

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

DESENVOLVIMENTO DE UM NOVO MODELO PARA INTEGRAÇÃO
ESPECTRAL DA RTE EM PROBLEMAS NÃO HOMOGÊNEOS E NÃO ISOTÉRMICOS

por

Rogério Brittes da Silva

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2015

DESENVOLVIMENTO DE UM NOVO MODELO PARA INTEGRAÇÃO
ESPECTRAL DA RTE EM PROBLEMAS NÃO HOMOGÊNEOS E NÃO ISOTÉRMICOS

por

Rogério Brittes da Silva
Mestre em Engenharia Mecânica

Tese 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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Aprovada por:

Prof. Dr. Cristiano Vitorino da Silva URI/ERECHIM

Prof^a. Dr^a. Liliane Basso Barichello PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Luís Mauro Moura PUC/PR

Prof. Dr. Luiz A. O. Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 16, janeiro de 2015

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq agradeço a bolsa de doutorado; ao CESUP, a disponibilização dos recursos computacionais.

Aos meus pais (Arlindo e Elizabete), aos meus irmãos (Mauro, Alessandro e Priscila) e ao meu sobrinho (Davi) agradeço o suporte, o apoio e o carinho durante todo esse período. A minha namorada, Cássia, agradeço o carinho, a companhia e a imensa ajuda nas mais variadas situações.

Aos colegas Anderson Mossi (*in memoriam*), Fabiano Cassol, Felipe Centeno, Gustavo Duciak e Leonardo Dorigon, com os quais desenvolvi vários trabalhos. Ao Fabiano Cassol agradeço o treinamento a respeito dos bancos de dados e dos modelos espectrais; ao Felipe Centeno, a grande ajuda no desenvolvimento da rotina linha-por-linha para cavidades cilíndricas.

Aos membros da banca, professores Cristiano Vitorino, Liliane Barichello e Luís Mauro.

Um agradecimento muito especial ao professor Francis França, meu orientador, que deu todo o suporte necessário para a realização deste trabalho. Além disso, agradeço as inúmeras oportunidades e os incentivos recebidos.

RESUMO

A radiação térmica é um mecanismo de transferência de calor muito importante em processos que envolvem gases participantes, como CO_2 e H_2O , em temperaturas elevadas. A dependência altamente irregular do coeficiente de absorção em relação ao número de onda torna a integração linha-por-linha (LBL) da equação da transferência radiativa (RTE) impraticável, sobretudo em situações onde a radiação pode ser apenas parte de um problema mais complexo. Modelos espectrais globais, como a soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) e a soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW), representam alternativas à integração LBL. Entretanto, alguns modelos requerem o uso da aproximação de escala (que assume que as dependências espacial e espectral da seção transversal de absorção são separáveis). Essa aproximação pode produzir erros consideráveis, principalmente quando existem gradientes elevados de temperatura e de concentração. Neste trabalho, os resultados de alguns modelos espectrais globais foram comparados com os da solução LBL. E, a partir de algumas proposições dos modelos WSGG e SLW (integração espectral através de gases cinza e intervalos espectrais fixos por meio da definição de uma temperatura de referência), foi desenvolvida a soma-ponderada-de-gases-cinza com coeficientes não constantes (NCC-WSGG). Nesse modelo, os coeficientes de absorção e de emissão para cada gás cinza são funções polinomiais da temperatura. O modelo NCC-WSGG foi aplicado em problemas unidimensionais e bidimensionais, envolvendo CO_2 , H_2O e mistura dessas espécies químicas. Comparações com a solução LBL mostraram que o NCC-WSGG pode fornecer resultados muito satisfatórios para o fluxo de calor e para o termo fonte radiativos em problemas não isotérmicos e não homogêneos.

Palavras-chave: radiação térmica; integração espectral; LBL; NCC-WSGG.

ABSTRACT

The thermal radiation is a very important mechanism of heat transfer in processes that embody participating gases, as CO₂ and H₂O, at high temperature. The highly irregular dependence of the absorption coefficient with respect to the wavenumber makes the application of line-by-line (LBL) integration of the radiative transfer equation (RTE) prohibitive, principally in situations where the radiation can be only part of a more complex problem. Global spectral models, like the weighted-sum-of-gray-gases (WSGG) and the spectral line based weighted-sum-of-gray-gases (SLW), are alternatives to the LBL integration. However, some models demand the application of the scaling approximation (which assumes that the spatial and spectral dependences of the absorption cross-section are separable). This approximation can lead to pronounced errors, mainly under high gradients of temperature and concentration. In this work, some results obtained from global models were compared with the LBL solution. And, applying some proposals from WSGG and SLW models (spectral integration through gray gases and fixed spectral intervals by the definition of a reference condition), it was developed the nonconstant coefficient weighted-sum-of-gray-gases (NCC-WSGG). In this model, the absorption and emission coefficients of each gray gas are polynomials functions of the temperature. The model was applied to solve one and two dimensional problems, which were comprise of CO₂, H₂O and mixtures of these chemical species. Comparisons with the LBL solution showed that the NCC-WSGG can provide very good results for the heat flux and for the radiative heat source under nonisothermal and nonhomogeneous conditions.

Keywords: thermal radiation; spectral integration; LBL; NCC-WSGG.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Revisão Bibliográfica	2
1.2	Objetivos.....	8
1.3	Organização do Trabalho.....	9
2	RADIAÇÃO TÉRMICA EM MEIOS PARTICIPANTES.....	10
2.1	Alargamento das linhas espectrais	10
2.1.1	Alargamento natural	12
2.1.2	Alargamento Doppler	12
2.1.3	Alargamento por colisão.....	13
2.1.4	Alargamento Stark	13
2.2	Coefficiente de absorção	14
2.3	O banco de dados HITEMP	16
2.4	Atenuação da intensidade de radiação por absorção	18
2.5	Aumento da intensidade de radiação por emissão	18
2.6	A equação da transferência radiativa e a integração linha-por-linha.....	20
2.6.1	A equação da transferência radiativa em coordenadas cilíndricas	22
3	MODELOS PARA INTEGRAÇÃO ESPECTRAL DA RTE	28
3.1	Gás cinza (GG)	28
3.2	Soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG).....	29
3.3	Soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW)	33
3.3.1	Modelagem para mistura de espécies químicas no SLW	40
3.3.2	Correlações para a função distribuição F	42
3.4	Número de onda acumulado (CW)	44
3.4.1	Modelagem para mistura de espécies químicas no modelo CW	49
3.5	Número de onda acumulado modificado (MCW)	49
3.6	Proposição de um novo modelo espectral: NCC-WSGG	50

4	RESULTADOS	56
4.1	Avaliação de alguns modelos globais para integração espectral da RTE.....	56
4.1.1	Soluções para uma única espécie química.....	56
4.1.2	Soluções para mistura de CO ₂ e H ₂ O	64
4.2	Estudo do modelo SLW	67
4.2.1	Estudo do efeito da temperatura de referência	67
4.2.2	Avaliação da aproximação de escala através da construção de um espectro fictício ...	72
4.2.3	Avaliação da temperatura de corpo negro no espectro fictício.....	78
4.2.4	Comparação entre as soluções SLW (espectro fictício) e LBL (espectro real).....	80
4.3	Estudo do modelo NCC-WSGG.....	82
4.3.1	Obtenção de correlações para CO ₂ e H ₂ O	82
4.3.2	Solução de problemas unidimensionais para CO ₂ e H ₂ O	84
4.3.3	Influência da T_{med} e de ΔT na temperatura de referência T_{ref}	94
4.3.4	Obtenção de correlações para mistura de CO ₂ e H ₂ O.....	95
4.3.5	Solução de problemas unidimensionais para mistura de CO ₂ e H ₂ O	97
4.3.6	Aplicação do modelo NCC-WSGG em uma cavidade cilíndrica axissimétrica.....	101
5	CONCLUSÕES.....	110
5.1	Proposta de continuidade da pesquisa	112
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	113
	APÊNDICE A – Geração do espectro de absorção para CO₂ e H₂O.....	126
	APÊNDICE B – Coeficientes do modelo NCC-WSGG – CO₂	134
	APÊNDICE C – Coeficientes do modelo NCC-WSGG – H₂O	138
	APÊNDICE D – Coeficientes do modelo NCC-WSGG – mistura de CO₂ e H₂O.....	142

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Coeficiente de absorção de uma mistura de ar (gás inerte) e de 20 % em volume de vapor de água na temperatura de 400 K e pressão total de 1 atm (HITEMP 2010).	11
Figura 2.2 – Coeficiente de absorção de para uma linha espectral alargada para transição entre os níveis de energia i e j [Adaptada de Howell <i>et al.</i> , 2011].	11
Figura 2.3 – Intensidade de radiação incidindo sobre um elemento de volume, dV [adaptada de Howell, 2011].	18
Figura 2.4 – Geometria para dedução da emissão a partir de um volume do meio participante [adaptada de Howell, 2011].	19
Figura 2.5 – Lado direito: Representação do sistema, constituído por duas placas planas paralelas infinitas contendo um gás participante. Lado esquerdo: discretização espacial para determinação da transferência de calor radiativa.	21
Figura 2.6 – Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica	24
Figura 2.7 – Volume de controle e cossenos diretores para geometria cilíndrica axissimétrica [adaptado de Kaplan <i>et al.</i> , 1994].	25
Figura 3.1 – Representação de um meio composto por três gases cinza no modelo WSGG...30	30
Figura 3.2 – Representação de uma faixa do espectro onde a função ALB é calculada.	36
Figura 3.3 – Dependência idealizada do espectro em relação a dois estados termodinâmicos diferentes, resultando em frações de energia equivalentes.	38
Figura 3.4 – Esquematização da função distribuição do número de onda acumulado.	45
Figura 3.5 – Definição dos intervalos espectrais para integração da RTE.	51
Figura 4.1 – Perfis de temperatura.	57
Figura 4.2 – Avaliação da discretização espacial através da solução LBL para o termo fonte radiativo (Equação 4.2, com $Y_c = 0,1$).	58
Figura 4.3 – Fluxo de calor para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1$).	59
Figura 4.4 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1$).	59
Figura 4.5 – Fluxo de calor Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$).	60
Figura 4.6 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$).	61
Figura 4.7 – Fluxo de calor para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$).	61
Figura 4.8 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$).	62

Figura 4.9 – Fluxo de calor Resultados para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$).	63
Figura 4.10 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$).	63
Figura 4.11 – Fluxo de calor para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1, Y_w = 0,2$).	65
Figura 4.12 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1, Y_w = 0,2$).	65
Figura 4.13 – Fluxo de calor para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1, Y_w = 0,2$).	66
Figura 4.14 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1, Y_w = 0,2$).	66
Figura 4.15 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 400$ K, $\Delta T = 1600$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$	68
Figura 4.16 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 500$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$	69
Figura 4.17 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 600$ K, $\Delta T = 1200$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$	69
Figura 4.18 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 400$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1100$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$	70
Figura 4.19 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 500$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$	71
Figura 4.20 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 600$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1300$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$	71
Figura 4.21 – Faixa estreita do espectro real de CO ₂ para algumas temperaturas ($Y_c = 0,1$). ..	73
Figura 4.22 – Fator de escala calculado através do espectro real de CO ₂	73
Figura 4.23 – Faixa estreita do espectro fictício de CO ₂ gerado a partir da aplicação da aproximação de escala no espectro real com $T_{ref} = 1100$ K.	74
Figura 4.24 – Fluxo de calor para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).	75
Figura 4.25 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).	75
Figura 4.26 – Fluxo de calor para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).	76
Figura 4.27 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).	76
Figura 4.28 – Fluxo de calor para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).	77
Figura 4.29 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).	77
Figura 4.30 – Avaliação da temperatura de corpo negro no cálculo do termo fonte radiativo para a Equação 4.2 (Espectro fictício – $Y_c = 0,1$).	79
Figura 4.31 – Avaliação da temperatura de corpo negro no cálculo do termo fonte radiativo para a Equação 4.3 (Espectro fictício – $Y_c = 0,1$).	79

Figura 4.32 – Avaliação da temperatura de corpo negro no cálculo do termo fonte radiativo para a Equação 4.4 (Espectro fictício – $Y_c = 0,1$).	80
Figura 4.33 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$).	81
Figura 4.34 – Caso 1. (a) Perfil de temperatura, (b) Perfil de concentração.	85
Figura 4.35 – Caso 2. (a) Perfil de temperatura, (b) Perfil de concentração.	85
Figura 4.36 – Caso 3. (a) Perfil de temperatura, (b) Perfil de concentração.	86
Figura 4.37 – Fluxo de calor (Caso 1 com CO_2).	87
Figura 4.38 – Termo fonte radiativo (Caso 1 com CO_2).	87
Figura 4.39 – Fluxo de calor (Caso 2 com CO_2).	88
Figura 4.40 – Termo fonte radiativo (Caso 2 com CO_2).	89
Figura 4.41 – Fluxo de calor (Caso 3 com CO_2).	89
Figura 4.42 – Termo fonte radiativo (Caso 3 com CO_2).	90
Figura 4.43 – Fluxo de calor para H_2O (Caso 1).	91
Figura 4.44 – Termo fonte radiativo para H_2O (Caso 1).	91
Figura 4.45 – Fluxo de calor para H_2O (Caso 2).	91
Figura 4.46 – Termo fonte radiativo para H_2O (Caso 2).	92
Figura 4.47 – Fluxo de calor para H_2O (Caso 3).	92
Figura 4.48 – Termo fonte radiativo para H_2O (Caso 3).	92
Figura 4.49 – Espectro para CO_2 ($p_c = 0,1$ atm, $T = 1400$ K).	93
Figura 4.50 – Espectro para H_2O ($p_w = 0,2$ atm, $T = 1400$ K).	94
Figura 4.51 – Fluxo de calor ($p_w/p_c = 2$, caso 4).	98
Figura 4.52 – Termo fonte radiativo ($p_w/p_c = 2$, caso 4).	99
Figura 4.53 – Fluxo de calor ($p_w/p_c = 2$, caso 5).	99
Figura 4.54 – Termo fonte radiativo ($p_w/p_c = 2$, caso 5).	100
Figura 4.55 – Fluxo de calor ($p_w/p_c = 2$, caso 6).	100
Figura 4.56 – Termo fonte radiativo ($p_w/p_c = 2$, caso 6).	101
Figura 4.57 – Representação da câmara de combustão [adaptada de Centeno <i>et al.</i> , 2014].	103
Figura 4.58 – (a) Campo de temperatura, (b) Fração molar de H_2O , (c) Fração molar de CO_2 , (d) Razão entre as frações molares ou pressões parciais de H_2O e CO_2 ($p = 1$ atm) [Centeno <i>et al.</i> , 2014].	103
Figura 4.59 – Comparação entre as soluções (a) LBL, (b) WSGG e (c) NCC-WSGG.	105
Figura 4.60 – Erro local, ζ , no termo fonte radiativo (a) WSGG e (b) NCC-WSGG.	106

Figura 4.61 – Termo fonte radiativo ao longo da linha de centro da câmara.....	107
Figura 4.62 – Termo fonte radiativo na seção radial, $z = 1$ m.....	107
Figura 4.63 – Termo fonte radiativo na seção radial, $z = 1,5$ m.....	108
Figura 4.64 – Fluxo de calor na parede, $r = 0,25$ m.....	108
Figura A.1 – Avaliação do passo de temperatura ΔT_p (Equação A.2, $Y_w = 0,2$).....	128
Figura A.2 – Efeito do autoalargamento espectral para CO_2	129
Figura A.3 – Efeito do autoalargamento espectral para H_2O	130
Figura A.4 – Comparação entre dois espectros para CO_2	130
Figura A.5 – Comparação entre dois espectros para H_2O	131
Figura A.6 – Avaliação do parâmetro $\Delta\eta_p$ (Equação A.2, $Y_w = 0,2$).....	132
Figura A.7 – Termo fonte radiativo (Equação A.2 com $Y_w = 0,2$).....	132
Figura A.8 – Termo fonte radiativo (Equação A.4 com $Y_c = 0,3$) [adaptada de Solovjov e Webb, 2010, HITEMP 1995].	133
Figura A.9 – Termo fonte radiativo (Equação A.4 com $Y_c = 0,3$, HITEMP 2010).....	133

