesse para comparação das soluções é o divergente do fluxo de calor, em unidades de W/m^3 , pois o mesmo é usado como termo fonte na equação da energia. A Figura 6.3 mostra a configuração do problema a ser resolvido.

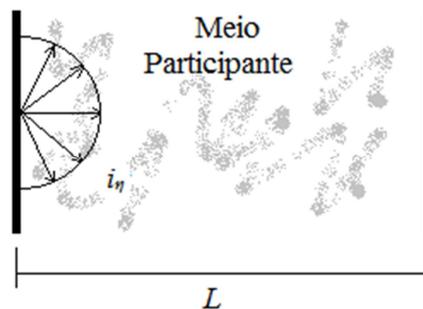


Figura 6.3 – Configuração geométrica de duas placas planas infinitas.

As variáveis levadas em conta para comparação das soluções obtidas são: a distância entre as placas, a diferença entre as temperaturas máxima e mínima no meio participante e a variação na pressão parcial na mistura. É usado também perfis de temperatura distintos, descritos a seguir.

Denison e Webb, 1993b, Denison e Webb, 1995 e Maurente et al., 2007, utilizaram perfis de temperatura cossenoidais para testar a confiabilidade dos métodos de solução obtidos por eles. Por outro lado, Solovjov et al., 2008, e Galarça et al., 2011, utilizaram perfis de temperatura parabólicos. Neste trabalho, são utilizados os dois perfis, porém alterando-se os coeficientes das funções de modo a se obterem variações de temperatura diversa. Na Equação 6.1, tem-se a função parabólica com temperatura máxima de 2000 K e mínima de 400 K, com variação de $\Delta T = 1600$ K. Na Equação 6.2 a função tem temperatura máxima de 1600 K e mínima de 800 K, resultando um $\Delta T = 800$ K. Para a Equação 6.3, máxima de 1400 K, mínima de 1000 K e um $\Delta T = 400$ K.

$$T(x) = 2000 - 1600 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (6.1)$$

$$T(x) = 1600 - 800 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (6.2)$$

$$T(x) = 1400 - 400 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (6.3)$$

Para a função cossenoidal, são respeitados os mesmos critérios quanto à temperatura máxima e temperatura mínima da função. A Equação 6.4 representa a função de temperatura cossenoidal com um $\Delta T = 1600$ K, a Equação 6.5 possui um $\Delta T = 800$ K, e a Equação 6.6 possui um $\Delta T = 400$ K.

$$T(x) = 1200 + 800 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (6.4)$$

$$T(x) = 1200 + 400 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (6.5)$$

$$T(x) = 1200 + 200 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (6.6)$$

O teste foi realizado para as correlações obtidas com razões $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$ e $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$.

Para a resolução da RTE foi utilizado o método das ordenadas discretas. Esse método é baseado em uma representação discreta da variação das direções de intensidade radiante, sendo uma extensão do método de dois fluxos, onde, quando o ângulo sólido da direção é dividido em mais do que dois hemisférios, passa a ser chamado de ordenadas discretas. As soluções obtidas nesse trabalho são independentes em relação à malha espacial.

Para calcular o erro no ponto em que ele é máximo no espaço, seleciona-se o módulo da maior diferença, para um mesmo ponto x , entre os valores de divergente do fluxo radiante

das soluções WSGG e LBL. Esse valor é dividido pelo maior valor obtido na solução LBL. Esse erro é denominado erro local ou erro máximo e é calculado conforme a Equação 6.7.

$$Erro_{\max} = \frac{\left| (dq_r(x)/dx)_{LBL} - (dq_r(x)/dx)_{WSGG} \right|_{\max}}{\left| (dq_r(x)/dx)_{\max,LBL} \right|} \quad (6.7)$$

6.1.1 Comparação considerando a variação da distância entre as placas

Para verificação da influência da distância entre as placas sobre o resultado obtido com o método WSGG, são gerados resultados para $L = 0,5$ m e $L = 2,0$ m. Os dados de erros são organizados na Tabela 6.3 e melhores descritos no decorrer do texto.

A Figura 6.4 mostra a comparação entre os dois métodos para a função de temperatura parabólica mostrada na Equação 6.2, utilizando uma proporção de pressão parcial de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$. Para essa função, foi observado um erro máximo de 2,84% em $x/L = 0,025$ para um comprimento $L = 0,5$ m e um erro máximo de 4,75% em $x/L = 0,502$ para um comprimento $L = 2,0$ m. A mesma comparação é feita para a proporção de mistura $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$. A solução obtida é mostrada na Figura 6.5. Observa-se um erro máximo de 5,07% em $x/L = 0$ e $x/L = 1$, para $L = 0,5$ m, e um erro máximo de 2,95% em $x/L = 0,005$ e $x/L = 0,994$, para $L = 2,0$ m.

A Figura 6.6 – mostra a solução obtida com a função cossenoidal, dada pela Equação 6.5. Para a proporção $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, foi observado um erro máximo de 2,4% em $x/L = 0$ para $L = 0,5$ m e um erro máximo de 13,06% em $x/L = 0$ para $L = 2,0$ m. A Figura 6.7 mostra a solução para a proporção $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$. Observa-se um erro máximo de 8,02% em $x/L = 0$, para $L = 0,5$ m, e um erro máximo de 18,61% em $x/L = 0,045$, para $L = 2,0$ m.

Observa-se que para a função parabólica, todos os erros máximos ficaram abaixo 5,07%, considerado razoável para um método que permite uma considerável simplificação na solução. Porém, que para a função cossenoidal, o mesmo não pode ser dito, alcançando-se erros máximos acima de 18%. Analisando a Figura 6.6 – e Figura 6.7, observa-se, porém, que há divergências consideráveis em poucos pontos. Para esse caso calcula-se o erro médio através da Equação 6.8.

$$Erro_{med} = \frac{|(dq_r(x)/dx)_{LBL} - (dq_r(x)/dx)_{WSGG}|_{media}}{|(dq_r(x)/dx)_{media,LBL}|} \quad (6.8)$$

Deve-se avaliar a aplicabilidade dos coeficientes WSGG quando se tem erros locais elevados, porém, erros médios insignificantes. Isso por que existem modelamentos de combustão onde reações químicas são sensíveis à pequenas variações de valores locais do divergente do fluxo de calor, o que poderia afetar significativamente os resultados. Logo, antes da utilização dos coeficientes, o usuário deve analisar se o modelamento de combustão que está sendo utilizado é sensível a variações locais de divergente do fluxo de calor.

Verifica-se dessa forma um erro médio para a função cossenoidal, na proporção $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$ e $L = 2,0$ m, de 1,23%, e para $L = 0,5$ m, de 0,06%. Na proporção $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ observou-se um erro de 1,58% e 0,12%, para $L = 2,0$ m e 0,5 m, respectivamente.

Dessa forma, apesar da função cossenoidal apresentar grandes erros máximos, na média, esses erros acabam sendo não significativos, mostrando a confiabilidade dos coeficientes na resolução de problemas.

Tabela 6.3 – Erros máximos e médios em função da variação da distância entre as placas.

Função parabólica			Função cossenoidal			
$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$			$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$			
L (m)	Erro máximo (%)	x/L	L (m)	Erro máximo (%)	x/L	Erro médio (%)
0,5	2,84	0,025	0,5	2,4	0	0,06
2,0	4,75	0,502	2,0	13,06	0	1,23
$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$			$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$			
L (m)	Erro máximo (%)	x/L	L (m)	Erro máximo (%)	x/L	Erro médio (%)
0,5	5,07	0 e 1,0	0,5	8,02	0	0,12
2,0	2,95	0,005 e 0,994	2,0	18,61	0,045	1,58