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Conteúdo do HITEMP 2010.....	17
Tabela 2.2 – Alguns parâmetros fornecidos no banco de dados HITEMP 2010.....	17
Tabela 2.3 – Trecho de um arquivo para molécula de CO ₂ (HITEMP 2010).....	17
Tabela 2.4 – Cossenos diretores para a geometria bidimensional.	23
Tabela 3.1 – Coeficientes para o modelo WSGG com $p_w/p_c = 2$ [Dorigon <i>et al.</i> , 2013].	31
Tabela 3.2 – Coeficientes do modelo WSGG para CO ₂ [Cassol <i>et al.</i> , 2014].	32
Tabela 3.3 – Coeficientes do modelo WSGG para H ₂ O [Cassol <i>et al.</i> , 2014].	32
Tabela 3.4 – Coeficientes b_{lmn} (Equação 3.39).	42
Tabela 3.5 – Coeficientes c_{lmn} (Equação 3.41).	43
Tabela 4.1 – Desvio percentual entre as soluções CW, SLW e LBL ($Y_c = 0,1$).....	63
Tabela 4.2 – Desvio percentual entre as soluções CW, SLW e LBL ($Y_w = 0,2$).	64
Tabela 4.3 – Desvio percentual dos modelos CW, SLW, WSGG em relação à solução LBL ($Y_c = 0,1$ e $Y_w = 0,2$).....	67
Tabela 4.4 – Efeito da temperatura de referência na solução SLW para T_{med} constante.....	70
Tabela 4.5 – Efeito da temperatura de referência na solução SLW para ΔT constante.....	72
Tabela 4.6 – Desvio percentual entre as soluções SLW e LBL (espectro fictício – $Y_c = 0,1$).	78
Tabela 4.7 – Avaliação do número de gases cinza $T_{ref} = 1000$ K, $T_a = T(x)$	83
Tabela 4.8 – Avaliação da temperatura de referência, $T_a = T(x)$, $n_g = 10$	84
Tabela 4.9 – Desvio percentual entre as soluções WSGG, NCC-WSGG e LBL para CO ₂	90
Tabela 4.10 – Desvio percentual entre as soluções WSGG, NCC-WSGG e LBL para H ₂ O... ..	93
Tabela 4.11 – Influência da temperatura média na temperatura de referência (erros no termo fonte radiativo para H ₂ O, $n_g = 10$, $\Delta T = 1400$ K).....	95
Tabela 4.12 – Influência de ΔT na temperatura de referência (erros no termo fonte radiativo para H ₂ O, $n_g = 10$, $T_{med} = 1200$ K).	95
Tabela 4.13 – Avaliação do número de gases cinza ($T_{ref} = 1000$ K, $T_a = T(x)$).....	96
Tabela 4.14 – Avaliação da temperatura de referência ($n_g = 10$, $T_a = T(x)$).....	97
Tabela 4.15 – Desvio percentual entre as soluções WSGG, NCC-WSGG e LBL para mistura de CO ₂ e H ₂ O, com $p_w/p_c = 2$	101
Tabela 4.16 – Coeficientes para temperatura no domínio.	104

Tabela 4.17 – Coeficientes para concentração de H ₂ O e CO ₂	104
Tabela 4.18 – Erros máximo e médio no termo fonte radiativo nas soluções WSGG e NCC-WSGG.	106
Tabela 4.19 – Erros máximos e médios no fluxo de calor nas soluções WSGG e NCC-WSGG.	108
Tabela A.1 – Avaliação do parâmetro $\Delta\eta_{max}$ no cálculo da emitância total com a integração LBL ($N_p = 500 \times 10^3$).....	127
Tabela A.2 – Avaliação do parâmetro N_p no cálculo da emitância total com a integração LBL.	127
Tabela B.1 – Coeficientes de emissão para CO ₂ na condição de referência ($T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$ – aplicados na Equação 3.81).	134
Tabela B.2 – Coeficientes $a_{s,j,k}$ para a fração de energia de corpo negro (aplicados para CO ₂ na Equação 3.80 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).	134
Tabela B.3 – Coeficientes $b_{s,j,k}$ para o coeficiente de emissão (aplicados para CO ₂ na Equação 3.81 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).	135
Tabela B.4 – Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para CO ₂ na Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).	135
Tabela C.1 – Coeficientes de emissão para H ₂ O na condição de referência ($T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$ – aplicados na Equação 3.81).	138
Tabela C.2 – Coeficientes $a_{s,j,k}$ para a fração de energia de corpo negro (aplicados para H ₂ O na Equação 3.80 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).....	138
Tabela C.3 – Coeficientes $b_{s,j,k}$ para o coeficiente de emissão (aplicados para H ₂ O na Equação 3.81 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).	139
Tabela C.4 – Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para H ₂ O na Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).	139
Tabela D.1 – Coeficientes de emissão na condição de referência ($p_w/p_c = 2$, $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$ – aplicados na Equação 3.81).	142
Tabela D.2 – Coeficientes $a_{s,j,k}$ para a fração de energia de corpo negro (aplicados na Equação 3.80 – $p_w/p_c = 2$, $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).....	142
Tabela D.3 – Coeficientes $b_{s,j,k}$ para o coeficiente de emissão (aplicados na Equação 3.81 – $p_w/p_c = 2$, $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).....	143

Tabela D.4 – Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados na Equação 3.83 – $p_w/p_c = 2, T_{ref} = 1400 \text{ K}, n_g = 10$).....	143
--	-----

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADFFG	Função distribuição de absorção baseada em gases fictícios
ALB	Função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção
CFD	Dinâmica de fluidos computacional
CK	Modelo k -correlacionado
CW	Modelo do número de onda cumulativo
EWB	Modelo de banda larga exponencial
FSCK	Modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo
GG	Modelo do gás cinza
HITEMP	Banco de dados espectral para 1000 K
HITRAN	Banco de dados para 296 K
LBL	Método linha-por-linha
MCW	Modelo CW modificado
ML	Aproximação multicamada para os modelos SLW e CW
MSFSCK	Modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo multiescala
NCC-WSGG	Soma-ponderada-de-gases-cinza com coeficientes não constantes
RTE	Equação da transferência radiativa
SLW	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais
SLW-1	Modelo SLW para um gás cinza
SNB	Modelo de banda estreita estatístico
SNBCK	Modelo k -correlacionado de banda estreita estatística
TIPS2008	Rotina que acompanha os arquivos dos bancos de dados HITRAN e HITEMP
TRI	Interação radiação turbulência
WSGG	Modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza

LISTA DE SÍMBOLOS

a_j	Fator de ponderação correspondente ao j -ésimo gás cinza
$a_{s,j,k}$	Coefficiente para a fração de energia de corpo negro no modelo NCC-WSGG
a_0	Fator de ponderação correspondente à janela transparente
A	Área [m ²]
$b_{j,k}$	Coefficientes do modelo WSGG
$b_{s,j,k}$	Coefficiente para o coeficiente de emissão no modelo NCC-WSGG
c	Velocidade de propagação da radiação eletromagnética em um meio [m/s]
$c_{s,j,k}$	Coefficiente para o coeficiente de absorção no modelo NCC-WSGG
C_1	Primeira constante de radiação [W.m ² /sr]
C_2	Segunda constante de radiação [m.K]
\tilde{C}_j	Seção transversal de absorção suplementar [cm ² /molécula]
\bar{C}_η	Valor médio da seção transversal de absorção [cm ² /molécula]
C_η	Seção transversal de absorção [cm ² /molécula]
C_η^*	Seção transversal de absorção do espectro fictício [cm ² /molécula]
C	Valor qualquer da seção transversal de absorção [cm ² /molécula]
$C_{e,j}$	Fração de energia de corpo negro
$d_{s,j,k,l}$	Coefficiente para determinação de $c_{s,j,k}$ no modelo NCC-WSGG
D_{ij}	Número de onda do gás cinza fracional
$E_{b\eta}$	Poder emissivo espectral [W/(m ² .μm.sr)]
E_f	Energia de um fóton [J]
E_i, E''	Energia do estado inferior [cm ⁻¹]
E_m	Energia de uma molécula [J]
f	Frequência [Hz]

f_e	Fator de escala, adimensional
h	Constante de Planck [J.s]
H_j	Intervalo em C_η para o modelo CW
I	Intensidade de radiação [W/(m ² .sr)]
I_b	Intensidade de radiação de corpo negro [W/(m ² .sr)]
$I_{b\eta}$	Intensidade de radiação espectral de corpo negro [W/(m ² .μm.sr)]
I_j	Intensidade de radiação do gás cinza j [W/(m ² .sr)]
I_{jm}^+	Intensidade de radiação do gás cinza para $\mu_m > 0$ [W/(m ² .sr)]
I_{jm}^-	Intensidade de radiação do gás cinza para $\mu_m < 0$ [W/(m ² .sr)]
$I_{\eta m}^+$	Intensidade de radiação espectral para $\mu_m > 0$ [W/(m ² .μm.sr)]
$I_{\eta m}^-$	Intensidade de radiação espectral para $\mu_m < 0$ [W/(m ² .μm.sr)]
ISO	Número do isótopo no banco de dados HITEMP
J_{bij}	Intensidade de radiação de corpo negro fracional [W/(m ² .sr)]
J_{ijm}^+	Intensidades de radiação do gás cinza fracional para $\mu_m > 0$ [W/(m ² .sr)]
J_{ijm}^-	Intensidades de radiação do gás cinza fracional para $\mu_m < 0$ [W/(m ² .sr)]
L	Distância entre duas placas planas paralelas [m]
m	Indica uma direção
M	Número de direções para geometria cilíndrica
Mol	Número da molécula no banco de dados HITEMP
$\max q''_{R,LBL} $	Valor máximo absoluto do fluxo de calor [W/m ²]
$\max Q_{R,LBL} $	Valor máximo absoluto do termo fonte radiativo [W/m ³]
n	Coefficiente de dependência da temperatura
n_e	Número de espécies químicas na mistura
n_d	Número de direções
n_g	Número de gases cinza
N	Densidade molar do gás [moléculas/cm ³]
N_A	Número de Avogadro

N_p	Número de pontos espectrais
N^*	Razão entre N e R_u
p_i	Pressão parcial da espécie química i [atm]
P	Pressão total [atm]
P	Soma das pressões parciais das espécies químicas na mistura [atm]
q	Número de intervalos espectrais no modelo CW
q_R''	Fluxo de calor radiativo [W/m^2]
Q	Soma total de partições internas
Q_R	Termo fonte radiativo [W/m^3]
Q_R^*	Termo fonte radiativo para o espectro regularizado [W/m^3]
r	Coordenada radial [m]
R	Raio [m]
R_u	Constante universal dos gases [$\text{J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$]
s	Caminho, posição espacial
\vec{s}	Direção
s^*	Estado de referência para o modelo CW
S_i	Intensidade da linha espectral i [$\text{cm}^{-1}/(\text{molécula}\cdot\text{cm}^{-2})$, 296 K]
t	Coefficiente para o perfil de temperatura bidimensional
T	Temperatura [K]
T^*	Temperatura adimensional
T_a	Temperatura de absorção [K]
T_b	Temperatura de corpo negro [K]
T_{med}	Temperatura média [K]
T_g	Temperatura do gás [K]
T_a^*	Temperatura de absorção adimensional
T_0	Temperatura de referência dos bancos de dados espectrais [K, 296 K]
u_{ij}	Função que descreve o estado termodinâmico de um gás

v_{ij}	Função que descreve o comportamento espectral de um gás
w	Função do número de onda acumulado
x	Posição espacial [m]
$y_{c,i}$	Coefficiente para o perfil de fração molar de dióxido de carbono
$y_{w,i}$	Coefficiente para o perfil de fração molar de vapor de água
Y	Fração molar
z	Coordenada axial [m]

SÍMBOLOS GREGOS

α_i ,	Valor do número de onda no modelo CW [cm^{-1}]
β_i	Valor do número de onda no modelo CW [cm^{-1}]
γ_i	Meia largura da linha espectral i [$(\text{cm.atm})^{-1}$]
γ_{ar}	Meia largura devido à colisão das moléculas do gás com as moléculas do ar [$(\text{cm.atm})^{-1}$]
γ_{auto}	Meia largura considerando a colisão entre as moléculas do gás [$(\text{cm.atm})^{-1}$]
γ_c	Meia largura para alargamento por colisão [$(\text{cm.atm})^{-1}$]
γ_d	Meia largura para alargamento Doppler [$(\text{cm.atm})^{-1}$]
γ_n	Meia largura para alargamento natural [$(\text{cm.atm})^{-1}$]
δ	Erro local no cálculo do fluxo de calor [%]
Δ_i	Intervalo espectral no modelo CW [cm^{-1}]
$\Delta\eta_i$	Intervalo espectral [cm^{-1}]
$\Delta\eta_{max}$	Intervalo para construção do espectro [cm^{-1}]
$\Delta\eta_p$	Intervalo espectral para definição de \bar{C}_η [cm^{-1}]

ΔT_p	Passo de temperatura para construção do espectro [K]
ΔV	Volume [m ³]
ε	Emitância total
ζ	Erro local no cálculo do termo fonte radiativo [%]
η	Número de onda [cm ⁻¹]
η_0	Número de onda no vácuo [cm ⁻¹]
η^*	O maior número de onda [cm ⁻¹]
θ_m	Ângulo formado com uma direção [rad]
κ	Coefficiente de absorção [cm ⁻¹]
κ_j	Coefficiente de absorção do gás cinza j [cm ⁻¹]
$\kappa_{p,j}, \kappa_{p,\eta}$	Coefficiente de absorção baseado na pressão [(m.atm) ⁻¹]
$\kappa_{p,j,e}$	Coefficiente de emissão baseado na pressão [(m.atm) ⁻¹]
$\kappa_{p,j,a}$	Coefficiente de absorção baseado na pressão [(m.atm) ⁻¹]
κ_η^*	Coefficiente de absorção regularizado [cm ⁻¹]
μ	Cosseno diretor
ν_i	Diferença de energia entre o estado inicial e final [cm ⁻¹]
ξ	Cosseno diretor
$\xi_f, \xi_{f, sb}$	Parâmetros para o cálculo da função F no modelo SLW
σ	Constante de Stefan-Boltzmann [W/(m ² .K ⁴)]
ς	Cosseno diretor
ϕ	Ângulo [rad]
Φ	Representa a dependência espacial da seção transversal de absorção
χ	Fator de interpolação
ψ	Ângulo [rad]
Ψ	Representa a dependência espectral da seção transversal de absorção
ω	Fator de ponderação
Ω	Ângulo sólido [Sr]

SUBÍNDICES

<i>c</i>	Valor de uma variável ou função para CO ₂
<i>l</i>	Limite inferior de uma variável, leste
<i>loc</i>	Condição local
<i>m</i>	Direção
<i>max</i>	Valor máximo
<i>med</i>	Valor médio
<i>n</i>	Norte
<i>o</i>	Oeste
<i>p</i>	Ponto de interesse
<i>ref</i>	Condição de referência
<i>s</i>	Sul
<i>u</i>	Limite superior de uma variável
<i>w</i>	Indica valor de uma variável na parede do domínio, valor de uma variável ou função para H ₂ O

1 INTRODUÇÃO

A radiação térmica está presente em vários processos na engenharia. Em sistemas como fornos para tratamento térmico, geradores de vapor e câmaras de combustão, a radiação é geralmente o mecanismo de transferência de calor dominante devido à presença de fuligem, partículas e gases participantes (que emitem, absorvem e/ou espalham a radiação) em temperaturas elevadas. Em razão da dependência fortemente irregular do coeficiente de absorção em relação ao número de onda, o cálculo da radiação em gases participantes, como dióxido de carbono e vapor de água, é uma tarefa bastante complexa.

Na maior parte das aplicações na engenharia, emissão e absorção de radiação em gases provém de transições em estados de energia vibracional e rotacional, resultando em linhas espectrais distribuídas em torno de números de onda específicos. Atualmente, encontram-se disponíveis bancos de dados relacionados às linhas de absorção, como o HITRAN, *High-resolution TRANsmission molecular absorption database*, [Rothman *et al.*, 2013] e o HITEMP, *High-TEMPerature spectroscopic absorption database*, [Rothman *et al.*, 2010], a partir dos quais é possível obter propriedades de gases com muito mais detalhe que há poucas décadas. A radiação pode ser calculada com considerável precisão através da integração linha-por-linha (LBL), considerando-se as características de emissão e absorção de cada linha espectral. Contudo, devido à grande quantidade de linhas que cobrem o espectro de radiação, essa metodologia exige esforço computacional muito intenso. Por essa razão, uma área de grande interesse consiste na modelagem de gases participantes para reduzir o custo computacional sem resultar em perda de qualidade da solução.