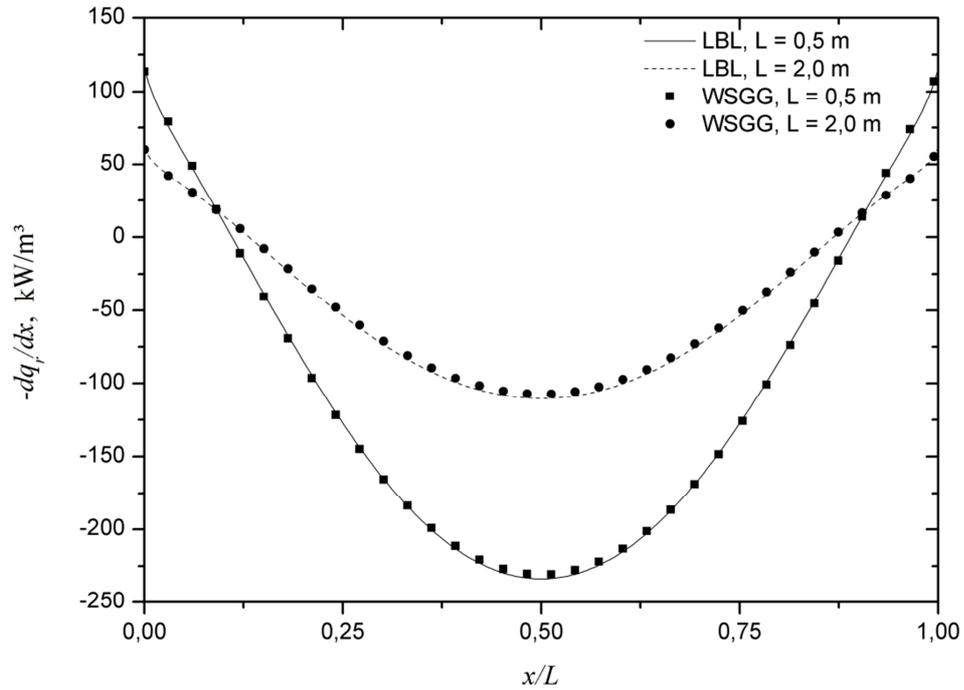


Figura 6.4 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, perfil de temperatura parabólico e diferentes distâncias entre placas.

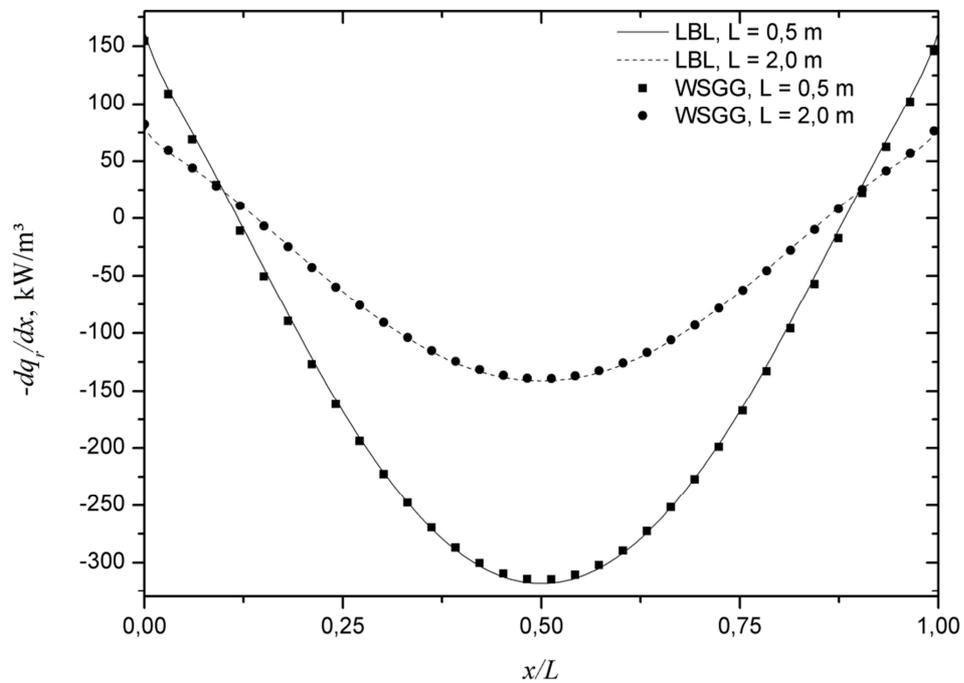


Figura 6.5 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, perfil de temperatura parabólico e diferentes distâncias entre placas.

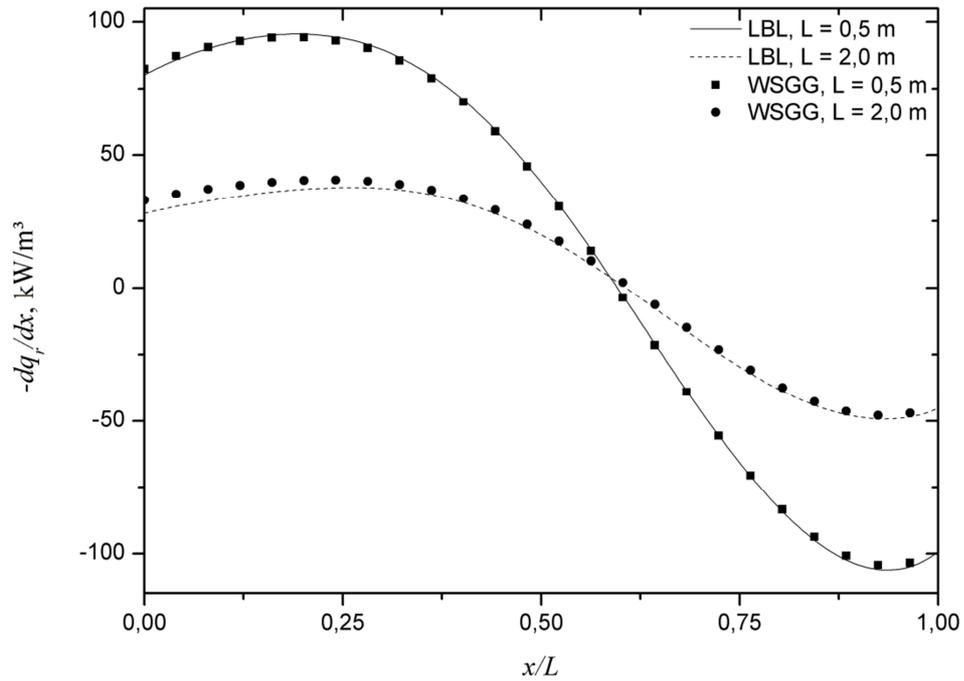


Figura 6.6 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e diferentes distâncias entre placas.

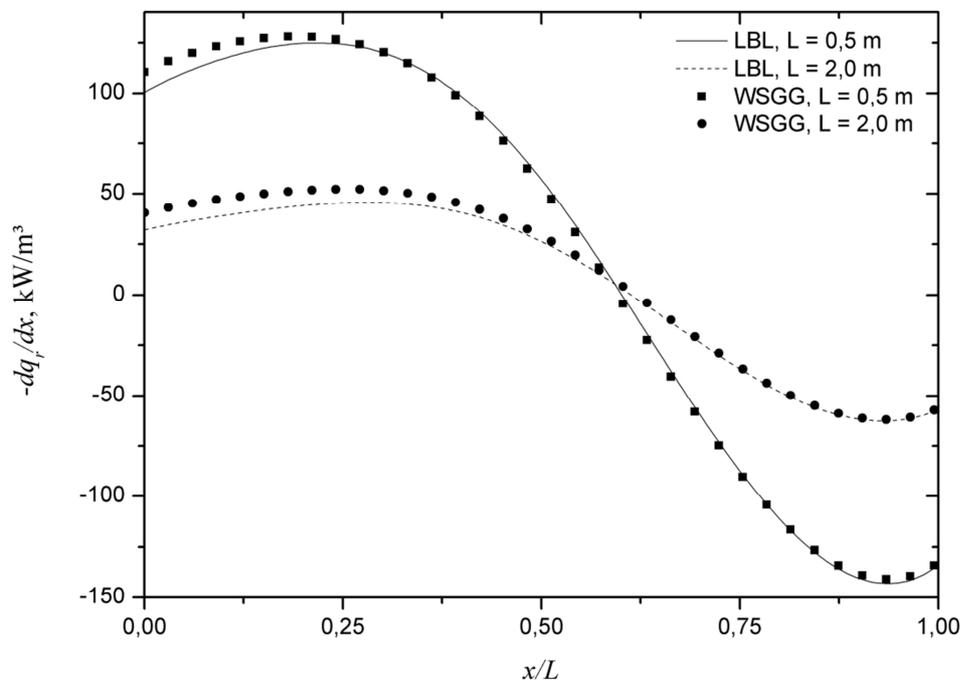


Figura 6.7 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e diferentes distâncias entre placas.