Quando o meio participante é um gás, o coeficiente de absorção é composto por milhões de linhas espectrais causadas por níveis de energia rotacionais, vibracionais e (em temperaturas muito elevadas) eletrônicos. Cada linha espectral é levemente alargada por diversos mecanismos concorrentes. São eles: alargamento por colisão (devido à colisão entre moléculas; dominante na maioria dos sistemas de combustão e outras aplicações em pressões maiores ou iguais à atmosférica), alargamento Doppler (devido ao efeito Doppler em moléculas movendo-se rapidamente; dominante em altitudes elevadas e em aplicações aeronáuticas) e alargamento Stark (devido a campos elétricos; importante no estudo de plasma). O resultado desses efeitos é um coeficiente de absorção que oscila muito ao longo do espectro, dificultando a integração LBL da RTE. Em função disso, para aplicações práticas, usam-se modelos para representar o comportamento espectral de gases participantes.

Os bancos de dados espectrais, como o HITRAN e HITEMP, propiciaram o desenvolvimento de diversos modelos que, basicamente, podem ser divididos em dois grandes grupos: modelos de banda e modelos globais. Modest, 2013, fez uma breve revisão sobre os avanços obtidos nessa área nas últimas décadas. A seguir, será apresentada uma lista de trabalhos acompanhada de um detalhamento a respeito dos principais modelos espectrais.

1.1 Revisão Bibliográfica

O modelo mais simples para meios participantes é o de gás cinza (GG), no qual se considera que as propriedades radiativas não dependem do número de onda. Apesar de suas fortes limitações, o modelo GG ainda pode ser encontrado em soluções modernas de problemas de combustão [Xue *et al.*, 2001; Al-Omari, 2006; Desmukh *et al.*, 2007; Narayana e Trouvé, 2009; Crnomarkovic *et al.*, 2013]. O modelo GG é bastante indicado para problemas onde a concentração de fuligem é elevada [Mossi *et al.*, 2012; Cassol *et al.*, 2015].

Os métodos para meios não cinza podem ser agrupados nas seguintes categorias: modelos de banda, modelos globais e método LBL. O método LBL é a forma mais precisa de se obter o coeficiente de absorção de gases. Esse método é bastante flexível, pois pode ser aplicado em todo o espectro. Entretanto, o tempo computacional elevado torna o seu uso proibitivo, principalmente quando a equação da transferência radiativa (RTE) deve ser resolvida dentro de um processo iterativo. Além disso, o método LBL é bastante complexo, pois exige o domínio de algum banco de dados espectral, como HITRAN ou HITEMP. Poucos grupos de pesquisa no mundo dominam a técnica e a utilizam geralmente em casos unidimensionais. Entretanto, alguns problemas bidimensionais têm sido resolvidos através desse método [Mazumber e Modest, 2002; Zhang e Modest, 2002; Modest e Zhang, 2002; Zhang e Modest, 2003; Pal e Modest, 2010; Chu *et al.*, 2012; Consalvi e Liu, 2014].

Os modelos de banda dividem o espectro em intervalos dentro dos quais as propriedades radiativas podem ser assumidas constantes. Dependendo da largura desses intervalos, os modelos são agrupados em modelos de banda larga ou modelos de banda estreita. Esses modelos incluem o modelo de banda estreita estatístico (SNB) [Goody, 1952], relativamente popular, o modelo de banda larga exponencial (EWB) [Edwards e Balakrishnan, 1973] e o modelo k -correlacionado de banda estreita estatística (SNBCK) [Liu e Smallwood, 2004]. No modelo SNB, o espectro é dividido em um número de bandas para as quais a transmitância é calculada. As bandas são suficientemente estreitas para considerar a

radiação de corpo negro constante, e, ao mesmo tempo, largas o suficiente para conter o número de linhas espectrais necessárias para o tratamento estatístico. Geralmente, esse modelo fornece soluções que concordam bem com o método LBL, mas requer tempo computacional elevado. Na ausência da solução LBL, o modelo SNB é utilizado como solução *benchmark* [Soufiani e Djavdan, 1994; Bressloff, 1999; Johansson *et al.*, 2011]. A principal desvantagem dos modelos de banda é que eles fornecem a transmitância ou a absorvância do gás participante em vez do coeficiente de absorção, requerido na solução da RTE.

Os modelos globais, por outro lado, aproximam as propriedades radiativas considerando todo o espectro em vez de intervalos no número de onda. Dentre todos os modelos, os globais requerem menor tempo computacional. São, portanto, frequentemente utilizados para representar o comportamento de gases não cinzas em dinâmica de fluidos computacional (CFD). Existem várias técnicas para modelar produtos de combustão, como CO₂ e H₂O, dentre as quais se destacam o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW) [Denison e Webb, 1993a] e o modelo de distribuição *k*-correlacionado para espectro completo (FSCK) [Modest e Zhang, 2002].

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG), originalmente proposto por Hottel e Sarofim, 1967, dentro do contexto do método das zonas, representa o espectro de radiação através de um conjunto de gases cinza (geralmente, apenas três ou quatro). Nesse modelo, os fatores de ponderação correspondem à fração de energia de corpo negro na região do espectro que corresponde a cada gás cinza. Em geral, os coeficientes para o WSGG são obtidos a partir da interpolação de dados experimentais, como os apresentados no trabalho de Smith *et al.*, 1982. Porém, esses coeficientes são limitados a um conjunto restrito de misturas de espécies químicas, que ainda devem apresentar concentração volumétrica uniforme no meio. Além disso, os coeficientes obtidos por Smith *et al.*, 1982, podem gerar erros muito grandes quando comparadas com dados espectrais mais modernos [Maurense *et al.*, 2008; Mossi *et al.*, 2012]. Mesmo assim, essas correlações continuam sendo aplicadas em trabalhos recentes [Trivic, 2014] e em códigos computacionais comerciais. Correlações atualizadas foram obtidas por Kangwanpongpan *et al.*, 2012, e Dorigon *et al.*, 2013, para mistura de H₂O e CO₂. Em geral, as correlações para o modelo WSGG são propostas para uma ampla faixa de temperaturas, mas a razão entre pressões parciais de H₂O e CO₂ é mantida constante. Johansson *et al.*, 2011, propuseram uma modificação no modelo WSGG para levar em conta variações na razão entre as pressões parciais de H₂O e CO₂.

Modest, 1991, apresentou uma generalização do modelo WSGG, demonstrando que este pode ser empregado com qualquer método de solução da equação da transferência radiativa, desde que seja aplicado em cavidades com paredes negras e em problemas sem espalhamento. Uma nova análise a respeito do modelo WSGG [Modest e Zhang, 2000] revelou que essas restrições podem ser desconsideradas.

A formulação do modelo WSGG é muito simples, pois o coeficiente de absorção de cada gás cinza é constante e o fator de ponderação é descrito por uma função polinomial da temperatura. Além disso, como a aplicação do método em um código computacional não requer nenhum tipo de conhecimento a respeito dos bancos de dados espectrais, o modelo WSGG tornou-se muito popular. Existem vários registros de aplicações do modelo em problemas de oxidação [Becher *et al.*, 2012; Rajhi *et al.*, 2014; Garten *et al.*, 2015], em problemas multidimensionais [bidimensionais – Silva *et al.*, 2007; Centeno *et al.*, 2013; Crnomarkovic *et al.*, 2013; Centeno *et al.*, 2014; Garten *et al.*, 2015; tridimensionais – Trivic, 2014; Bhuiyan e Naser, 2015, Clements *et al.*, 2015, Zhang *et al.*, 2015] e na modelagem de interação radiação turbulência (TRI) [Silva *et al.*, 2007; Krishnamoorthy, 2010; Coelho, 2012; Centeno *et al.*, 2013; Centeno *et al.*, 2014; Shiehnejadhesar *et al.*, 2014]

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW), proposto por Denison e Webb, 1993a, incorpora a obtenção de fatores de ponderação dos gases cinza através da função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (ALB), calculada a partir de informações disponíveis em banco de dados como o HITRAN [Rothman *et al.*, 2013] e HITEMP [Rothman *et al.*, 2010]. Assim, pode-se modelar os gases com um nível de detalhe muito superior ao modelo WSGG, que geralmente se baseia em uma pequena quantidade de gases cinza (normalmente, três ou quatro). Denison e Webb, 1993b; 1995a, forneceram correlações matemáticas para a função distribuição ALB, que facilitam a aplicação do SLW. O modelo SLW foi aprimorado em trabalhos seguintes [Denison e Webb, 1995b; 1995c; Solovjov e Webb, 2000; 2001] para estendê-lo às misturas de vapor de água, dióxido de carbono e fuligem, com concentrações e temperaturas uniformes e não uniformes. Contudo, a extensão do método para esses casos depende do emprego da aproximação de escala [Goody e Yung, 1989], que, para evitar o aparecimento dos termos de Leibniz [Denison e Webb, 1993a] na equação da transferência radiativa, assume que as dependências espectral e espacial do coeficiente de absorção são separáveis. Essa hipótese pode conduzir a erros consideráveis quando há variações intensas na temperatura e nas concentrações das

espécies químicas no meio, como ocorre em processos de combustão. Denison e Webb, 1995d, apresentam uma extensa revisão sobre o modelo SLW.

Solovjov *et al.*, 2011a, propuseram um modelo SLW reduzido onde o meio participante é substituído por um único gás cinza e por janelas transparentes. O modelo, denominado SLW-1, fornece resultados melhores que o modelo GG e possui tempo computacional reduzido quando comparado ao SLW. Solovjov *et al.*, 2011b, apresentaram a extensão do modelo SLW-1 para solução de problemas compostos por mistura de gases não homogêneos, não isotérmicos e fuligem.

O modelo da função distribuição de absorção (ADF) [Pierrot *et al.*, 1999a; 1999b] é um modelo global semelhante ao SLW. A diferença entre esses dois modelos está no cálculo dos fatores de ponderação dos gases cinza. Uma generalização do conceito dessa função distribuição foi proposta através da introdução de gases fictícios [Pierrot *et al.*, 1999b]. O novo modelo, denominado função distribuição de absorção baseada em gases fictícios (ADFFG), evita o uso da aproximação de escala em meios não homogêneos.

Um avanço na modelagem de gases participantes foi alcançado com o método do número de onda acumulado (CW) [Solovjov e Webb, 2002; 2005], onde um fator de correção local substitui a aproximação de escala e a integração espectral é realizada em intervalos espectrais fixos. Não há, portanto, produção dos termos de Leibniz na RTE. A técnica provou ser capaz de gerar bons resultados para o termo fonte radiativo em um conjunto de problemas não isotérmicos. Contudo, como demonstrado por Galarça *et al.*, 2011, uma hipótese fundamental do método impede que haja conservação de energia, gerando erros consideráveis na determinação do fluxo de calor radiativo. O modelo CW modificado (MCW) [Galarça *et al.*, 2011] foi proposto para impor o balanço de energia ao mesmo tempo em que mantém o mesmo termo fonte radiativo do modelo CW. Apesar de o método MCW ter resolvido a principal deficiência do modelo CW, o tempo computacional exigido tornou-se ainda maior, o que pode dificultar sua aplicação em problemas acoplados de combustão, nos quais a equação da transferência radiativa deve ser resolvida um grande número de vezes dentro de um processo de cálculo iterativo. Nos últimos anos, o modelo CW sofreu algumas modificações para reduzir o tempo computacional [Salinas, 2008] e para estendê-lo a problemas com paredes não cinzas [Solovjov *et al.*, 2013].

Solovjov e Webb, 2008, apresentaram uma nova aproximação para os modelos SLW e CW, onde o meio participante não isotérmico é desmembrado em várias camadas de gás isotérmicas. Essa técnica, denominada multicamada (ML), elimina os termos de Leibniz, pois

a integração espectral da equação da transferência radiativa é realizada em camadas de gás uniformes, e, portanto, os intervalos de integração não variam com a coordenada espacial dentro de cada camada. Entretanto, a integração na interface entre as camadas de gás requer considerações especiais para que haja consistência entre as intensidades de radiação das camadas adjacentes. Solovjov e Webb, 2010, modificaram o fator de correção local do modelo CW [Solovjov e Webb, 2002] para aplicá-lo no SLW. Nesse caso, a integração é realizada em intervalos espectrais fixos, portanto não há produção de termos de Leibniz.

O modelo k -correlacionado (CK) assume que, para uma faixa estreita do espectro, a função de Planck pode ser considerada constante. Assim, a posição exata de uma linha espectral não é importante na sua integração. Se um meio é homogêneo ou o coeficiente de absorção obedece à aproximação de escala [Goody *et al.*, 1989], o coeficiente de absorção pode ser reordenado em uma função suave e monotonicamente crescente. Com base nisso, Modest e Zhang, 2002, propuseram o modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo (FSCK), o qual emprega os mesmos argumentos que permitiram o desenvolvimento do modelo WSGG. Quando o FSCK é utilizado em problemas com meio homogêneo e isotérmico, os resultados concordam perfeitamente com o método LBL. Nos demais casos, a solução fica sujeita as limitações da aproximação de escala [Mazumder e Modest, 2002]. Para esses casos, Zhang e Modest, 2002, propuseram o modelo de distribuição k -correlacionado para espectro completo multiescala (MSFSCK), que é uma variação do FSCK. O modelo FSCK tem sido utilizado para solução de problemas bidimensionais [Zhang e Modest, 2002; Ma *et al.*, 2014].

Em geral, os modelos SLW e CW são aplicados em soluções de problemas unidimensionais, onde o mecanismo de transferência de calor é somente a radiação térmica. Recentemente, esses modelos têm sido aplicados na solução de problemas de transferência de calor combinada [Ismail e Salinas, 2006 (CW – condução e radiação); Colomer *et al.*, 2007; Ibrahim *et al.*, 2013, Laouar-Meftah *et al.*, 2014 (SLW – convecção e radiação)]. Apesar de os modelos GG e WSGG serem os preferidos para solução de problemas multidimensionais, existem algumas aplicações do modelo SLW nessas condições [cavidades 2D – Goutiere *et al.*, 2000; Çayan e Selçuk, 2007; Ibrahim *et al.*, 2013; Garten *et al.*, 2015], [cavidades 3D – Krishnamoorthy, 2010; Doner e Selçuk, 2013]. Além disso, existem algumas aplicações dos modelos SLW [Coelho *et al.*, 2003; Coelho, 2012] e FSCK [Coelho, 2012; Consalvi, 2012] em TRI.

Modelos modernos como SLW e FSCK, aplicados em condições de meio não isotérmico e não homogêneo, podem produzir grandes erros no cálculo do fluxo de calor e do termo fonte radiativos. Por exemplo, o cálculo do fluxo de calor na parede de uma cavidade unidimensional, através do modelo SLW (mistura de H_2O e CO_2 com razão de frações molares não constantes) resultou num erro de 17% quando comparado com a solução LBL [Solovjov *et al.*, 2011b]. O modelo FSCK aplicado na solução de uma câmara de combustão cilíndrica bidimensional, preenchida com uma mistura de H_2O e CO_2 com razão de frações molares constante, forneceu um erro em torno de 4% para o termo fonte radiativo [Modest e Zhang, 2002]. Em outro problema, com razão de frações molares não constantes, foi adicionado metano na câmara de combustão. A razão de frações molares de H_2O e CO_2 foi mantida constante, mas a fração molar de CH_4 foi reduzida ao longo da câmara. Nesse caso, o erro máximo atingiu 50% na região de entrada da câmara. Para contornar essa dificuldade, foi proposto o modelo FSCK multiescala [Zhang e Modest, 2002] que reduziu o erro para 6%.

Com base nos trabalhos analisados, constata-se que a integração espectral da equação da transferência radiativa em problemas não isotérmicos e/ou não homogêneos ainda é uma tarefa bastante complexa. Mesmo os modelos mais avançados enfrentam dificuldades nessas condições. No SLW, por exemplo, os intervalos de integração espectral variam com a posição espacial, o que provoca o aparecimento de termos de Leibniz na integração da RTE. Isso ocorre porque a intensidade e a meia largura das linhas espectrais dependem da temperatura, da pressão e da concentração das espécies químicas. O modelo SLW propõe a aproximação de escala para evitar o surgimento dos termos de Leibniz. Entretanto, essa aproximação, aplicada no espectro molecular dos gases, torna-se a principal fonte de erro no SLW. Será demonstrado neste trabalho que, para um espectro construído artificialmente de acordo com a aproximação de escala, as soluções LBL e SLW apresentam excelente concordância. Além disso, será estudado o efeito da temperatura de referência, um dos principais parâmetros no modelo SLW.

Neste trabalho, os fundamentos dos modelos WSGG e SLW foram utilizadas para o desenvolvimento de um novo modelo espectral para integração espectral da RTE (integração com respeito ao número de onda), denominado soma-ponderada-de-gases-cinza com coeficientes não constantes (NCC-WSGG). Assim como no WSGG e no SLW, no NCC-WSGG, o espectro é dividido em uma determinada quantidade de gases cinza. Porém, no NCC-WSGG, os coeficientes de absorção e de emissão de cada gás cinza são diferentes e dependem da temperatura. Semelhantemente ao modelo SLW, define-se uma condição de

referência para manter os intervalos espectrais fixos e, portanto, evitar os termos de Leibniz na RTE. O modelo foi aplicado em problemas unidimensionais e bidimensionais, contendo CO_2 , H_2O e misturas dessas duas espécies químicas. Comparações com a solução LBL revelaram que o NCC-WSGG pode fornecer resultados muito bons em problemas não isotérmicos e não homogêneos, mesmo quando a razão entre as pressões parciais das espécies químicas não é constante.

1.2 Objetivos

No Brasil, existe um crescente interesse na modelagem da combustão, como demonstram iniciativas como a Rede Nacional de Combustão. Embora existam vários grupos de pesquisa voltados ao estudo dos processos envolvidos na combustão, como cinética química e transporte turbulento, há ainda poucos grupos dedicados ao estudo de radiação em gases participantes. Apesar de alguns esforços na solução desse problema através de códigos computacionais comerciais, como CFX, Fluent e Star-CD, os modelos disponíveis nesses códigos (meio cinza ou a soma-ponderada-de-gases-cinza) são, muitas vezes, incapazes de levar em conta diversos aspectos encontrados em processos de combustão, como a variação nas concentrações das espécies químicas.

Neste trabalho, serão apresentados vários resultados encontrados através de alguns modelos globais para gases participantes (CW, SLW e WSGG). Será dada uma atenção especial ao modelo SLW, que possui algumas deficiências para modelar meios não isotérmicos e/ou não homogêneos. Nesse contexto, um dos principais objetivos é identificar algumas deficiências do modelo SLW e propor alterações na sua formulação para corrigi-las. De acordo com alguns testes realizados, a principal falha do SLW deve-se ao fato de que o espectro real não segue a aproximação de escala (que assume que as dependências espacial e espectral da seção transversal de absorção são separáveis). Foram realizadas diversas tentativas para correção do espectro, mas nenhuma delas surtiu o efeito desejado.

Por outro lado, o modelo WSGG, apesar de apresentar uma formulação bastante simples, produz, na maioria das vezes, soluções que podem ser melhores do que aquelas obtidas através dos modelos mais modernos. Como no WSGG os coeficientes de absorção e de emissão são iguais e não dependem da temperatura, foi proposto um modelo (NCC-WSGG) onde esses efeitos fossem considerados. O modelo NCC-WSGG será aplicado em

problemas unidimensionais e bidimensionais, abrangendo misturas não isotérmicas e não homogêneas de CO₂ e H₂O.

Outra contribuição deste trabalho é o desenvolvimento de uma rotina para a integração espectral (integração em relação ao número de onda) através do método LBL. A rotina foi desenvolvida para cavidades cilíndricas axissimétricas. Essa tarefa foi realizada em conjunto com o Felipe Centeno (colega do Laboratório de Radiação Térmica da UFRGS). Por fim, este trabalho também visa a contribuir com a consolidação de uma linha de pesquisa no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFRGS voltada especificamente para o estudo de radiação em gases de combustão.

1.3 Organização do Trabalho

O Capítulo 2 fornece alguns detalhes a respeito da radiação térmica em meios participantes. A integração LBL da equação da transferência radiativa é um dos itens abordados. É apresentado também o banco de dados espectral HITEMP, que foi utilizado para obtenção do coeficiente de absorção para as espécies químicas estudadas neste trabalho.

No Capítulo 3 são discutidos alguns modelos para a integração espectral da equação da transferência radiativa, com destaque para os modelos globais WSGG, SLW e CW. Esse capítulo também apresenta o modelo NCC-WSGG, que foi desenvolvido nesta Tese. O Capítulo 4 fornece uma comparação dos resultados de alguns modelos globais com o método LBL na solução de problemas não isotérmicos. São apresentados resultados para espécies químicas independentes e para misturas. Além disso, é mostrado um estudo mais detalhado do modelo SLW, onde se avalia a temperatura de referência e a aproximação de escala. O Capítulo 4 ainda apresenta os resultados do NCC-WSGG para problemas unidimensionais e bidimensionais, envolvendo CO₂, H₂O e misturas dessas espécies químicas. Em todos os casos estudados, os resultados do modelo NCC-WSGG são comparados com a solução LBL.

O Capítulo 5 traz as conclusões e algumas propostas de continuidade da pesquisa, que incluem a aplicação do modelo NCC-WSGG em problemas com a presença de fuligem e o desenvolvimento de um método para acoplar várias espécies químicas (CO, CO₂, H₂O e CH₄).

O Apêndice A fornece detalhes a respeito da geração do espectro para CO₂ e H₂O através do banco de dados HITEMP 2010. Os demais Apêndices apresentam dados referentes ao modelo NCC-WSGG.

2 RADIAÇÃO TÉRMICA EM MEIOS PARTICIPANTES

2.1 Alargamento das linhas espectrais

O mecanismo de transferência de calor por radiação em meios participantes (onde gases, líquidos ou partículas sólidas absorvem, emitem e/ou espalham a radiação) tem grande importância em processos que ocorrem em temperaturas elevadas. No caso dos gases, o coeficiente de absorção exibe dependência bastante irregular em relação ao número de onda. Isso é ilustrado na Figura 2.1, que apresenta, para uma faixa estreita do espectro, o coeficiente de absorção κ_η de um meio contendo 20 % em volume de vapor de água. Esse comportamento ocorre porque as moléculas, átomos, íons e elétrons livres, que compõem os gases, podem variar seus níveis de energia.

O fenômeno da radiação pode ser explicado através de ondas eletromagnéticas (teoria de ondas eletromagnéticas) ou através de fótons (mecânica quântica). Em geral, propriedades radiativas de líquidos e sólidos são descritas utilizando-se a teoria de ondas eletromagnéticas, enquanto que propriedades de gases são mais convenientemente obtidas através da mecânica quântica. Para transferência de calor, a região de interesse no espectro da radiação eletromagnética está compreendida no intervalo de comprimento de onda que vai de 0,1 até 100 μm (radiação térmica), dentro do qual está a região da luz visível que se estende aproximadamente de 0,4 até 0,7 μm .

Do ponto de vista da mecânica quântica, a emissão e a absorção correspondem, respectivamente, à liberação e captura de fótons. Quando um fóton é emitido ou absorvido, a energia de uma partícula é reduzida ou aumentada. A magnitude da transição de energia está relacionada à frequência da radiação emitida ou absorvida [Modest, 2003]. A energia de um fóton é dada por hf , onde h é a constante de Planck e f é a frequência da energia do fóton. Como a mudança de estado de energia de uma molécula envolve níveis discretos, somente fótons com energia E_f podem provocar uma transição. Assim,

$$E_f = E_{m,j} - E_{m,i} = hf_{ij} \quad (2.1)$$

onde $E_{m,i}$ e $E_{m,j}$ são os níveis de energia que uma molécula podem assumir e f_{ij} é a frequência com que ocorre a transição do nível de energia i para j . De acordo com a Equação 2.1, apenas frequências específicas estariam associadas à emissão e absorção da radiação.

Assim, o espectro deveria ser representado por linhas verticais nos pontos onde esses processos ocorrem. Porém, outros efeitos causam a emissão e absorção em torno da frequência f_{ij} (ou do número de onda η_{ij}), provocando o alargamento de linha representado na Figura 2.2 (γ representa a meia largura da linha espectral, que é a metade da largura da linha medida na metade da altura). Alguns desses efeitos são os alargamentos natural, Doppler, por colisão e Stark [Modest, 2003; Howell *et al.*, 2011]. Esses mecanismos serão discutidos a seguir.

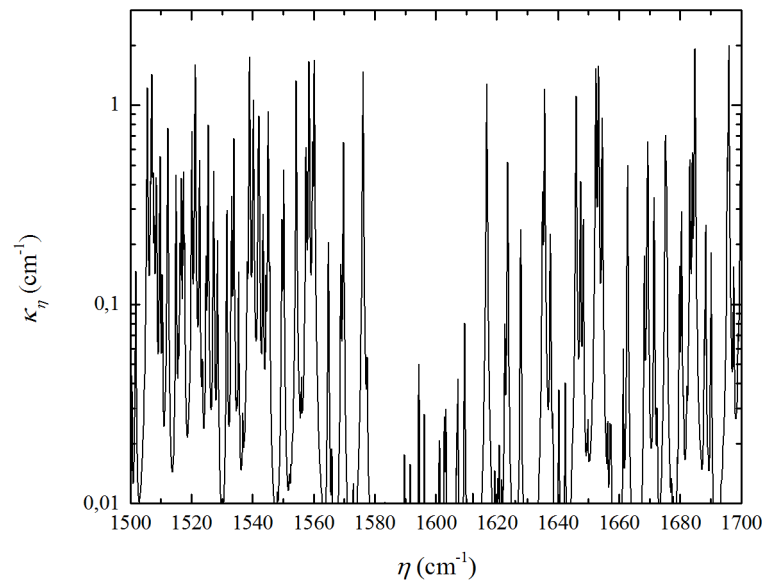


Figura 2.1 – Coeficiente de absorção de uma mistura de ar (gás inerte) e de 20 % em volume de vapor de água na temperatura de 400 K e pressão total de 1 atm (HITEMP 2010).

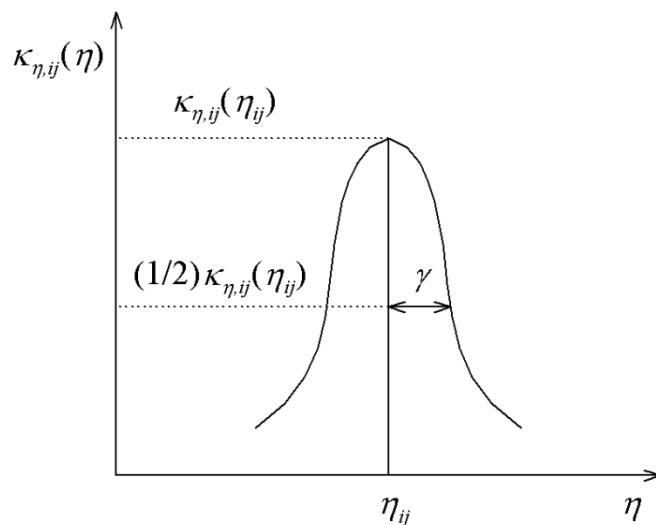


Figura 2.2 – Coeficiente de absorção de para uma linha espectral alargada para transição entre os níveis de energia i e j [Adaptada de Howell *et al.*, 2011].

2.1.1 Alargamento natural

Na ausência de qualquer efeito externo, um emissor estacionário emite energia em um intervalo espectral finito em cada número de onda correspondente a uma transição. Esse alargamento natural vem da incerteza nos valores dos níveis de energia $E_{m,i}$ e $E_{m,j}$ dos estados de transição e é descrito pelo perfil de Lorentz, apresentado a seguir:

$$\kappa_{\eta,ij}(\eta) = \frac{S_{ij}}{\pi} \frac{\gamma_n}{(\eta - \eta_{ij})^2 + \gamma_n^2} \quad (2.2)$$

onde γ_n é a meia largura para o alargamento natural e S_{ij} é a intensidade da linha espectral. Em aplicações de engenharia a meia largura para o alargamento natural é pequena quando comparada aos outros mecanismos de alargamento; por isso, o alargamento natural é normalmente desprezado [Howell *et al.*, 2011].

2.1.2 Alargamento Doppler

Os átomos e moléculas de um gás absorvedor ou emissor não são estacionários, mas tem uma distribuição de velocidades associada a sua energia térmica. Se um átomo ou molécula está emitindo em um número de onda η_i e ao mesmo tempo está se movendo a uma velocidade v em direção a um observador, o comprimento de onda η percebido pelo observador é incrementado e é dado por $\eta = \eta_i [1 + (v/c)]$, onde c é a velocidade de propagação da radiação eletromagnética no meio. Se o emissor está se movendo para longe do observador, v é negativa e o número de onda observado é menor que η_i . Se o gás está em equilíbrio térmico, a distribuição de velocidades das moléculas é dada pela distribuição de Maxwell-Boltzmann, que resulta em um formato de linhas espectrais com distribuição Gaussiana, dado por:

$$\kappa_{\eta,ij}(\eta) = \frac{S_{ij}}{\gamma_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp \left[-(\eta - \eta_{ij})^2 \frac{\ln 2}{\gamma_D} \right] \quad (2.3)$$

onde γ_D é a meia largura para o alargamento Doppler, que varia com $T^{1/2}$, indicando que o alargamento Doppler torna-se importante em temperaturas elevadas.

2.1.3 Alargamento por colisão

À medida que a pressão do gás aumenta, a taxa de colisão por um átomo ou molécula também é incrementada. As colisões podem perturbar os estados de energia de átomos ou moléculas, resultando em alargamento das linhas espectrais. Para partículas sem carga elétrica, as linhas espectrais são caracterizadas pelo perfil de Lorentz, como no caso do alargamento natural.

$$\kappa_{\eta,ij}(\eta) = \frac{S_{ij}}{\pi} \frac{\gamma_c}{(\eta - \eta_{ij})^2 + \gamma_c^2} \quad (2.4)$$

onde a meia largura para o alargamento por colisão γ_c é determinada pela taxa de colisão.

Na maioria das aplicações de engenharia, considera-se somente o alargamento por colisão entre as moléculas e os demais mecanismos são desprezados. Wang e Modest, 2004, mostraram que, quando a pressão total é maior ou igual a 1,0 atm, o alargamento Doppler pode ser negligenciado para temperaturas inferiores a 2500 K. Para baixas pressões (menores que 1,0 atm), o efeito do alargamento Doppler pode se tornar importante a temperaturas elevadas.

2.1.4 Alargamento Stark

O efeito Stark, que ocorre quando os níveis de energia das partículas radiativas são muito perturbados por campos elétricos intensos, pode produzir grande alargamento das linhas espectrais. Esse efeito é observado em gases ionizados devido às interações entre as partículas radiativas com elétrons e fótons.

Nesta seção, o fenômeno do alargamento espectral foi discutido considerando-se um único átomo ou molécula. Se um gás possui mais de um componente, o alargamento por colisão é causado por colisões entre as moléculas da própria espécie química (autoalargamento) e por colisões com outras espécies. Como será mostrado na Seção 2.2, ambos os processos devem ser incluídos no cálculo da meia largura das linhas espectrais.

2.2 Coeficiente de absorção

Como mencionado anteriormente, o coeficiente de absorção de gases possui variação muito irregular com o número de onda. De acordo com Howell *et al.*, 2011, na maioria das aplicações de engenharia, a seção transversal de absorção de gases (utilizada no cálculo do coeficiente de absorção) pode ser obtida através do perfil de colisão de Lorentz, dado por:

$$C_\eta = \sum_i \frac{S_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{(\eta - \eta_i)^2 + \gamma_i^2} \quad (2.5)$$

onde η é o número de onda, C_η é a seção transversal de absorção, $\text{cm}^2/\text{molécula}$, S_i é a intensidade integrada da linha i , η_i é a localização da linha no espectro (disponibilizada em bancos de dados, como o HITEMP), γ_i é a meia largura da linha. O somatório da Equação 2.5 inclui as linhas que estão dentro de um intervalo $\Delta\eta$, para as quais a contribuição para C_η é significativa (a avaliação do parâmetro $\Delta\eta$ pode ser encontrada no Apêndice A). De acordo com Wang e Modest, 2004, o perfil de Lorentz é adequado para problemas onde a pressão total é maior ou igual a 1 atm e a temperatura é menor que 2500 K.