6.1.2 Comparação considerando a variação diferença de temperatura

Uma importante questão relacionada ao modelo WSGG é a hipótese de que o coeficiente de absorção por unidade de pressão, k_i , seja independente da temperatura, o que claramente é uma simplificação. De fato, toda a dependência do modelo WSGG em relação à temperatura se insere nos coeficientes polinomiais, que representam a fração de energia do corpo negro nas regiões do espectro correspondente a cada gás cinza. Deve-se ainda observar que os coeficientes do modelo foram determinados a partir da emitância do meio ao longo de um caminho isotérmico. Dessa forma, é necessário analisar como o modelo se compara com a solução *benchmark* LBL em meios não isotérmicos, um estudo que não consta de forma clara na literatura.

Verifica-se aqui a influência dos gradientes de temperatura no erro do modelo WSGG. Os perfis de temperatura usados para a função parabólica são as Equações (6.1), (6.2) e (6.3), que possuem diferenças de temperatura entre a máxima e a mínima de 1600 K, 800 K e 400 K, respectivamente. Os erros estão organizados na Tabela 6.4, tanto para o perfil parabólico quanto para o perfil cossenoidal, e os mesmos estão melhores descritos ao decorrer do texto.

Tabela 6.4 – Erros máximos e médios em função da diferença entre a máxima e mínima temperatura.

Função parabólica			Função cossenoidal			
$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$			$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$			
ΔT (K)	Erro máximo (%)	x (m)	ΔT (K)	Erro máximo (%)	x (m)	Erro médio (%)
400	2,67	0 e 1,0	400	6,03	0,261	0,05
800	3,04	0,206 e 0,793	800	7,35	0	0,27
1600	7,85	0,115 e 0,884	1600	4,48	0	0,77
$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$			$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$			
ΔT (K)	Erro máximo (%)	x (m)	ΔT (K)	Erro máximo (%)	x (m)	Erro médio (%)
400	2,67	0 e 1,0	400	9,38	0	0,04
800	3,04	0,206 e 0,793	800	13,43	0	0,40
1600	7,48	0,115 e 0,884	1600	10,26	0	1,34

Na Figura 6.8, são mostrados os resultados para uma distância entre placas de $L = 1,0$ m e uma razão de pressão de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$. Para $\Delta T = 1600$ K, tem-se um erro máximo de 7,85% em $x = 0,115$ m e $x = 0,884$ m. Para $\Delta T = 800$ K tem-se um erro máximo de 3,04% em $x = 0,206$ m e $x = 0,793$ m. Para $\Delta T = 400$ K, tem-se um erro máximo de 2,67% em $x = 0$ m e $x = 1,0$ m.

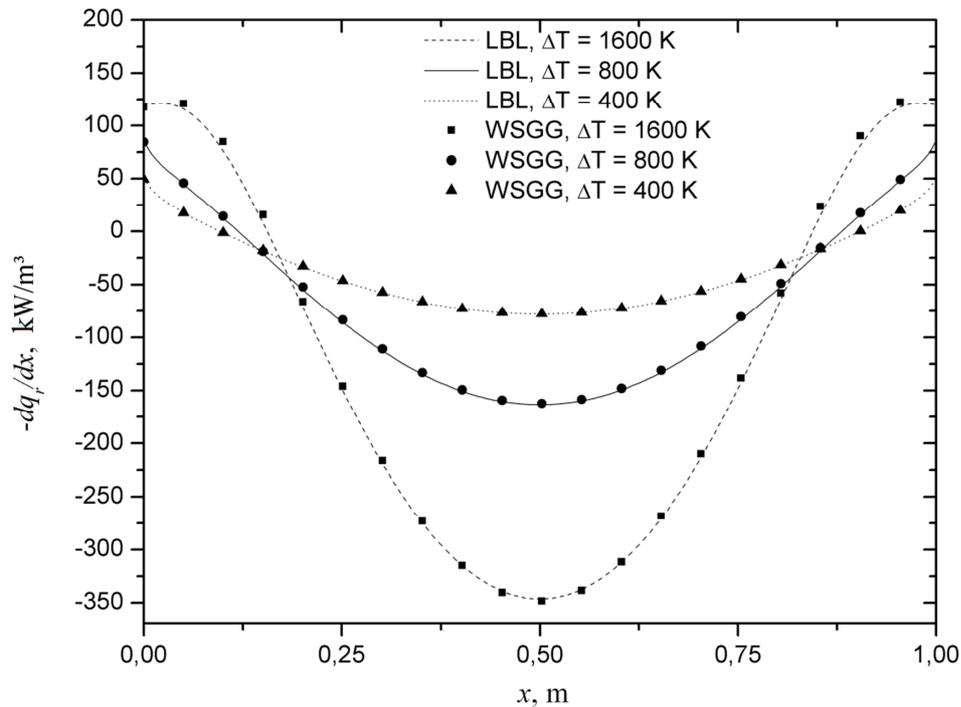


Figura 6.8 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, perfil de temperatura parabólica e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.

Na Figura 6.9 é feita a mesma comparação, porém para uma proporção de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$. Para $\Delta T = 1600$ K, tem-se um erro máximo de 7,48% em $x = 0,115$ m e $x = 0,884$ m. Para $\Delta T = 800$ K tem-se um erro máximo de 3,04% em $x = 0,206$ m e $x = 0,793$ m. Para $\Delta T = 400$ K tem-se um erro máximo de 2,67% em $x = 0$ m e $x = 1,0$ m.

Em ambas as comparações para $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ e 2, verifica-se uma tendência de o erro aumentar na medida em que se aumenta a diferença de temperatura, verificando a sensibilidade do método em relação ao gradiente de temperatura.

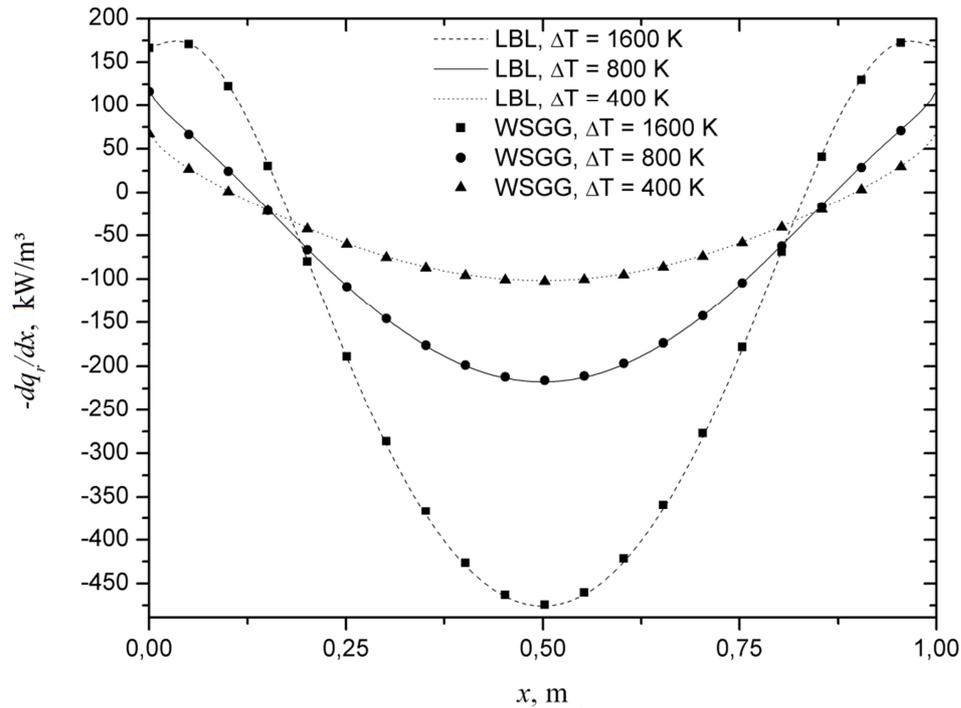


Figura 6.9 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$, perfil de temperatura parabólica e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.

Para comparação dos resultados com a função cossenoidal, são utilizadas as Equações (6.4), (6.5) e (6.6). Elas possuem uma diferença de temperatura entre a máxima e a mínima de 1600 K, 800 K e 400 K, respectivamente. Na Figura 6.10 são mostrados os resultados para uma distância entre placas de $L = 1,0$ m e uma proporção de pressão de $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$. Para $\Delta T = 1600$ K, tem-se um erro máximo de 6,03% em $x = 0,261$ m. Para $\Delta T = 800$ K tem-se um erro máximo de 7,35% em $x = 0$ m. Para $\Delta T = 400$ K, tem-se um erro máximo de 4,48% em $x = 0$ m.