A intensidade integrada de uma linha do espectro S_i , a temperatura T (K), é calculada através da seguinte equação [Rothman *et al.*, 2010]:

$$S_i(T) = S_i(T_0) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \frac{\exp(-C_2 E_i / T)}{\exp(-C_2 E_i / T_0)} \frac{1 - \exp(-C_2 \nu_i / T)}{1 - \exp(-C_2 \nu_i / T_0)} \quad (2.6)$$

onde T_0 é a temperatura de referência do banco de dados (no HITEMP, é utilizado $T_0 = 296$ K para manter a mesma padronização do banco de dados HITRAN), Q é a soma total de partições internas (depende da molécula em questão, do seu isótopo e da temperatura) [Fischer *et al.*, 2003] e representa a soma de todos os estados de energia (vibracional, rotacional, torsional e elétrico), E_i é a energia do estado inferior (cm^{-1}), ν_i é a diferença de energia entre o estado inicial e final (cm^{-1}), C_2 é a segunda constante de radiação. Os parâmetros $S_i(T_0)$, E_i e ν_i são fornecidos pelo banco de dados HITEMP. O valor de Q é

obtido através da rotina em Fortran chamada TIPS2008 [Fischer *et al.*, 2003], que acompanha os bancos de dados HITRAN e HITEMP.

A meia largura γ_i é calculada levando-se em conta a temperatura T e a fração molar Y do gás. Rothman *et al.*, 1998, propõem a seguinte expressão para obtenção de γ_i :

$$\gamma_i(p, T) = \left(\frac{T_0}{T}\right)^n [\gamma_{ar,i}(p_0, T_0)(p - p_i) + \gamma_{auto,i}(p_0, T_0)p_i] \quad (2.7)$$

onde n é o coeficiente de dependência da temperatura, γ_{auto} é a meia largura considerando a colisão entre as moléculas do gás, γ_{ar} é a meia largura devido à colisão das moléculas do gás com as moléculas do ar, p_i e p são as pressões parcial e total, respectivamente. Os parâmetros n , γ_{auto} e γ_{ar} são provenientes do banco de dados HITEMP. A rigor, seriam necessários dois coeficientes de dependência da temperatura: um para as colisões entre as moléculas, n_{auto} , e outro para as colisões das moléculas com o ar n_{ar} . No banco de dados, só está disponível n_{ar} . Então se faz $n = n_{ar} = n_{auto}$. Esse procedimento é proposto por Rothman *et al.*, 1998, e adotado na literatura [Evseev *et al.*, 2012; Pearson *et al.*, 2013].

Finalmente, o coeficiente de absorção é calculado através da seguinte equação:

$$\kappa_\eta(p, T, Y) = N(p, T)Y C_\eta(p, T, Y) \quad (2.8)$$

em função da fração molar $Y = p_i / p$ e da densidade molar do gás $N(p, T) = pN_A / R_u T$, onde N_A é o número de Avogadro e R_u é a constante universal dos gases.

Como mencionado anteriormente, os parâmetros requeridos para obtenção do coeficiente de absorção espectral (η_i , $S_i(T_0)$, E_i , ν_i , η , γ_{ar} , γ_{auto}) podem ser obtidos através de bancos de dados como HITRAN e HITEMP. Para vapor de água e dióxido de carbono a altas temperaturas, o banco de dados HITEMP é mais apropriado, pois é obtido na temperatura de 1000 K. Isso significa que extrapolações para temperaturas mais elevadas com esse banco de dados são mais adequadas do que com o HITRAN, que é obtido a 296 K.

2.3 O banco de dados HITEMP

O desenvolvimento da espectroscopia de alta resolução tornou possível medir a intensidade e a posição de linhas espectrais. Em 1973, o Air Force Cambridge Research Laboratories publicou um relatório [McClatchey *et al.*, 1973] com dados espectrais para a maioria dos constituintes da atmosfera terrestre em baixas temperaturas. Mais tarde, com as contribuições de diversos pesquisadores do mundo, isso deu origem à primeira versão do banco de dados HITRAN (*High resolution TRANSmision molecular absorption*), publicado em 1987 [Rothman *et al.*, 1987]. Esse banco de dados é mantido pelo Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, com atualizações periódicas. A última versão é o HITRAN 2012 [Rothman *et al.*, 2013], que inclui informações detalhadas de 47 moléculas. Originalmente, o banco de dados HITRAN foi criado para simulações e análise de observações na atmosfera terrestre. Consequentemente, algumas transições e faixas que são significativas em altas temperaturas podem estar faltando ou apresentar erros devido às extrapolações fora da faixa de condições usadas nos experimentos de laboratório originais.

À medida que a popularidade do HITRAN cresceu, tornou-se necessário um banco de dados para temperaturas elevadas. A primeira versão do banco de dados HITEMP (*HIGH-TEMPerature spectroscopic absorption parameters*) surgiu em 1995 [Rothman *et al.*, 1995], desenvolvida através de modelos teóricos para H₂O, CO₂, CO e OH.

Para estudos de combustão, chamas e jatos, utiliza-se a base de dados HITEMP, análoga à base de dados HITRAN, porém obtida com condições de temperatura de 1000 K. Em ambas as bases de dados, as intensidades das linhas espectrais foram padronizadas para uma temperatura de 296 K. A edição de 2010 do banco de dados HITEMP (HITEMP 2010) [Rothman *et al.*, 2010] contém parâmetros para cinco moléculas (H₂O, CO₂, CO, NO e OH). Para vapor de água e dióxido de carbono, existe uma vasta quantidade de dados, o que torna os arquivos muito grandes. Portanto, os arquivos estão divididos de acordo com intervalos no número de onda. Por exemplo, o arquivo “01_50-150_HITEMP2010.par” (formato ASCII HITRAN) contém as linhas espectrais para o vapor de água (01 é a designação do HITRAN para H₂O) no intervalo $50 < \eta < 150 \text{ cm}^{-1}$. Para vapor de água, são 34 arquivos (tamanho total: 17,2 GB), enquanto para dióxido de carbono são 20 arquivos (tamanho total: 1,68 GB).

As intensidades das linhas espectrais no HITEMP são fornecidas à temperatura padrão de 296 K, sendo possível empregar a soma de partição Q , como recomendado por [Rothman *et al.*, 2010] para calculá-las em uma temperatura qualquer. O número de linhas espectrais

para cada molécula no HITEMP é apresentado na Tabela 2.1. A Tabela 2.2 ilustra alguns parâmetros fornecidos pelo HITEMP (a nomenclatura é a mesma utilizada no banco de dados). A Tabela 2.3 mostra um trecho de um arquivo do HITEMP para a molécula de CO₂.

Tabela 2.1 – Conteúdo do HITEMP 2010.

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

Tabela 2.2 – Alguns parâmetros fornecidos no banco de dados HITEMP 2010.

Parâmetro	Descrição
Mol	Número da molécula.
Iso	Número do isótopo.
η_0	Número de onda no vácuo, em cm ⁻¹ .
S	Intensidade, em cm ⁻¹ /(molécula×cm ²).
γ_{ar}	Alargamento da meia largura pelo ar, cm ⁻¹ /atm.
γ_{auto}	Alargamento da meia largura, cm ⁻¹ /atm.
E''	Energia do estado mais baixo, cm ⁻¹ .
n	Coefficiente de dependência da temperatura.

Fonte: adaptada de Rothman *et al.*, 2010.

Tabela 2.3 – Trecho de um arquivo para molécula de CO₂ (HITEMP 2010).

Mol	Iso	η_0	S	γ_{ar}	γ_{auto}	E''	n
2	3	1500,0041	$1,19 \times 10^{-39}$	0,0528	0,065	7645,8863	0,59
2	3	1500,01469	$3,13 \times 10^{-31}$	0,0774	0,097	2613,5042	0,69
2	1	1500,01671	$6,37 \times 10^{-42}$	0,0674	0,066	9819,2872	0,72
2	1	1500,04587	$6,20 \times 10^{-43}$	0,0655	0,064	10366,3001	0,70

Os arquivos dos bancos de dados HITRAN e HITEMP podem ser baixados no site <http://www.cfa.harvard.edu/hitran/>. O acesso aos arquivos é liberado após o preenchimento de um formulário disponibilizado no próprio site. No Apêndice A, são apresentadas todas as simplificações adotadas para geração do espectro através do banco de dados HITEMP 2010.

2.4 Atenuação da intensidade de radiação por absorção

A Figura 2.3 mostra um elemento de volume de espessura ds , que absorve radiação. À medida que a radiação incidente (com intensidade I_η) atravessa o meio, a intensidade é reduzida por absorção. Essa variação é proporcional à magnitude da intensidade local. Considerando-se que não há espalhamento, o coeficiente de proporcionalidade será o próprio coeficiente de absorção. Logo, tem-se:

$$dI_\eta = -\kappa_\eta I_\eta ds \quad (2.9)$$

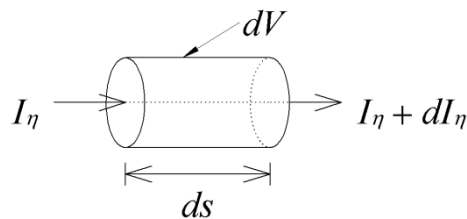


Figura 2.3 – Intensidade de radiação incidindo sobre um elemento de volume, dV [adaptada de Howell *et al.*, 2011].

2.5 Aumento da intensidade de radiação por emissão

A Figura 2.4 mostra um elemento de volume dV localizado no centro de uma cavidade esférica de raio R , cujas paredes são negras e estão em uma temperatura uniforme T . O espaço entre dV e as paredes da cavidade está preenchido com um meio não participante (transparente). O elemento de volume dV limita um meio participante com coeficiente de absorção κ_η . A intensidade espectral incidente em um elemento de área dA_s (sobre dV), a partir do elemento dA (sobre a superfície da cavidade) é $I_\eta(s,0) = I_{b\eta}(\eta,T)$, onde $I_{b\eta}$ é a intensidade de radiação de corpo negro. A variação dessa intensidade em dV devido à

absorção é $-I_{\eta}(0)\kappa_{\eta}ds = -I_{b\eta}(\eta,T)\kappa_{\eta}ds$. A energia absorvida pelo volume diferencial $dsdA_s$ é $-I_{b\eta}(\eta,T)\kappa_{\eta}dsdA_s d\eta d\Omega$, onde $d\Omega = dA/R^2$ e dA_s é a área projetada normal a $I_{\eta}(0)$. A energia emitida por dA e absorvida por dV é $\kappa_{\eta}I_{b\eta}(\eta,T)dVd\eta d\Omega$ (esse resultado é obtido integrando-se sobre $dsdA_s$), onde $d\Omega$ é o ângulo sólido definido por dA quando visto a partir de dV . A energia incidente sobre dV , proveniente de toda a cavidade, é obtida através da integração sobre todos os ângulos sólidos, resultando em $4\pi\kappa_{\eta}I_{b\eta}(\eta,T)dVd\eta$.

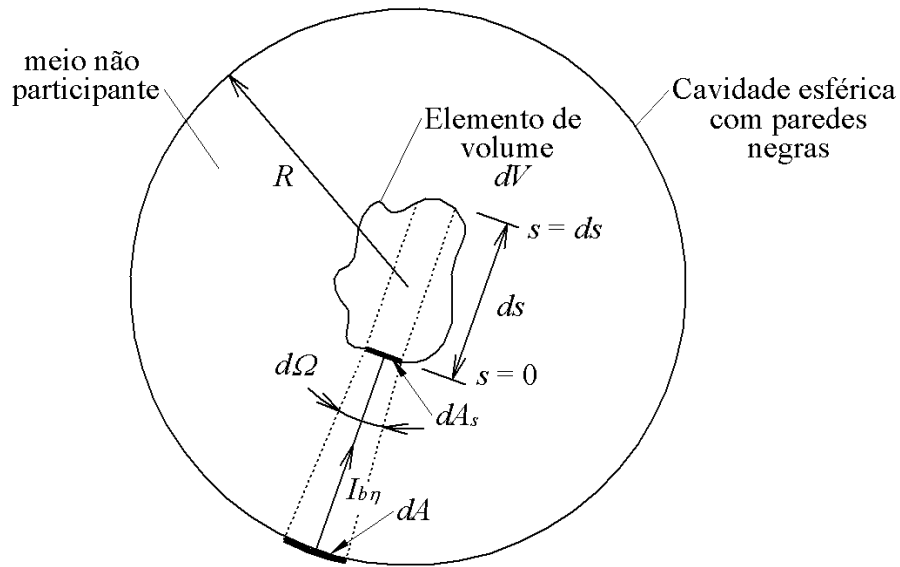


Figura 2.4 – Geometria para dedução da emissão a partir de um volume do meio participante [adaptada de Howell *et al.*, 2011].

Para manter o balanço de energia na cavidade, as energias emitida e absorvida por dV devem ser iguais. Portanto, para um volume isotérmico, tem-se:

$$4\pi\kappa_{\eta}I_{b\eta}(\eta,T)dVd\eta = 4\pi\kappa_{\eta}E_{b\eta}(\eta,T)dVd\eta \quad (2.10)$$

onde $E_{b\eta}$ é o poder emissivo espectral de corpo negro

Considerando-se emissão uniforme em todas as direções, a intensidade espectral emitida por um elemento de volume em uma direção qualquer é:

$$dI_{\eta} = \kappa_{\eta}I_{b\eta}ds \quad (2.11)$$

Na ausência de espalhamento, a combinação das Equações 2.9 e 2.11 conduz à equação da transferência radiativa, que será apresentada na sequência.

2.6 A equação da transferência radiativa e a integração linha-por-linha

Quando um fóton interage com uma molécula de gás, ele pode ser absorvido, aumentando o nível de energia da molécula, ou espalhado, mudando a trajetória do fóton. Reciprocamente, uma molécula pode espontaneamente reduzir seu nível de energia através da emissão de um fóton. A equação da transferência radiativa (RTE) é uma equação de balanço que descreve esses fenômenos através da variação da intensidade de radiação ao longo de um caminho s . Desconsiderando-se o efeito do espalhamento, a RTE pode ser escrita como:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = -\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{b\eta} \quad (2.12)$$

onde o primeiro termo no lado direito representa uma redução na intensidade de radiação devido à absorção; o segundo termo, um aumento na intensidade de radiação devido à emissão. I_η é a intensidade de radiação espectral e $I_{b\eta}$ é a intensidade de radiação espectral de corpo negro, dada pela distribuição de Planck:

$$I_{b\eta} = \frac{E_{b\eta}}{\pi} = \frac{2C_1\eta^3}{e^{C_2\eta/T} - 1} \quad (2.13)$$

onde C_1 é a primeira constante de radiação. Uma vez que cada molécula é uma partícula muito pequena, o espalhamento de fótons é desprezado para aplicações de transferência de calor [Modest, 2003]. Em problemas de combustão com fuligem, o efeito do espalhamento também pode ser desprezado desde que o tamanho das partículas seja pequeno em relação ao intervalo de número de onda correspondente à radiação térmica [Smith *et al.*, 1987; Bressloff, 1999].

A Figura 2.5 apresenta um sistema unidimensional, constituído por duas placas planas paralelas infinitas separadas por uma distância L , contendo um meio participante entre elas. As intensidades de radiação espectrais nas direções positiva e negativa são dadas, respectivamente, pelas equações a seguir:

$$\mu_m \frac{dI_{\eta m}^+(x)}{dx} = -\kappa_\eta I_{\eta m}^+(x) + \kappa_\eta I_{b\eta}(x) \quad (2.14)$$

$$-\mu_m \frac{dI_{\eta m}^-(x)}{dx} = -\kappa_\eta I_{\eta m}^-(x) + \kappa_\eta I_{b\eta}(x) \quad (2.15)$$

onde x representa a posição espacial, μ_m é o cosseno do ângulo θ_m em relação à direção m , $I_{\eta m}^+$ e $I_{\eta m}^-$ são as intensidades de radiação espectral para $\mu_m > 0$ e $\mu_m < 0$, respectivamente. Considerando paredes negras em $x = 0$ e $x = L$, as condições de contorno para as Equações 2.14 e 2.15 são, respectivamente, $I_{\eta m}^+(0) = I_{b\eta}(0)$ e $I_{\eta m}^-(L) = I_{b\eta}(L)$.

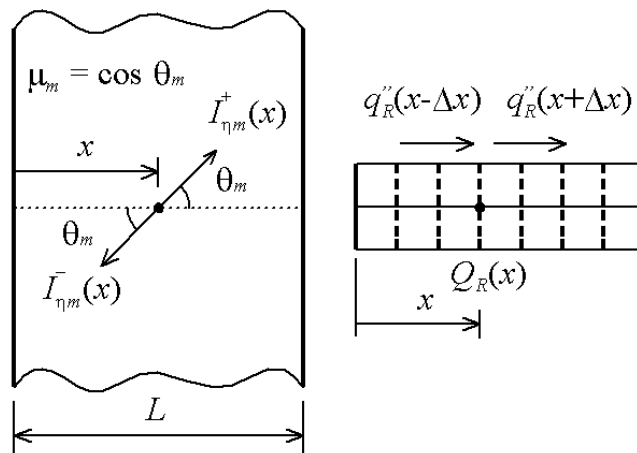


Figura 2.5 – Lado direito: Representação do sistema, constituído por duas placas planas paralelas infinitas contendo um gás participante. Lado esquerdo: discretização espacial para determinação da transferência de calor radiativa.