A mesma comparação é feita para a proporção $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$. Essa comparação é mostrada na Figura 6.11. Para $\Delta T = 1600$ K, tem-se um erro máximo de 10,26% em $x = 0$ m. Para $\Delta T = 800$ K tem-se um erro máximo de 13,43% em $x = 0$ m. Para $\Delta T = 400$ K tem-se um erro máximo de 9,38% em $x = 0$ m.

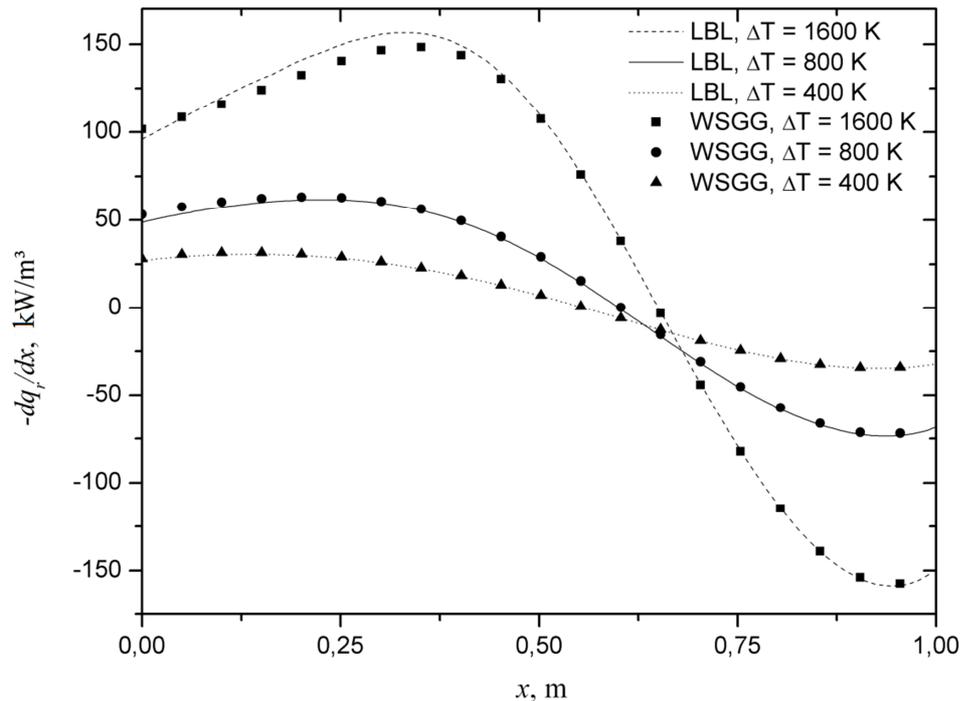


Figura 6.10 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.

Verifica-se que para a função cossenoidal, a relação do erro máximo com a variação de temperatura não é verificada, alcançando seu maior valor em $\Delta T = 800$ K.

Quando se compara as funções parabólicas e cossenoidal, novamente verifica-se o maior erro associado com a função cossenoidal, alcançando erros máximos em quase 14%, enquanto que para a função parabólica, o maior erro máximo encontrado manteve-se em torno de 7%.

Calculando o erro médio para a função cossenoidal, usando a Equação 6.8, verifica-se, para a proporção $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, erros de 0,05%, 0,27% e 0,77%, para $\Delta T = 400$ K, $\Delta T = 800$ K e $\Delta T = 1600$ K, respectivamente. Para $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$ verifica-se erros médios de 0,04%, 0,40% e 1,34%, para $\Delta T = 400$ K, $\Delta T = 800$ K e $\Delta T = 1600$ K, respectivamente. Assim como verificado com a função parabólica, é possível verificar o aumento no erro médio em relação ao aumento na diferença de temperatura.

Aqui é possível também observar que os erros médios associados à função cosseno são pequenos, podendo os coeficientes determinados nesse trabalho seguramente ser utilizados na resolução de problemas de engenharia.

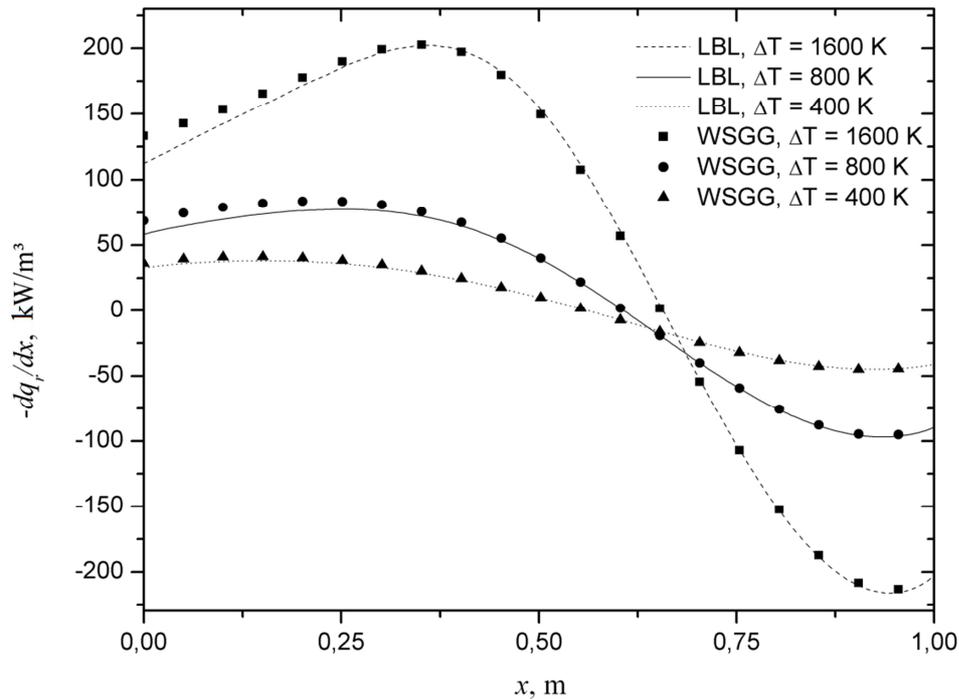


Figura 6.11 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e variações de temperatura de 1600 K, 800 K e 400 K.

6.1.3 Comparação considerando a variação na pressão parcial

Comparam-se nesta seção os resultados do modelo WSGG e da integração LBL para diferentes pressões parciais, considerando-se as razões $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ e $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$ e uma distância entre placas de $L = 1,0$ m. O perfil de temperatura usado para a função parabólica é definido pela Equação 6.2, e para o perfil cossenoidal, Equação 6.5. Os erros foram organizados na Tabela 6.5 e os mesmos estão melhores descritos no decorrer do texto.

A Figura 6.12 mostra a comparação dos resultados obtidos para uma razão de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,05$ atm, com a função parabólica. O erro máximo da solução WSGG, comparado com a solução LBL é de 2,93% em $x = 0,974$ m. A Figura 6.13 – mostra a comparação na mesma proporção, porém com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ atm. Observa-se um erro máximo de 6,56% em $x = 0,502$ m.

Tabela 6.5 – Erros máximos e médios em função da variação da pressão parcial de H₂O e CO₂.

Função parabólica			Função cossenoidal			
$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$			$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$			
p_{H_2O} (atm)	Erro máximo (%)	x (m)	p_{H_2O} (atm)	Erro máximo (%)	x (m)	Erro médio (%)
0,05	2,93	0,974	0,05	4,14	0	0,11
0,2	6,56	0,502	0,2	10,26	0	0,45
$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$			$p_{H_2O}/p_{CO_2} = 2$			
p_{H_2O} (atm)	Erro máximo (%)	x (m)	p_{H_2O} (atm)	Erro máximo (%)	x (m)	Erro médio (%)
0,1	5,45	0,854	0,1	11,28	0	0,37
0,3	3,70	0,502	0,3	14,56	0	0,50

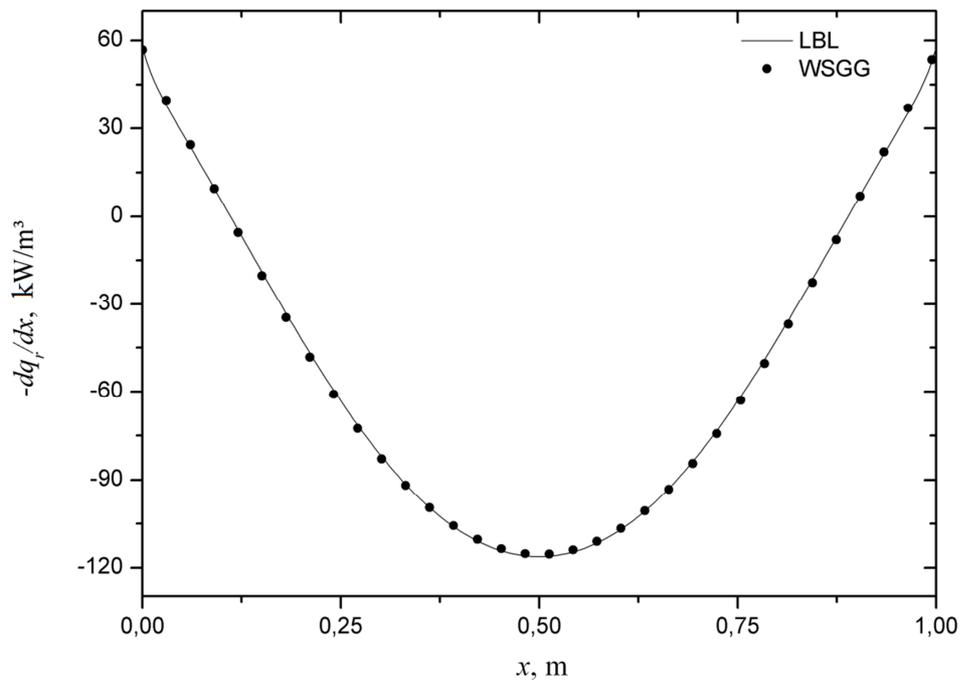


Figura 6.12 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{H_2O}/p_{CO_2} = 1$, perfil de temperatura parabólica e $p_{H_2O} = 0,05$ atm e $p_{CO_2} = 0,05$ atm.

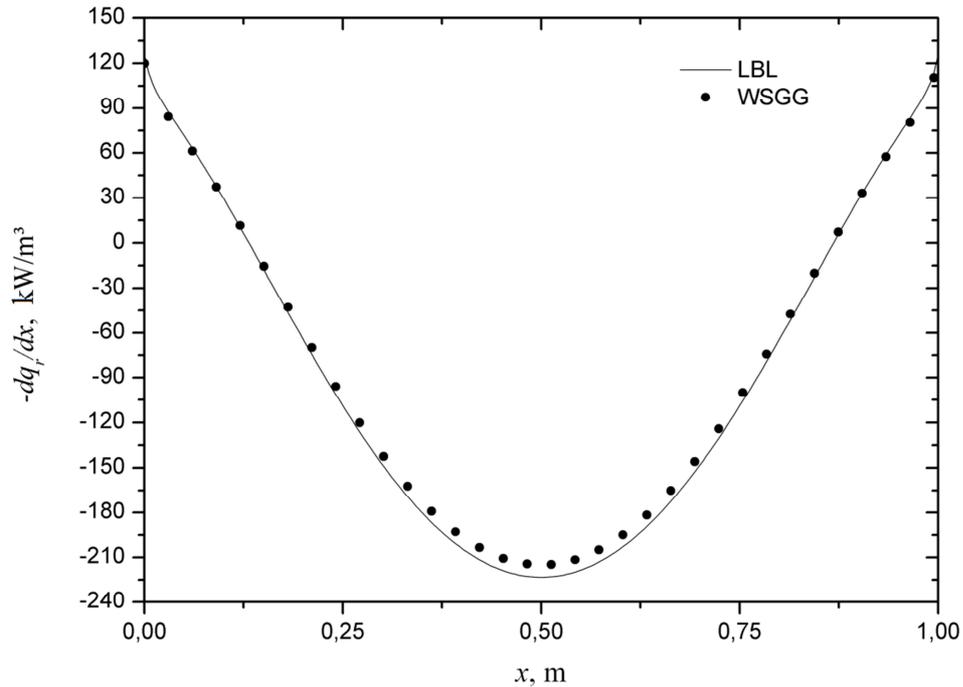


Figura 6.13 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, perfil de temperatura parabólica e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,2$ atm.

A Figura 6.14 mostra a comparação para uma razão de pressão de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ atm e função parabólica. O erro máximo é de 5,45% em $x = 0,854$ m. A Figura 6.15 mostra a comparação para a mesma proporção, com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,3$ atm. O erro máximo é de 3,70% em $x = 0,502$ m.

Verifica-se que para ambas as proporções $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2}$ e ambas as concentrações, os erros associados à função parabólica estão baixos, alcançando valores máximos em torno de 6,0% em alguns pontos.

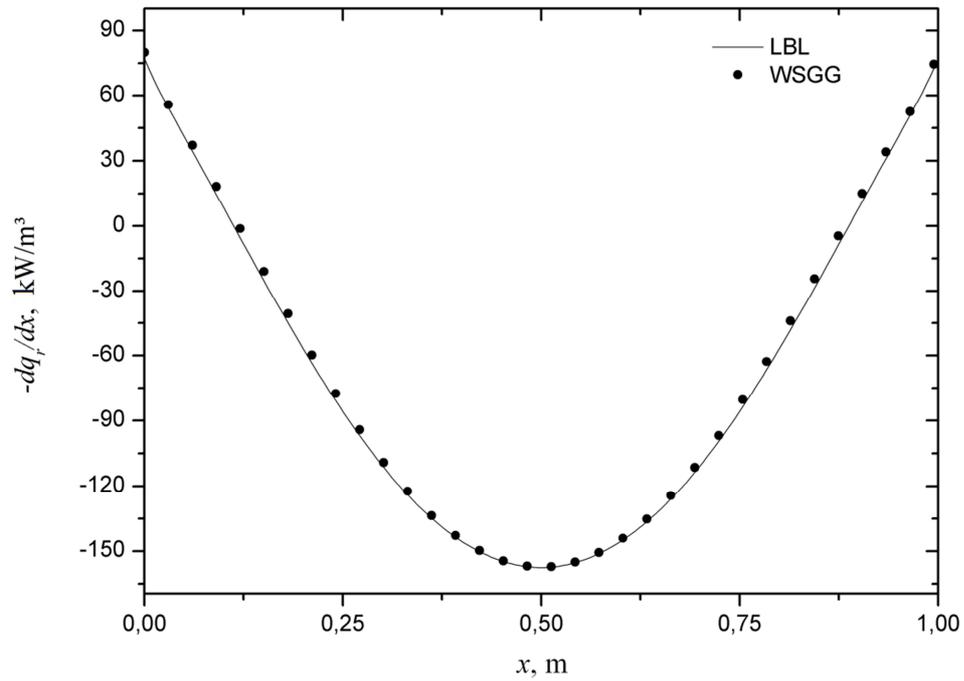


Figura 6.14 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, perfil de temperatura parabólica e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,05$ atm.

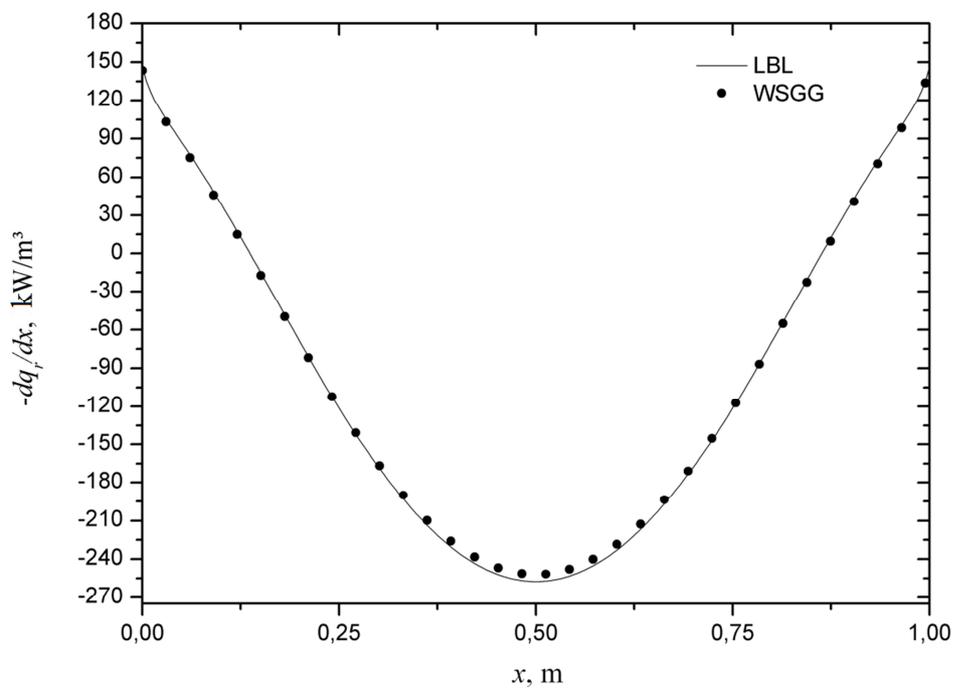


Figura 6.15 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, perfil de temperatura parabólica e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,3$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,15$ atm.