Após a solução das Equações 2.14 e 2.15, o fluxo, q''_R , e o termo fonte radiativo, Q_R , na posição x podem ser determinados através de:

$$q''_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \int_{\eta} 2\pi\mu_m \omega_m [I_{\eta m}^+(x) - I_{\eta m}^-(x)] d\eta \quad (2.16)$$

$$Q_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \int_{\eta} \left\{ 2\pi\kappa_\eta \omega_m [I_{\eta m}^+(x) + I_{\eta m}^-(x)] - 4\pi\kappa_\eta I_{b\eta}(x) \right\} d\eta \quad (2.17)$$

onde, para n_d direções, os nós μ_m e os fatores de ponderação ω_m do esquema de quadratura são definidos no intervalo [0,1]. Neste trabalho, foi utilizada a quadratura de Gauss-Legendre. Nas equações anteriores, a integração no número de onda através do método LBL permite considerar todos os valores de η apresentados no espectro.

Quando o método LBL é aplicado para solução de problemas onde o meio participante é composto por mais de uma espécie química, o coeficiente de absorção κ_η deve ser modificado na RTE. Por exemplo, para uma mistura de CO₂ e H₂O deve-se fazer a seguinte alteração:

$$\kappa_\eta = \kappa_{\eta,c} + \kappa_{\eta,w} \quad (2.18)$$

onde $\kappa_{\eta,c}$ e $\kappa_{\eta,w}$ são os coeficientes de absorção para CO₂ e H₂O, respectivamente.

2.6.1 A equação da transferência radiativa em coordenadas cilíndricas

Para uma geometria cilíndrica axissimétrica, a RTE é escrita para cada direção ordenada individual, m , como:

$$\frac{\mu_m}{r} \frac{\partial(rI_{\eta m})}{\partial r} + \xi_m \frac{\partial I_{\eta m}}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial(\zeta_m I_{\eta m})}{\partial \varphi} = -\kappa_\eta I_{\eta m} + \kappa_\eta I_{b\eta} \quad (2.19)$$

onde r e z representam as posições radial e axial, μ_m , ξ_m , ζ_m são os cossenos diretores de uma direção ordenada, e φ é o ângulo de revolução ao redor do eixo z . Os valores dos cossenos diretores para a geometria bidimensional estão mostrados na Tabela 2.4, sendo o fator de ponderação $\omega_m = 0,5236$ utilizado para todas as direções [Barve, 2006]. No presente trabalho foram avaliadas vinte e quatro direções ($M = 24$) [Centeno *et al.*, 2014].

Conforme mostrado na Figura 2.6, os cossenos diretores de uma direção \vec{S}_m , são μ_m , ξ_m , ζ_m , e satisfazem a identidade $\mu_m^2 + \xi_m^2 + \zeta_m^2 = 1$. A direção \vec{S}_m pode ser imaginada como um ponto sobre a superfície de uma esfera unitária com a qual uma área superficial, ω_m , está associada. Onde ω_m representa o fator de ponderação das quadraturas angulares e satisfaz ao requisito de que o seu somatório para todas as direções discretas equivale à área superficial da

esfera unitária. Um total de M direções são escolhidas e as áreas angulares são medidas em unidades de 4π , tal que $\sum_{m=1}^M \omega_m = 1$. Na Figura 2.6 estão também mostrados os ângulos ϕ e ψ , os quais são utilizados para localizar o vetor direcional unitário \vec{s}_m .

Tabela 2.4 – Cossenos diretores para a geometria bidimensional.

m	μ_m	ξ_m	m	μ_m	ξ_m
1	-0,224556	-0,948235	13	-0,948235	0,224556
2	0,224556	-0,948235	14	-0,689048	0,224556
3	-0,689048	-0,689048	15	-0,224556	0,224556
4	-0,224556	-0,689048	16	0,224556	0,224556
5	0,224556	-0,689048	17	0,689048	0,224556
6	0,689048	-0,689048	18	0,948235	0,224556
7	-0,948235	-0,224556	19	-0,689048	0,689048
8	-0,689048	-0,224556	20	-0,224556	0,689048
9	-0,224556	-0,224556	21	0,224556	0,689048
10	0,224556	-0,224556	22	0,689048	0,689048
11	0,689048	-0,224556	23	-0,224556	0,948235
12	0,948235	-0,224556	24	0,224556	0,948235

Integrando-se a Equação 2.19 sobre um volume de controle arbitrário, conforme mostrado na Figura 2.7, tem-se:

$$\begin{aligned} & \mu_m (A_n I_{mn} - A_s I_{ms}) + \xi_m (A_l I_{ml} - A_o I_{mo}) - \\ & (A_n - A_s) \frac{1}{\omega_m} (\alpha_{m+1/2} I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2} I_{m-1/2,p}) = -\kappa I_{m,p} \Delta V + \kappa I_{b,p} \Delta V \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde A_n , A_s , A_l e A_o são as áreas correspondentes aos lados do volume de controle para as faces norte, sul, leste e oeste, respectivamente, ΔV é o volume do elemento de controle, e p é o ponto de interesse para o qual se calcula a intensidade I_{mp} . Os termos I_{mn} , I_{ms} , I_{ml} e I_{mo} são as intensidades na direção individual m para os volumes norte, sul, leste e oeste, respectivamente (Figura 2.7). Apenas para simplificar a notação, o subíndice η que indica dependência

espectral foi omitido. O termo $I_{m-1/2,p}$ é a intensidade no ponto de interesse na direção angular $m-1/2$, onde a direção $m\pm 1/2$ define os limites da faixa angular da quadratura numérica ω_m . O termo $(\alpha_{m+1/2}I_{m+1/2,p} - \alpha_{m-1/2}I_{m-1/2,p})$ na Equação 2.20 aparece em consequência da técnica de diferenciação de Carlson e Lathrop, 1968, para o termo com derivada angular, $\partial/\partial\varphi$, na Equação 2.19, e representa o fluxo de energia para fora e para dentro da faixa angular, onde o termo α é dado por:

$$\alpha_{m+1/2} = \alpha_{m-1/2} - \omega_m \mu_m \quad (2.21)$$

sendo o primeiro $\alpha_{m-1/2}$ nulo em cada nível ξ .

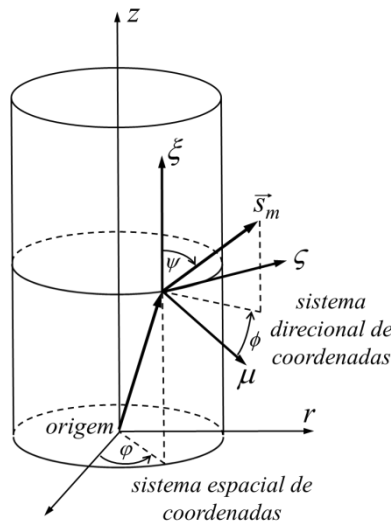


Figura 2.6 – Sistemas espacial e direcional de coordenadas para geometria cilíndrica [adaptado de Menart, 2000].

Na solução da Equação 2.20 para I_{mp} , são utilizadas relações de interpolação para expressar valores de intensidade em pontos desconhecidos por valores de intensidade em pontos conhecidos. Por exemplo, para uma direção m que possua cossenos diretores positivos ($\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$ – Figura 2.7), eliminam-se as intensidades nos pontos desconhecidos I_{mn} , I_{ml} e $I_{m+1/2,p}$ expressando-as em termos de intensidades em pontos conhecidos I_{ms} , I_{mo} e $I_{m-1/2,p}$, aplicando:

$$\begin{aligned}
I_{m,p} &= \chi I_{mn} + (1 - \chi) I_{ms} \\
I_{m,p} &= \chi I_{ml} + (1 - \chi) I_{mo} \\
I_{m,p} &= \chi I_{m+1/2,p} + (1 - \chi) I_{m-1/2,p}
\end{aligned} \tag{2.22}$$

onde χ é um fator de interpolação (neste trabalho, considera-se $\chi = 0,5$ [Barve, 2006]).

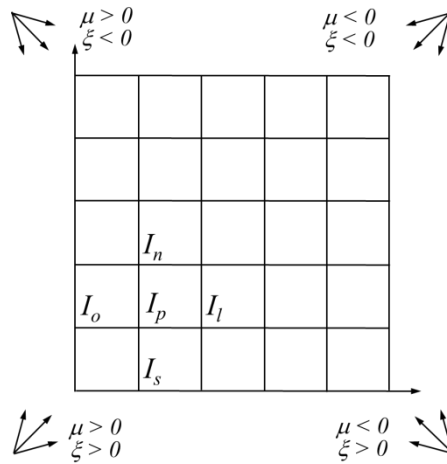


Figura 2.7 – Volume de controle e cossenos diretores para geometria cilíndrica axissimétrica [adaptado de Kaplan *et al.*, 1994].

Substituindo a Equação 2.22 na Equação 2.20 e rearranjando os termos, obtém-se uma expressão para I_{mp} em termos de variáveis conhecidas (para $\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$):

$$I_{m,p} = \frac{(\mu_m A_r I_{ms} + \xi_m A_z I_{mo} - [(A_n - A_s)/\omega_m] A_\alpha I_{m-1/2,p} + \chi \kappa I_{bp} \Delta V)}{(\mu_m A_n I_{ms} + \xi_m A_l - [(A_n - A_s)/\omega_m] \alpha_{m+1/2} + \kappa \chi \Delta V)} \tag{2.23}$$

onde:

$$\begin{aligned}
A_r &= A_s \chi + (1 - \chi) A_n \\
A_z &= A_w \chi + (1 - \chi) A_e \\
A_\alpha &= \alpha_{m-1/2} \chi + (1 - \chi) \alpha_{m+1/2}
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Apenas para simplificar a notação, o subíndice η que indica dependência espectral foi omitido na Equação 2.23.

Uma vez que a intensidade I_{mp} estiver calculada a partir da Equação 2.23, as demais

intensidades vizinhas ainda desconhecidas, I_{mn} , I_{ml} e $I_{p,m+1/2}$, são encontradas com as relações de interpolação, Equação 2.22. Então, essas intensidades são utilizadas como dados de entrada para o cálculo da intensidade para a próxima célula na direção correspondente, e a solução prossegue sucessivamente através da malha inteira para esta direção.

As intensidades de todos os pontos no domínio computacional são calculadas para cada uma das vinte e quatro direções avaliadas, considerando o sinal dos cossenos diretores (Figura 2.7). Primeiramente, resolvem-se as intensidades para cada ponto da malha em cada direção com cossenos diretores negativos ($\mu_m < 0$, $\xi_m < 0$), em seguida resolvem-se para cada direção com cossenos diretores $\mu_m > 0$ e $\xi_m < 0$, então para cada uma das direções onde $\mu_m < 0$ e $\xi_m > 0$; e, finalmente, para cada uma das direções onde $\mu_m > 0$ e $\xi_m > 0$. Para um conjunto positivo de cossenos diretores ($\mu_m > 0$, $\xi_m > 0$), o cálculo inicia no canto inferior esquerdo do domínio computacional e prossegue até o canto superior direito; as intensidades conhecidas estão nas faces sul e oeste, e relações de interpolação (como na Equação 2.22) são utilizadas para eliminar a intensidade dos volumes norte e leste da Equação 2.20 para calcular a intensidade no ponto de interesse, I_{mp} . Para os cossenos diretores $\mu_m < 0$ e $\xi_m > 0$, o cálculo procede do canto inferior direito até o canto superior esquerdo, e as intensidades conhecidas estão nas faces sul e leste. Para os cossenos diretores $\mu_m < 0$ e $\xi_m < 0$, o cálculo prossegue do canto superior direito até o canto inferior esquerdo, e as intensidades conhecidas estão nas faces norte e leste. Finalmente, para os cossenos diretores $\mu_m > 0$ e $\xi_m < 0$, o cálculo prossegue do canto superior esquerdo até o canto inferior direito, e as intensidades conhecidas estão nas faces norte e oeste.

Uma vez que as intensidades tenham sido calculadas, as quantidades integradas direcionalmente podem ser determinadas. O fluxo de calor radiativo espectral, dentro do meio ou em uma superfície, é determinado pela seguinte equação:

$$\vec{q}_{R,\eta}''(s) = \int_{4\pi} I_\eta(s, \vec{s}) \vec{s} d\Omega \cong \sum_{m=1}^M \omega_m I_{\eta m}(s) \vec{s}_m \quad (2.25)$$

onde s é a posição e \vec{s} é a direção correspondente ao ângulo sólido $d\Omega$.

Similarmente, o termo fonte radiativo espectral é calculado através de:

$$Q_{R,\eta}(s) = \kappa_\eta \int_{4\pi} I_\eta d\Omega - 4\pi\kappa_\eta I_{b\eta} \cong \kappa_\eta \sum_{m=1}^M \omega_m I_{\eta m}(s) - 4\pi\kappa_\eta I_{b\eta} \quad (2.26)$$

Integrando-se o fluxo de calor e o termo fonte radiativos espectrais em relação ao número de onda têm-se:

$$\bar{q}_R''(s) = \int_{\eta} \bar{q}_{R,\eta}''(s) d\eta \quad (2.27)$$

$$Q_R(s) = \int_{\eta} Q_{R,\eta}(s) d\eta \quad (2.28)$$

onde a integração com respeito ao número de onda, realizada através do método LBL, permite considerar todos os valores de η apresentados no banco de dados HITEMP. A integração direcional aplicada neste trabalho foi desenvolvida por Barve, 2006. A contribuição desta Tese está na integração espectral linha-por-linha do fluxo de calor e do termo fonte radiativos.

3 MODELOS PARA INTEGRAÇÃO ESPECTRAL DA RTE

A solução da RTE requer uma integração espectral (isto é, integração com respeito ao número de onda), tarefa bastante complexa para meios participantes constituídos por, por exemplo, CO₂ e H₂O, devido ao comportamento altamente irregular do coeficiente de absorção em relação ao número de onda. Esta integração demanda, de um modo geral, a aplicação de modelos espectrais, pois a solução LBL possui um custo computacional elevado, o que não é desejável, já que a radiação pode ser somente uma pequena parte de códigos computacionais aplicáveis em problemas complexos, que podem envolver cinética química e turbulência. Neste capítulo, serão descritos alguns modelos para integração espectral da equação da transferência radiativa (modelos globais WSGG, SLW e CW), com destaque para o modelo NCC-WSGG, que foi desenvolvido nesta Tese.

3.1 Gás cinza (GG)

O modelo de gás cinza (GG) é o mais simples, pois considera que o coeficiente de absorção não depende do número de onda. Essa hipótese é bastante rudimentar, já que, como mencionado anteriormente, o coeficiente de absorção varia muito com o número de onda, mesmo para uma faixa estreita do espectro.

Apesar da simplicidade, o modelo GG ainda é muito empregado na solução de problemas que envolvem combustão, especialmente em soluções tridimensionais [Liu *et al.*, 1998; Porter *et al.*, 2010; Crnomarkovic *et al.*, 2013].

Considerando-se o modelo de gás cinza, a equação da transferência radiativa para meios que não espalham radiação se reduz à:

$$\frac{dI}{ds} = -\kappa I + \kappa I_b \quad (3.1)$$

onde I é a intensidade de radiação do gás cinza, I_b é a intensidade de radiação de corpo negro, $I_b = \sigma T^4 / \pi$, e σ é a constante de Stefan-Boltzmann.

Pode-se minimizar os efeitos provocados pela aplicação do modelo GG escrevendo-se o coeficiente de absorção como função da temperatura e da concentração dos gases. Nesse caso, usa-se uma média de Planck definida como:

$$\kappa = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta} I_{b\eta} d\eta}{\int_{\eta} I_{b\eta} d\eta} \quad (3.2)$$

Cassol *et al.*, 2015, fornecem correlações obtidas através do banco de dados HITEMP 2010 para CO₂ e H₂O.

3.2 Soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG)

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG) substitui o espectro por regiões onde o coeficiente de absorção é assumido constante. Na Figura 3.1, o comportamento de κ_{η} é representado por três gases com coeficiente de absorção κ_j ($j = 1, 2, 3$). A integração espectral do coeficiente de absorção de um gás não cinza é realizada através de um somatório sobre um número reduzidos de gases cinza n_g .