A Figura 6.16 mostra a comparação dos resultados obtidos para uma razão de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,05$ atm, com a função cossenoidal. O erro máximo é de 4,14% em $x = 0$ m. A Figura 6.17 mostra a comparação para a mesma proporção, com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ atm. O erro máximo é de 10,26% em $x = 0$ m.

Na Figura 6.18, é mostrada a comparação dos resultados obtidos para uma proporção de $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, com $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ atm. O erro máximo é de 11,28% em $x = 0$ m. Na Figura 6.19 é apresentada a comparação na mesma proporção, para $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,3$ atm. O erro máximo é de 14,56% em $x = 0$ m. Verifica-se que em quase todas as comparações feitas, os erros máximos ficam acima de 10%, para a função cossenoidal.

Calculando valores médios para a função cossenoidal, verifica-se, para a proporção $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, erros de 0,11% e 0,45%, para $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,05$ atm e 0,2 atm, respectivamente. Para a proporção $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, verifica-se erros médios de 0,37% e 0,50% para $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ atm e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,3$ atm, respectivamente. Novamente é possível observar o baixo erro, quando calculado em sua média, do divergente do fluxo radiante para uma função de temperatura cossenoidal.

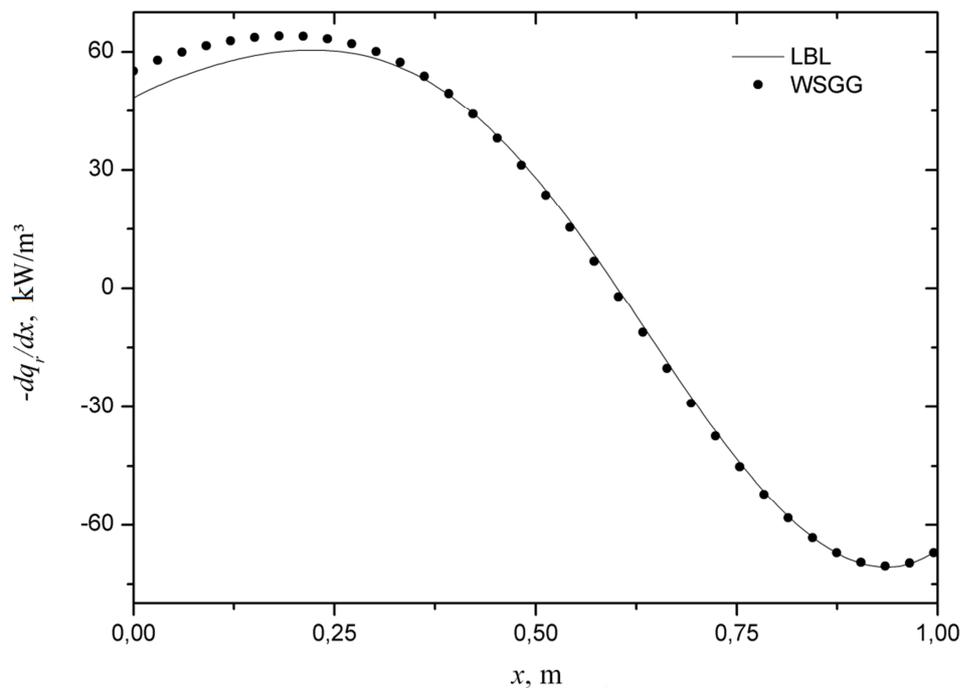


Figura 6.16 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,05$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,05$ atm.

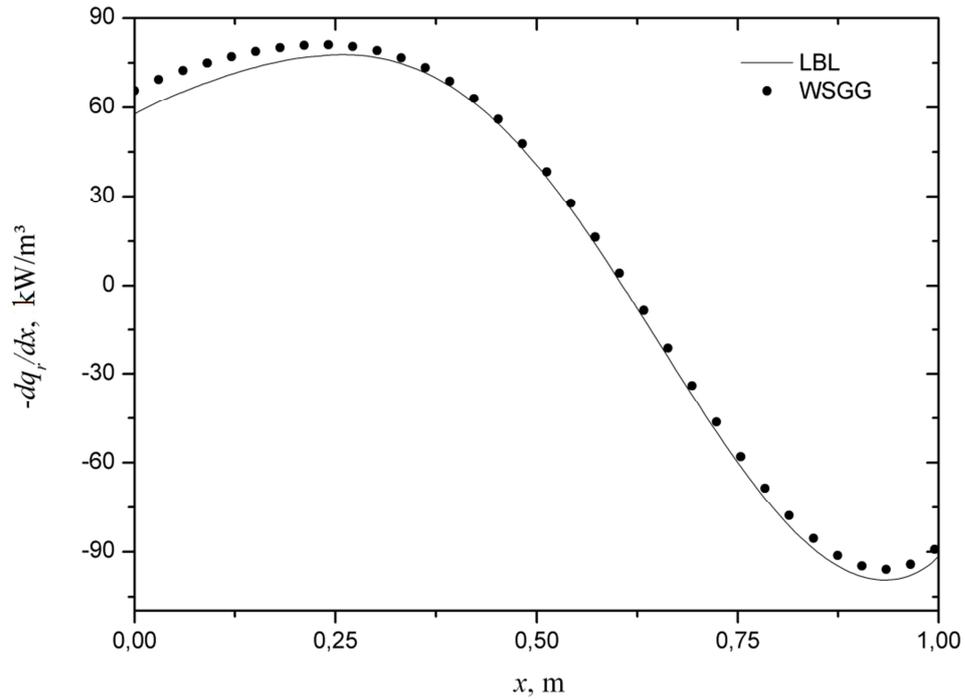


Figura 6.17 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,2$ atm.

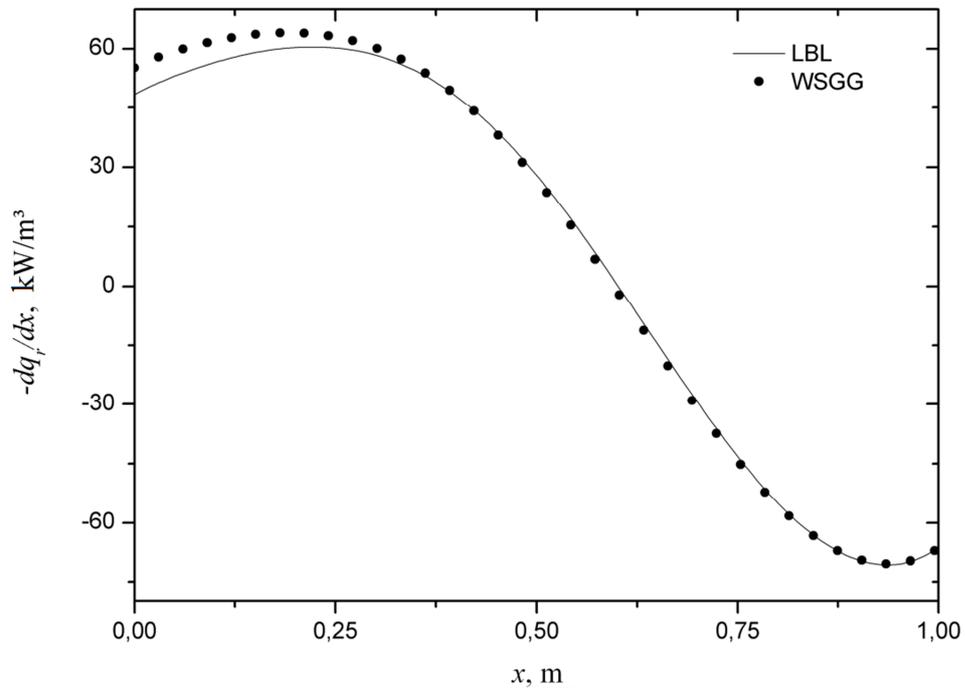


Figura 6.18 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, perfil de temperatura cossenoidal e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,1$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,05$ atm.

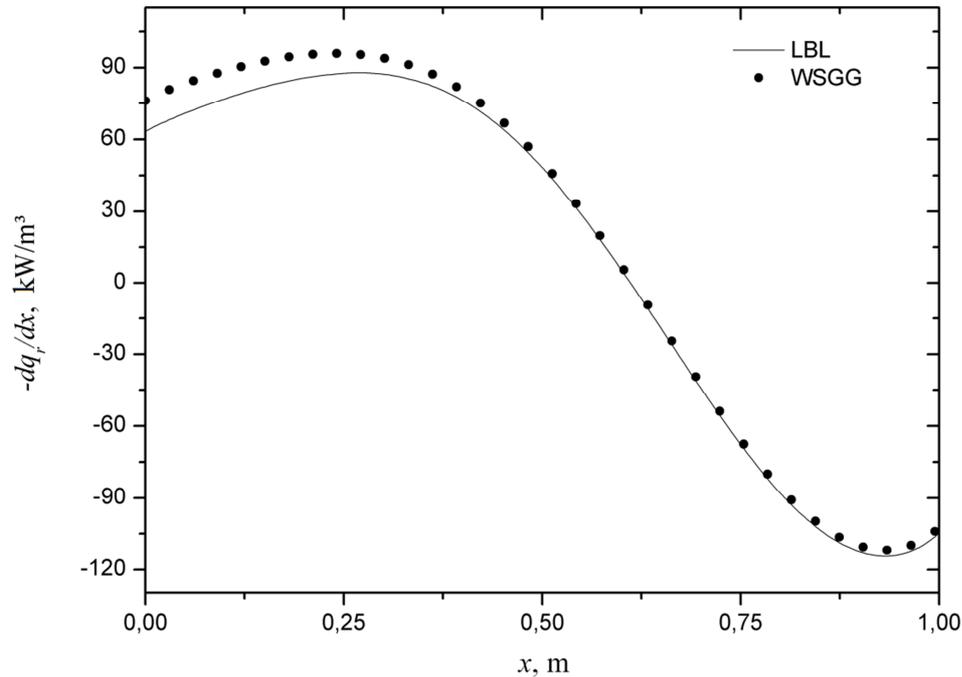


Figura 6.19 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método LBL e o WSGG, com $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$, perfil de temperatura cossenooidal e $p_{\text{H}_2\text{O}} = 0,3$ atm e $p_{\text{CO}_2} = 0,15$ atm.

6.1.4 Comparação dos coeficientes apresentados com coeficientes clássicos

De modo a tornar justificada a proposição dos novos coeficientes apresentados, é feita uma comparação dos resultados obtidos através do método WSGG utilizando os coeficientes obtidos por Smith et al., 1982, e os novos coeficientes, propostos nesse trabalho. Na Figura 6.20 está a comparação solução do divergente do fluxo de calor para ambos os coeficientes, para a proporção $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$. Na Figura 6.21 está a comparação para a proporção $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$.

É possível verificar a grande divergência dos resultados apresentados. As curvas obtidas com os coeficientes propostos nesse trabalho apresenta uma suavidade maior comparada as curvas obtidas utilizando os coeficientes de Smith et al., 1982. Uma vez que os novos coeficientes propostos derivam do banco de dados mais atual disponível, justifica a utilização desses coeficientes.

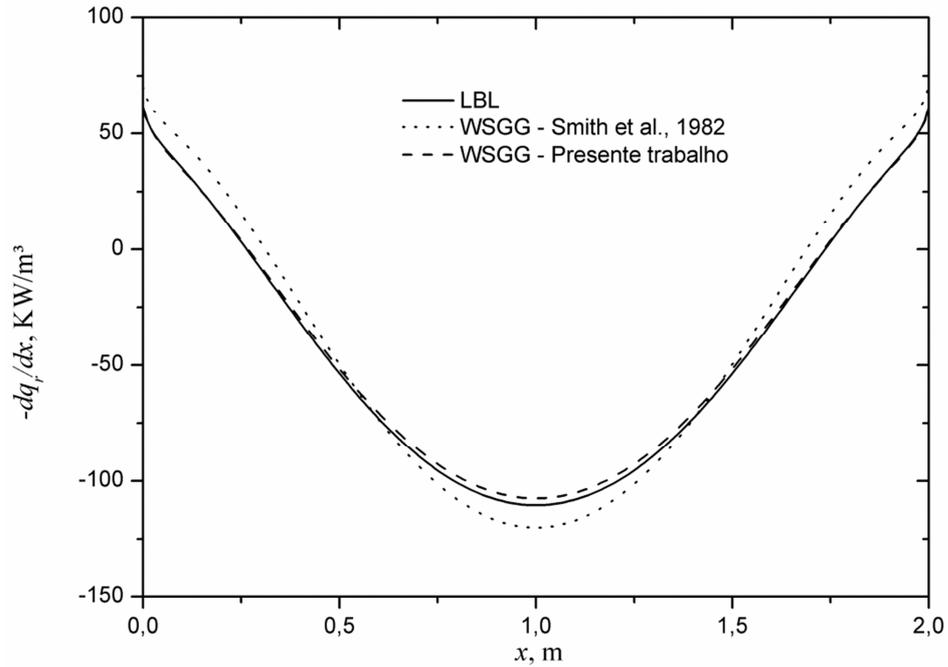


Figura 6.20 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método WSGG, utilizando os coeficientes de Smith et al., 1982, e os coeficientes propostos nesse trabalho, para uma relação $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 1$ e perfil de temperatura parabólico.

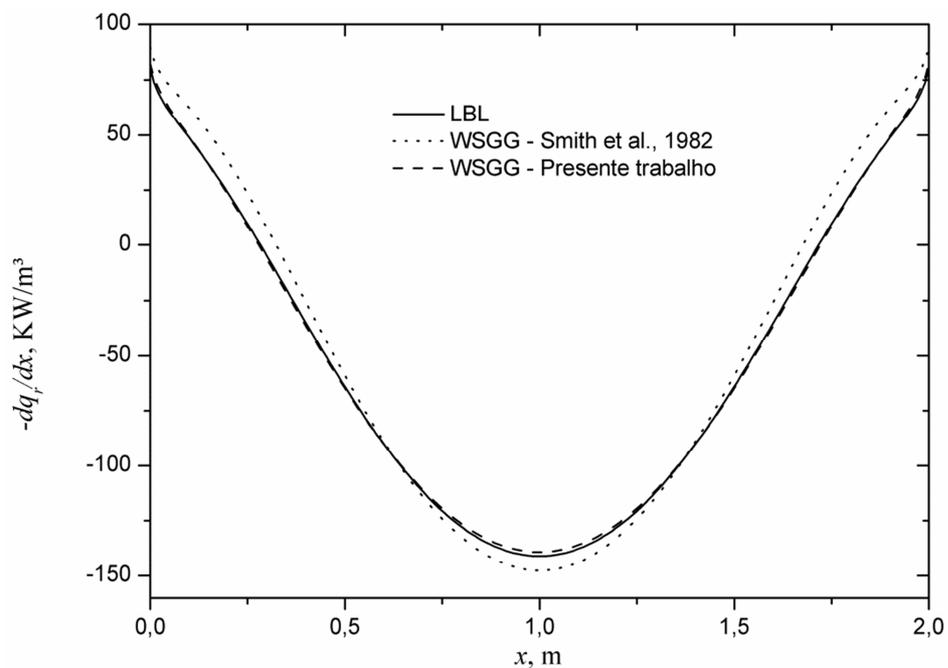


Figura 6.21 – Comparação dos resultados do divergente do fluxo de calor obtidos com o método WSGG, utilizando os coeficientes de Smith et al., 1982, e os coeficientes propostos nesse trabalho, para uma relação $p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2} = 2$ e perfil de temperatura parabólica.

7 CONCLUSÕES

A forte dependência dos combustíveis fósseis na matriz energética, aliada com o aumento da demanda de energia, traz a necessidade de investimentos de pesquisa de tecnologia para tornar eficiente o consumo dessas reservas de disponibilidade, ao mesmo tempo em que a preocupação com a emissão do produto de queima desses combustíveis se torna importante. Softwares comerciais ganham importante papel no desenvolvimento de novos equipamentos de tecnologia. Por sua vez, a atualização de métodos de cálculos, assim como novos coeficientes, tem igual importância para se obter uma boa confiabilidade nos resultados.