O ponto de partida para obtenção dos parâmetros para o modelo WSGG é a emitância total, ε , calculada através de:

$$\varepsilon(s) = \frac{\int_{\eta} I_{b\eta} \left[1 - e^{-\kappa_{p\eta} P s} \right] d\eta}{\sigma T^4 / \pi} \quad (3.3)$$

onde $\kappa_{p\eta} \equiv \kappa_{\eta} / P$ é o coeficiente de absorção baseado na pressão sendo que, para uma mistura gasosa, P representa a soma das pressões parciais das espécies químicas que compõem a mistura.

No modelo, introduzido por Hottel e Sarofim, 1967, propõe-se que a emitância total de um gás isotérmico e homogêneo pode ser aproximada de acordo com:

$$\varepsilon(s) = \sum_{j=0}^{n_g} a_j(T) \left[1 - e^{-\kappa_{p,j} P s} \right] \quad (3.4)$$

onde a_j e $\kappa_{p,j}$ são, respectivamente, o fator de ponderação e o coeficiente de absorção baseado na pressão correspondentes ao j -ésimo gás cinza. Fisicamente, o fator de ponderação

corresponde à fração de energia de corpo negro nas regiões do espectro onde o coeficiente de absorção do gás cinza é $\kappa_{p,j}$. Em uma segunda interpretação, a_j e $\kappa_{p,j}$ são simplesmente os valores numéricos que fornecem o melhor ajuste da Equação 3.4. Na Equação 3.4, $j = 0$ representa as janelas espectrais (ou janelas transparentes), onde o coeficiente de absorção é nulo. No modelo WSGG, os coeficientes de absorção são constantes, enquanto que os fatores de ponderação são funções da temperatura. As Equações 3.3 e 3.4 são utilizadas somente para obtenção das correlações para o modelo.

Smith *et al.*, 1982, representaram os fatores de ponderação como uma função polinomial da temperatura. A função, de ordem n_g , é escrita em termos dos coeficientes $b_{j,k}$ de acordo com a equação abaixo:

$$a_j = \sum_{k=1}^{n_g+1} b_{j,k} T^{k-1} \quad (3.5)$$

Galarça *et al.*, 2008, Kangwanpongpan *et al.*, 2012, e Dorigon *et al.*, 2013, apresentam os coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ para misturas de dióxido de carbono e vapor de água.

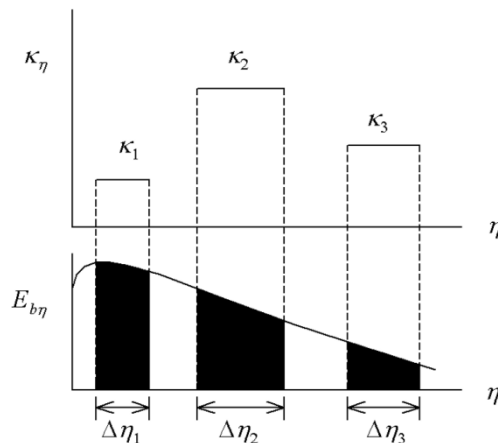


Figura 3.1 – Representação de um meio composto por três gases cinza no modelo WSGG.

O coeficiente de absorção das janelas espectrais é nulo, mas, para garantir o balanço de energia, o fator de ponderação é diferente de zero e é dado por:

$$a_0 = 1 - \sum_{j=1}^{n_g} a_j \quad (3.6)$$

Dorigon *et al.*, 2013, obtiveram, a partir do banco de dados HITEMP 2010, novas correlações para o modelo WSGG, que são válidas para mistura de vapor de água e dióxido de carbono. A Tabela 3.1 apresenta os coeficientes $\kappa_{p,j}$ e $b_{j,k}$ para razão de pressões parciais $p_w/p_c = 2$ (p_w – pressão parcial para H₂O, p_c – pressão parcial para CO₂). As correlações recomendadas por Dorigon *et al.*, 2013, são válidas para $400 \text{ K} \leq T \leq 2500 \text{ K}$ e $0,001 \text{ atm.m} \leq P_s \leq 10 \text{ atm.m}$.

Modest, 1991, propôs uma generalização do modelo WSGG para qualquer método de solução da equação da transferência radiativa. De acordo com essa proposta, a RTE assume a seguinte forma:

$$\frac{dI_j}{ds} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j I_b \quad (3.7)$$

onde κ_j e I_j são o coeficiente de absorção e a intensidade de radiação do gás cinza j , respectivamente. Para mistura de H₂O e CO₂ tem-se: $\kappa_j = \kappa_{p,j}(p_w + p_c)$.

Na dedução de Modest, 1991, obtida através da absortância de um gás, a Equação 3.7 requer coeficiente de absorção constante ao longo de uma trajetória e superfícies negras no contorno do domínio. Como será apresentado a seguir, Denison e Webb, 1993a, demonstraram que essa equação também é válida quando o coeficiente de absorção e os fatores de ponderação dos gases cinza são funções da posição espacial. Além disso, mostraram que a Equação 3.7 pode ser empregada quando as paredes não são negras.

Tabela 3.1 – Coeficientes para o modelo WSGG com $p_w/p_c = 2$ [Dorigon *et al.*, 2013].

j	$\kappa_{p,j} \text{ (atm.m)}^{-1}$	$b_{j,1}$	$b_{j,2} \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$b_{j,3} \text{ (K}^{-2}\text{)}$	$b_{j,4} \text{ (K}^{-3}\text{)}$	$b_{j,5} \text{ (K}^{-4}\text{)}$
1	0,192	$5,617 \times 10^{-2}$	$7,844 \times 10^{-4}$	$-8,563 \times 10^{-7}$	$4,246 \times 10^{-10}$	$-7,440 \times 10^{-14}$
2	1,719	$1,426 \times 10^{-1}$	$1,795 \times 10^{-4}$	$-1,077 \times 10^{-8}$	$-6,971 \times 10^{-11}$	$1,774 \times 10^{-14}$
3	11,370	$1,362 \times 10^{-1}$	$2,574 \times 10^{-4}$	$-3,711 \times 10^{-7}$	$1,575 \times 10^{-10}$	$-2,267 \times 10^{-14}$
4	111,016	$1,222 \times 10^{-1}$	$-2,327 \times 10^{-5}$	$-7,492 \times 10^{-8}$	$4,275 \times 10^{-11}$	$-6,608 \times 10^{-15}$

As Tabelas 3.2 e 3.3 apresentam correlações obtidas por Cassol *et al.*, 2014, através do banco de dados HITEMP 2010 para CO₂ e H₂O, respectivamente. As correlações são válidas para $400 \text{ K} \leq T \leq 2500 \text{ K}$ e $0,001 \text{ atm.m} \leq P_s \leq 10 \text{ atm.m}$.

Tabela 3.2 – Coeficientes do modelo WSGG para CO₂ [Cassol *et al.*, 2014].

j	$\kappa_{p,j} \text{ (atm.m)}^{-1}$	$b_{j,1}$	$b_{j,2} \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$b_{j,3} \text{ (K}^{-2}\text{)}$	$b_{j,4} \text{ (K}^{-3}\text{)}$	$b_{j,5} \text{ (K}^{-4}\text{)}$
1	0,138	0,09990	$64,41 \times 10^{-5}$	$-86,94 \times 10^{-8}$	$41,27 \times 10^{-11}$	$-67,74 \times 10^{-15}$
2	1,895	0,00942	$10,36 \times 10^{-5}$	$-2,277 \times 10^{-8}$	$-2,134 \times 10^{-11}$	$6,497 \times 10^{-15}$
3	13,301	0,14511	$-30,73 \times 10^{-5}$	$37,65 \times 10^{-8}$	$-18,41 \times 10^{-11}$	$30,16 \times 10^{-15}$
4	340,811	-0,02915	$25,23 \times 10^{-5}$	$-26,10 \times 10^{-8}$	$9,965 \times 10^{-11}$	$-13,26 \times 10^{-15}$

Tabela 3.3 – Coeficientes do modelo WSGG para H₂O [Cassol *et al.*, 2014].

j	$\kappa_{p,j} \text{ (atm.m)}^{-1}$	$b_{j,1}$	$b_{j,2} \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$b_{j,3} \text{ (K}^{-2}\text{)}$	$b_{j,4} \text{ (K}^{-3}\text{)}$	$b_{j,5} \text{ (K}^{-4}\text{)}$
1	0,171	0,06617	$55,48 \times 10^{-5}$	$-48,41 \times 10^{-8}$	$22,27 \times 10^{-11}$	$-40,17 \times 10^{-15}$
2	1,551	0,11045	$0,576 \times 10^{-5}$	$24,00 \times 10^{-8}$	$-17,01 \times 10^{-11}$	$30,96 \times 10^{-15}$
3	5,562	-0,04915	$70,63 \times 10^{-5}$	$-70,12 \times 10^{-8}$	$26,07 \times 10^{-11}$	$-34,94 \times 10^{-15}$
4	49,159	0,23675	$-18,91 \times 10^{-5}$	$-0,907 \times 10^{-8}$	$4,082 \times 10^{-11}$	$-8,778 \times 10^{-15}$

Na solução de um meio plano paralelo com o modelo WSGG, a intensidade de radiação espectral nas direções positiva e negativa é calculada, respectivamente, através das equações abaixo:

$$\mu_m \frac{dI_{j,m}^+(x)}{dx} = -\kappa_j I_{j,m}^+(x) + \kappa_j a_j I_b(x) \quad (3.8)$$

$$-\mu_m \frac{dI_{j,m}^-(x)}{dx} = -\kappa_j I_{j,m}^-(x) + \kappa_j a_j I_b(x) \quad (3.9)$$

onde $I_{j,m}^+$ e $I_{j,m}^-$ são as intensidades de radiação do gás cinza j para $\mu_m > 0$ e $\mu_m < 0$, respectivamente. Considerando-se paredes negras em $x = 0$ e $x = L$, as condições de contorno para as Equações 3.8 e 3.9 são, respectivamente, $I_{j,m}^+(0) = a_j(0)I_b(0)$ e $I_{j,m}^-(L) = a_j(L)I_b(L)$.

Após a solução das Equações 3.8 e 3.9, o fluxo de calor, q_R'' , e o termo fonte radiativo, Q_R , na posição x podem ser determinados por:

$$q_R''(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=0}^{n_g} 2\pi\mu_m\omega_m [I_{j,m}^+(x) - I_{j,m}^-(x)] \quad (3.10)$$

$$Q_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=0}^{n_g} \{2\pi\omega_m\kappa_j [I_{j,m}^+(x) + I_{j,m}^-(x)] - 4\pi\kappa_j a_j I_b(x)\} \quad (3.11)$$

onde o somatório sobre todos os gases cinza (n_g) representa a integração espectral no modelo WSGG.

O modelo WSGG foi proposto originalmente para situações onde o meio é isotérmico e homogêneo. Entretanto, tem-se verificado que esses problemas podem ser resolvidos de forma satisfatória através do WSGG quando a razão entre as pressões parciais das espécies químicas é mantida constante ou apresenta pouca variação [Dorigon *et al.*, 2013].

3.3 Soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW)

A formulação do modelo WSGG proposta por Modest, 1991, permitiu o desenvolvimento do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW) [Denison e Webb, 1993a], no qual a integração no comprimento de onda (ou número de onda) na solução linha-por-linha clássica é substituída por uma integração em um número finito de seções transversais de absorção discretas. No modelo, a função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (ALB), obtida através da integração LBL, é utilizada para a obtenção dos coeficientes de absorção dos gases cinza. Na prática, a aplicação do modelo envolve a discretização da seção transversal de absorção C_η .

Integrando-se a equação da transferência radiativa sobre as regiões espectrais associadas ao j -ésimo valor discreto do coeficiente de absorção tem-se:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \frac{dI_\eta}{ds} d\eta = \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_\eta (I_{b\eta} - I_\eta) d\eta \quad (3.12)$$

onde os subíndices i e j denotam o i -ésimo segmento espectral $\Delta\eta_{i,j}$ do j -ésimo coeficiente de absorção (ou o coeficiente de absorção do j -ésimo gás cinza).

O somatório e a integral, no lado esquerdo da Equação 3.12, podem ser colocados dentro da derivada aplicando-se a Regra de Leibniz. Assim:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left[\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta \right] - \sum_i I_\eta(\eta_{u,i,j}) \frac{d\eta_{u,i,j}}{ds} + \\ \sum_i I_\eta(\eta_{l,i,j}) \frac{d\eta_{l,i,j}}{ds} = \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_\eta (I_{b\eta} - I_\eta) d\eta \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde os subíndices u e l representam, respectivamente, os limites superior e inferior do i -ésimo segmento espectral $\Delta\eta_{i,j}$. Como discutido por Denison e Webb, 1993a, os termos que envolvem $d\eta_{u,i,j}/ds$ e $d\eta_{l,i,j}/ds$ (chamados de termos de Leibniz) aparecem devido à integração espectral da equação da transferência radiativa em meios não isotérmicos e/ou não homogêneos, pois a intensidade e a meia largura das linhas espectrais variam com a posição.

Assumindo-se intervalos espectrais fixos, os termos de Leibniz anulam-se. Logo:

$$\frac{d}{ds} \left[\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta \right] = \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_\eta I_{b\eta} d\eta - \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_\eta I_\eta d\eta \quad (3.14)$$

Uma vez que κ_η é uniforme em cada segmento espectral e equivalente ao coeficiente de absorção do gás cinza j , κ_η pode sair de dentro da integral e do somatório, no lado direito da Equação 3.14. Assim:

$$\frac{d}{ds} \left[\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta \right] = \kappa_j \left(\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta - \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta \right) \quad (3.15)$$

onde o subíndice j do coeficiente de absorção substitui o símbolo η para representar o gás cinza j .

O termo entre colchetes no lado esquerdo da Equação 3.15 é a intensidade de radiação do gás cinza I_j , que é definida da seguinte forma:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta = I_j \quad (3.16)$$

O primeiro termo no lado direito da Equação 3.15 representa uma fração do poder emissivo espectral de corpo negro. Assim:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta = a_j(T) \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (3.17)$$

Logo, chega-se a equação da transferência radiativa para o modelo SLW.

$$\frac{dI_j}{ds} = -\kappa_j I_j + \kappa_j a_j I_b \quad (3.18)$$

Esse é mesmo resultado obtido por Modest, 1991, para o modelo WSGG, Equação 3.7.

Depois de resolver-se a Equação 3.18 para cada gás cinza j , a intensidade de radiação total I é obtida através da soma das intensidades de cada gás cinza:

$$I = \sum_{j=1}^{n_g} I_j \quad (3.19)$$

Os fatores de ponderação a_j são calculados através da função distribuição de corpo negro nas linhas de absorção (ALB), que é definida como a fração da energia de corpo negro nas regiões do espectro onde a seção transversal de absorção C_η é menor que um valor prescrito C . Essa definição está ilustrada na Figura 3.2 para uma pequena faixa do espectro. As porções do espectro onde a função de Planck é integrada estão representadas pelos segmentos sombreados na Figura 3.2. A função distribuição ALB pode ser expressa como [Denison e Webb, 1993a]:

$$F(C, T_b, T_g, p, Y) = \frac{1}{\sigma T_b^4} \sum_i \int_{\Delta\eta_i(C, T_g, p, Y)} E_{b\eta}(T_b) d\eta \quad (3.20)$$

onde a função $E_{b\eta}$ é avaliada no número de onda η e na temperatura de corpo negro T_b . O subíndice i refere-se ao i -ésimo segmento espectral e o somatório é realizado sobre todos os

segmentos do espectro que correspondem a $C_\eta < C$. A dependência da função ALB em relação ao espectro é dada através dos intervalos de integração $\Delta\eta_i$, que, por sua vez, dependem da seção transversal de absorção, da temperatura do gás T_g , da pressão total p , e da concentração das espécies Y , que afetam o alargamento das linhas do espectro.

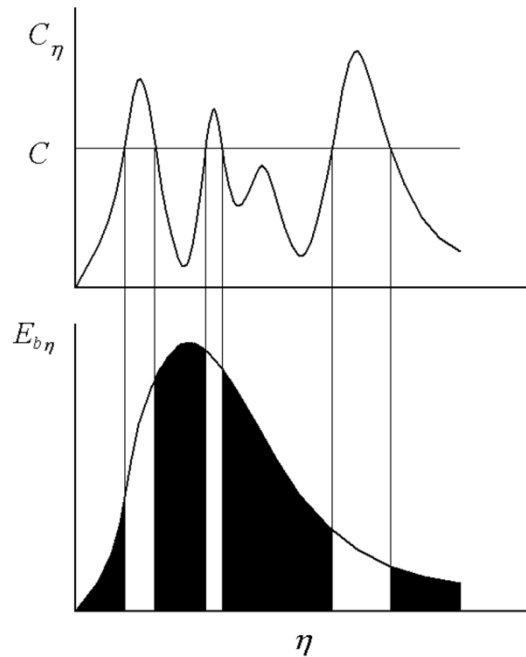


Figura 3.2 – Representação de uma faixa do espectro onde a função ALB é calculada.