A troca de calor por radiação não pode ser negligenciada em processos de combustão devido às altas temperaturas envolvidas. Existem vários métodos para a integração espectral da equação da transferência radiante. O método LBL, que considera a integração de todo o espectro, exige um grande esforço computacional, tornando-se inviável para problemas de engenharia. O modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas considera que o espectro pode ser representado por poucos gases cinza.

O banco de dados HITEMP 2010 trouxe uma atualização da versão de 2008 e, neste momento, é o banco de dados mais atual do comportamento espectral de gases participantes. O HITEMP 2010 trouxe também uma maior confiabilidade em seus dados. Obter os coeficientes para o uso no método da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas através dele traz uma melhora nesses coeficientes, aliado a um método que não necessita de forte demanda computacional, comparado a outros métodos, tal como a integração LBL. Esse método inicialmente foi proposto para problemas em que a concentração e a temperatura do meio fossem uniformes. Essas restrições impediriam a utilização desse método em na maioria dos problemas envolvendo combustão. O trabalho mostrou que o método se adequa muito bem em campos de temperaturas não uniformes, como o caso da função parabólica, onde mesmo com o aumento da variação de temperatura, o erro não foi de grande importância. Para variações no campo de concentrações, o estudo feito mostra que grandes variações na concentração podem levar a erros máximos consideráveis, dependendo do perfil de temperatura utilizado, como foi o caso do perfil cossenoidal. Para esse mesmo caso, porém, verificou-se que mesmo nessas condições de concentração, os erros médios obtidos são muito pequenos. Para a função parabólica, até mesmo os erros máximos são baixos.

Na comparação dos resultados alterando-se a distância entre placas, não se verificou uma tendência do erro relacionada a ela, levando a concluir que esse fator não tem importância significativa sobre o erro.

Dessa forma, os coeficientes obtidos nesse trabalho podem ser usados para a solução de problemas de engenharia, desde que respeitadas os limites verificados nesse trabalho, como a proporção p_{H_2O}/p_{CO_2} , os valores máximos e mínimos das pressões parciais das substâncias, além do gradiente de temperatura, visto que nesse trabalho não verificou-se o comportamento da solução com o método WSGG para gradientes muito elevados.

7.1 Proposta de Continuidade

Obtiveram-se no trabalho os coeficientes para a Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas, utilizando-se quatro gases cinza mais as janelas transparentes. A interpolação dos coeficientes obtidos foi feita através de um polinômio de quarta ordem.

Fez-se no trabalho uma comparação dos resultados obtidos pelo método LBL e pelo método da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas. Verificaram-se erros associados a esse último método, sendo os mais significativos os erros máximos obtidos com a função cosseno.

Os desafios para o próximo trabalho é verificar qual a dependência nos resultados obtidos em relação ao número de gases cinza utilizados, visto que em alguns casos os erros máximos são consideráveis. Um estudo em relação à ordem do polinômio empregado também deve ser avaliado.

Um desafio importante também é verificar o motivo por que com determinadas funções de temperatura o erro máximo é maior, como apresentado com a função cosseno, verificando se é o número de gases cinza utilizados, a ordem do polinômio ou outro fator. Testar essas correlações com perfis reais de temperatura em situações de combustão também se torna importante, pois nesses processos podem estar envolvidos gradientes de temperatura elevados, já que não foi verificada a viabilidade desse modelo nesses casos.

Os coeficientes obtidos são para razões de p_{H_2O}/p_{CO_2} de 1 e 2, que correspondem aos produtos da queima de óleo combustível e gás natural. Fica também como proposta para um futuro trabalho a obtenção de coeficientes para queima de outros produtos, que envolvem proporções diferentes das obtidas nesse trabalho, além da atualização constante desses coeficientes assim que uma nova atualização do banco de dados HITEMP estiver disponível.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ansys Fluent 12.0 – Getting Started Guide, 2009, <http://www.ansys.com/>, acessado em 29/01/2012.

Ansys CFX Tutorials, release 12.0, 2009, <http://www1.ansys.com/customer/content/documentation/120/cfx/xtutr.pdf>, acessado em 29/01/2012.

Banco de dados HITEMP 2010, <http://www.cfa.harvard.edu/HITRAN/>, acessado em 29/01/2012.

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

Modest, M.F. The Weighted Sum of Gray Gas Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer, **Journal of Heat Transfer**, v. 113, p. 650-656, 1991.

Denison, M.K.; Webb, B.W. An Absorption-Line Blackbody Function for Efficient Calculation of Total Gas Radiative Transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 50, p. 499-510, 1993a.

Denison, M. K.; Webb, B. W. A Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary RTE Solvers, **Journal of Heat Transfer**, v. 115, p. 1004-1011, 1993b.

Denison, M. K.; Webb, B. W. Development and application of an absorption line blackbody distribution function for CO₂, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 38, p. 1813-1821, 1995.

European Commission, World Energy Technology Outlook – 2050, Office for Official Publications of the European Communities, 2007.

Fischer J.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Rothman, L.S.; Perrin, A. Total Internal Partition Sums for molecular species in the 2000 edition of HITRAN Database, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 82, p. 401-412, 2003.

Galarça, M.M.; Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. Correlations for the Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model Using Data Generated From the Absorption-Line Blackbody Distribution Function, 12^o Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Belo Horizonte-MG, 2008.

Galarça, M.M. Modelagem Espectral da Radiação em Processos de Combustão Baseada no Método do Número de Onda Acumulado, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2010.

Galarca, M.M.; Mossi, A.; França, F.H.R. A modification of the cumulative wavenumber method to compute the radiative heat flux in non-uniform media, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 112, p. 384-393, 2011.

Gamache, R.R.; Hawkins, R.L.; Rothman, L.S. Total internal partition sums in the temperature range 70–3000 K, **Journal of Molecular Spectroscopy**, v. 142, p. 205-219, 1990.

Gamache, R.R., http://faculty.uml.edu/robert_gamache/, acessado em 29/01/2012.

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

IEA – International Energy Agency -www.iea.org/stats/pdf_graphs/BRTPEspi.pdf, acessado em 29/01/2012.

Killinger D, Plutov, D.V., Hitran-PC 4.0 – User Manual, University of South Florida, 2009. http://www.cas.usf.edu/lidarlab/hitran_pc.html, acessado em 29/01/2012.

Levenberg, K. A Method for the Solution of Certain Non-linear Problems in Least Squares, **Quarterly of Applied Mathematics**, v. 2, p. 164-168, 1944.

Lindecrantz, S., Investigation of flame emission and absorption spectroscopy using the HITRAN/HITEMP database and simulations for concentration and temperature determination in combustion environments, Master of Science Thesis, Division of Combustion Physics, Lund University, 2010.

Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. A Monte Carlo implementation to solve radiation heat transfer in non-uniform media with spectrally dependent properties, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 108, p. 295-307, 2007.

Marquardt, D.W. An Algorithm for the Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters, **SIAM Journal of Applied Mathematics**, v. 11, p. 431-441, 1963.

Modest, M.F. **Radiative Heat Transfer**. McGraw-Hill, New York, 1993.

Mossi, A. Modelagem da Radiação Térmica em Chamas Laminares da combustão de Metano em Ar, Programa de pós Graduação em Engenharia Mecânica UFRGS – Porto Alegre, 2011.

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 and 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 and Radiative Transfer**, v. 96, p. 139-204, 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 and Radiative Transfer**, v. 111, p. 2130-2150, 2010.

Smith, T.F.; Shen, Z.F.; Friedman, J.N. Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model, **Journal of Heat Transfer**, v. 104, p. 602-608, 1982.

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

Solovjov, V.P.; Webb, B.W. Multilayer modeling of radiative transfer by SLW and CW methods in non-isothermal gaseous medium, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 109, p. 245-257, 2008.

Tashkun, S.A.; Perevalov, V.I.; Tefflo, J-L.; Bykov, A.D.; Lavrentieva N.N. CDS-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 82, p. 165-196, 2003.

Tashkun, S.A.; Perevalov, V.I. CDS-4000: High-resolution, high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 112, p. 1403-1410, 2011.

Yin, C.; Johansen, L.C.R.; Rosendahl, L.A.; KKs S.K. New Weighted Sum of Gray Gases Model Applicable to Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Oxy-Fuel Combustion: Derivation, Validation, and Implementation, **Energy Fuels**, v. 24, p. 6275-6282, 2010.