O fator de ponderação do gás cinza a_j é calculado através da diferença entre duas funções distribuição ALB, avaliadas nas seções transversais de absorção suplementares \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j+1} . São definidas $n_g + 1$ seções suplementares, que representam a discretização de C_η .

$$a_j = F(\tilde{C}_{j+1}, T_b, T_g, p, Y) - F(\tilde{C}_j, T_b, T_g, p, Y) \quad (3.21)$$

Os valores da seção transversal suplementar \tilde{C}_j são prescritos e logaritmicamente espaçados entre os valores máximos e mínimos de C_η .

A extensão do modelo SLW para meios não homogêneos e/ou não isotérmicos é realizada através de aproximações de escala, onde o gás não isotérmico e/ou não homogêneo é substituído por um gás isotérmico e homogêneo equivalente. A aproximação de Curtis-

Godson é uma das mais conhecidas [Godson, 1953]. Goody e Yung, 1989, mostraram que as aproximações de escala são exatas se a seção transversal de absorção for expressa como o produto de duas funções:

$$C_{\eta}(T_g, p, Y) = \Phi(T_g, p, Y) \Psi(\eta) \quad (3.22)$$

onde as funções Φ e Ψ representam as dependências espacial e espectral da seção transversal de absorção, respectivamente. Quando aproximação de escala é aplicada, os termos de Leibniz desaparecem automaticamente da Equação 3.13.

A Figura 3.3 mostra uma porção de um espectro para um gás descrito pela Equação 3.22. Na Figura, estão representados dois estados termodinâmicos diferentes. O espectro no estado 1 é representado por: temperatura T_{g1} , pressão total p_1 e fração molar Y_1 . A função distribuição ALB pode ser calculada nesse estado a partir da integração da função de Planck em todos os segmentos espectrais onde $C_{\eta}(T_{g1}, p_1, Y_1)$ é menor que o valor prescrito $C_j(T_{g1}, p_1, Y_1)$. Enquanto que o espectro no estado 2 é descrito por: temperatura T_{g2} , pressão total p_2 e fração molar Y_2 . Se a Equação 3.22 é válida, a seção transversal de absorção para o estado termodinâmico 2, $C_j(T_{g2}, p_2, Y_2)$, será dada por:

$$C_j(T_{g2}, p_2, Y_2) = C_j(T_{g1}, p_1, Y_1) \frac{\Phi(T_{g2}, p_2, Y_2)}{\Phi(T_{g1}, p_1, Y_1)} \quad (3.23)$$

Esse resultado é consequência da independência da função $\Psi(\eta)$ em relação ao estado termodinâmico.

De acordo com a Figura 3.3, os segmentos espectrais onde $C_{\eta}(T_{g1}, p_1, Y_1)$ é menor que o valor prescrito $C_j(T_{g1}, p_1, Y_1)$ são idênticos aos segmentos onde $C_{\eta}(T_{g2}, p_2, Y_2)$ é menor que $C_j(T_{g2}, p_2, Y_2)$. Logo, a partir da definição da função distribuição ALB, dada pela Equação 3.20, existe uma igualdade das funções ALB entre os dois estados termodinâmicos para uma dada temperatura de corpo negro. Na equação a seguir, foi assumido T_b igual à temperatura de referência T_{ref} , que é uma temperatura média [Denison e Webb, 1995b].

$$\begin{aligned}
& F\left[C_j(T_{g2}, p_2, Y_2); T_b = T_{ref}; T_g = T_{g2}; Y = Y_2; p = p_2\right] \\
& = F\left[C_j(T_{g1}, p_1, Y_1); T_b = T_{ref}; T_g = T_{g1}; Y = Y_1; p = p_1\right]
\end{aligned}
\tag{3.24}$$

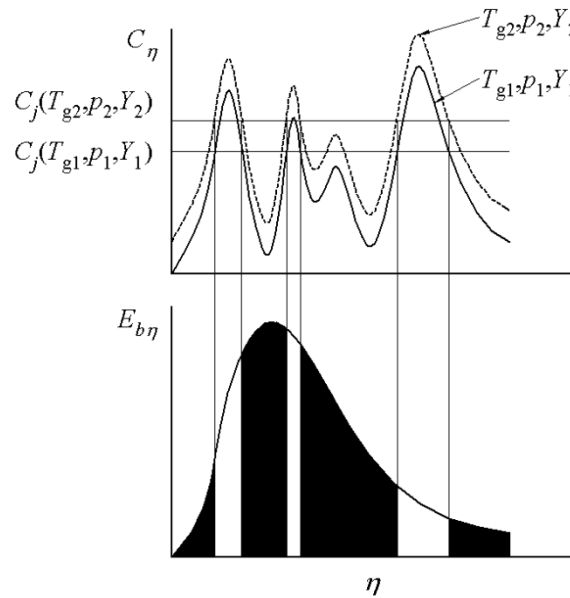


Figura 3.3 – Dependência idealizada do espectro em relação a dois estados termodinâmicos diferentes, resultando em frações de energia equivalentes.

A Equação 3.24 denota que existe uma dependência implícita de C_j em relação ao estado termodinâmico local do gás. O valor local de C_j é determinado pela seguinte equação implícita, a qual corresponde a Equação 3.24 escrita para funções distribuição ALB equivalentes nos estados local e de referência.

$$\begin{aligned}
& F\left[C_j; T_b = T_{ref}; T_g = T_{loc}; Y = Y_{loc}; p = p_{loc}\right] \\
& = F\left[C_{j,ref}; T_b = T_{ref}; T_g = T_{ref}; Y = Y_{ref}; p = p_{ref}\right]
\end{aligned}
\tag{3.25}$$

onde os sufixos “*loc*” e “*ref*” indicam os valores local e de referência de cada variável.

A Equação 3.25 também é conhecida como aproximação de referência [Solovjov e Webb, 2000], que é uma forma de definir os mesmos intervalos espectrais para os estados de referência e local. A principal vantagem dessa aproximação é que torna a ordem de integração e diferenciação espacial intercambiáveis no lado esquerdo da RTE, sem a produção de termos de Leibniz, pois os intervalos espectrais são mantidos fixos para todas as posições no espaço.

De acordo com Denison e Webb, 1995b, o estado de referência pode ser determinado como uma média da temperatura, da pressão total e da concentração. Como a Equação 3.25 é implícita, C_j deve ser obtido para cada posição através de uma técnica iterativa como os métodos da bisseção ou Newton-Raphson. A aproximação de referência produz resultados satisfatórios quando o gradiente de temperatura não é muito elevado [Solovjov e Webb, 2010].

Se for utilizado um número de gases cinza suficiente (vinte gases ou mais, Denison e Webb, 1995b), o valor de referência para a seção transversal de absorção $C_{j,ref}$, requerido na Equação 3.25, pode ser definido como uma média logarítmica das seções transversais de absorção suplementares \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j+1} .

$$C_{j,ref} = \exp\left[\frac{\ln(\tilde{C}_j) + \ln(\tilde{C}_{j+1})}{2}\right] \quad (3.26)$$

O coeficiente de absorção local do gás é função da densidade molar local N e da seção transversal de absorção local C_j , que é fornecida pela Equação 3.25.

$$\kappa_j = NYC_j \quad (3.27)$$

Essa aproximação é similar ao método k -correlacionado (c - k) [Goody e Yung, 1989].

Como apresentado anteriormente, o fator de ponderação do j -ésimo gás cinza é dado pela Equação 3.20. Resta definir quais são os valores apropriados para as variáveis T_b , T_g , p e Y no cálculo de a_j . Denison e Webb, 1995b, recomendam que o fator de ponderação de cada gás cinza seja calculado de acordo com:

$$a_j = F\left(\tilde{C}_{j+1}, T_b = T_{loc}, T_g = T_{ref}, Y = Y_{ref}, p = p_{ref}\right) - F\left(\tilde{C}_j, T_b = T_{loc}, T_g = T_{ref}, Y = Y_{ref}, p = p_{ref}\right) \quad (3.28)$$

Para um meio plano paralelo, a Equação 3.18 pode ser reescrita para fornecer a intensidade de radiação do gás cinza j nas direções positiva e negativa de acordo com:

$$\mu_m \frac{dI_{j,m}^+(x)}{dx} = -\kappa_j I_{j,m}^+(x) + \kappa_j a_j I_b(x) \quad (3.29)$$

$$-\mu_m \frac{dI_{j,m}^-(x)}{dx} = -\kappa_j I_{j,m}^-(x) + \kappa_j a_j I_b(x) \quad (3.30)$$

onde $I_{j,m}^+$ e $I_{j,m}^-$ são as intensidades de radiação do gás cinza j para $\mu_m > 0$ e $\mu_m < 0$, respectivamente. Considerando-se paredes negras em $x = 0$ e $x = L$, as condições de contorno para as Equações 3.29 e 3.30 são, respectivamente, $I_{j,m}^+(0) = a_j(0)I_b(0)$ e $I_{j,m}^-(L) = a_j(L)I_b(L)$.

Após a solução das Equações 3.29 e 3.30, o fluxo de calor, q_R'' , e o termo fonte radiativo, Q_R , na posição x podem ser determinados, respectivamente, por:

$$q_R''(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_g} 2\pi\mu_m\omega_m [I_{j,m}^+(x) - I_{j,m}^-(x)] \quad (3.31)$$

$$Q_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_g} \left\{ 2\pi\omega_m\kappa_j [I_{j,m}^+(x) + I_{j,m}^-(x)] - 4\pi\kappa_j a_j I_b(x) \right\} \quad (3.32)$$

onde o somatório sobre todos os gases cinza (n_g) representa a integração espectral no modelo SLW.

3.3.1 Modelagem para mistura de espécies químicas no SLW

Quando o modelo SLW é utilizado para resolver meios participantes constituídos por mais de uma espécie química, as Equações 3.25, 3.26, 3.27 e 3.28 devem ser resolvidas separadamente para cada espécie. O valor do coeficiente de absorção do gás cinza κ_j deverá levar em conta os coeficientes de absorção de cada espécie química. Para uma mistura de CO_2 e H_2O , o coeficiente de absorção é dado pela seguinte equação:

$$\kappa_j = \kappa_{j,c} + \kappa_{j,w} \quad (3.33)$$

onde $\kappa_{j,c}$ e $\kappa_{j,w}$ são os coeficientes de absorção para cada gás cinza j de CO_2 e H_2O , respectivamente. Os valores de $\kappa_{j,c}$ e $\kappa_{j,w}$ são calculados através da Equação 3.27.

O método direto é considerado a melhor forma para se efetuar a mistura no modelo SLW [Solovjov e Webb, 2011b]. Essa aproximação foi desenvolvida por Denison e Webb, 1995c, para misturas binárias. Mais tarde, foi estendida para misturas multicomponentes [Solovjov e Webb, 2000]. Neste método, a função distribuição ALB é obtida para cada espécie química separadamente e o fator de ponderação de cada gás cinza é dado pela Equação 3.28, reescrita a seguir para CO_2 e H_2O , respectivamente:

$$a_{j,c} = F_c(\tilde{C}_{j+1}, T_b, T_g, p, Y_c) - F_c(\tilde{C}_j, T_b, T_g, p, Y_c) \quad (3.34)$$

$$a_{j,w} = F_w(\tilde{C}_{j+1}, T_b, T_g, p, Y_w) - F_w(\tilde{C}_j, T_b, T_g, p, Y_w) \quad (3.35)$$

onde F_c e F_w representam o valor da função distribuição ALB para CO_2 e H_2O , respectivamente.

O fator de ponderação para mistura, que será utilizado na RTE, representa uma combinação dos fatores $a_{j,c}$ e $a_{j,w}$:

$$a_j = a_{c,j} a_{w,j} \quad (3.36)$$

Incluindo as janelas transparentes tem-se:

$$\sum_{j=0}^{n_g} a_j = 1 \quad (3.37)$$

Quando não se dispõem de bancos de dados espectrais, a função distribuição F requerida no modelo SLW, pode ser calculada através de correlações. A seguir, serão apresentadas algumas correlações obtidas através do banco de dados HITEMP 2010.

3.3.2 Correlações para a função distribuição F

Pearson *et al.*, 2013, obtiveram, a partir do banco de dados HITEMP 2010, correlações atualizadas (válidas de 400 K até 3000 K) para o cálculo da função distribuição ALB para H₂O. A função F , utilizada no modelo SLW, é dada por:

$$F(C, T_g, T_b, Y) = \frac{1}{2} \tanh[P(C, T_g, T_b, Y)] + \frac{1}{2} \quad (3.38)$$

onde:

$$P(C, T_g, T_b, Y = 0) = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^3 b_{lmn} \left(\frac{T_g}{2500} \right)^n \left(\frac{T_b}{2500} \right)^m (\xi_f - \xi_{f, sb})^l \quad (3.39)$$

as constantes b_{lmn} estão apresentadas na Tabela 3.4. ξ_f e $\xi_{f, sb}$ são calculados, respectivamente, através de:

$$\xi_f = \ln(C) \quad (3.40)$$

$$\xi_{f, sb}(C, T_b, Y) = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^2 c_{lmn} \left(\frac{T_b}{2500} \right)^n \xi_f^m Y^{l+1} \quad (3.41)$$

as constantes c_{lmn} estão na Tabela 3.5.

Tabela 3.4 – Coeficientes b_{lmn} (Equação 3.39).

l	m	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
0	0	1,98422	-7,06975	9,89841	-5,00679
	1	-1,14932	17,5821	-25,1885	14,0083
	2	1,67129	-15,7784	22,8739	-14,0656
	3	-0,422040	4,73283	-6,99392	4,79833
1	0	0,525269	-2,18885	4,73022	-2,19491
	1	-0,518929	7,66641	-17,0886	8,73802

Coeficientes b_{lmn} (Equação 3.39)

l	m	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
	2	0,769947	-8,27437	20,6870	-11,3989
	3	-0,384992	2,95492	-8,14048	4,71203
2	0	$-8,00738 \times 10^{-2}$	0,822775	-1,78646	0,965286
	1	0,291802	-2,15872	5,11951	-3,07463
	2	-0,178189	2,04443	-5,33229	3,50707
	3	$2,76686 \times 10^{-3}$	-0,662972	1,89394	-1,33821
3	0	$-1,44070 \times 10^{-2}$	0,124528	-0,216894	$9,85755 \times 10^{-2}$
	1	$4,44708 \times 10^{-2}$	-0,372259	0,732674	-0,373361
	2	$-3,90484 \times 10^{-2}$	0,410898	-0,897535	0,493320
	3	$1,01893 \times 10^{-2}$	-0,154442	0,362439	-0,208636

Tabela 3.5 – Coeficientes c_{lmn} (Equação 3.41).

l	m	$n = 0$	$n = 1$	$n = 2$
0	0	5,22104	-12,5741	7,96526
	1	-1,31332	1,54088	-0,679358
	2	-0,329520	0,706068	-0,439508
	3	$2,12110 \times 10^{-2}$	$-6,65519 \times 10^{-2}$	$3,80427 \times 10^{-2}$
1	0	-15,1020	41,0250	-27,3627
	1	3,77331	-6,94258	3,80901
	2	1,04589	-2,95223	2,00790
	3	$-8,43150 \times 10^{-2}$	0,218095	-0,112124
2	0	19,1765	-54,4180	36,7948
	1	-4,86960	9,97785	-5,62534
	2	-1,40132	4,17838	-2,86772
	3	0,115000	-0,286433	0,143994
3	0	-8,38004	24,2381	-16,4764
	1	2,14364	-4,57468	2,59966
	2	0,627045	-1,90420	1,30957
	3	$-5,18332 \times 10^{-2}$	0,127618	$-6,37825 \times 10^{-2}$

Essas correlações facilitam a aplicação do modelo SLW, pois permitem a obtenção de todos os parâmetros requeridos pelo modelo sem o uso dos bancos de dados espectrais. Essas correlações foram utilizadas no Apêndice A para validar o espectro gerado neste trabalho.

3.4 Número de onda acumulado (CW)

Assim como no modelo SLW, o modelo do número acumulado (CW) está baseado em uma função distribuição. No modelo CW [Solovjov e Webb, 2002], a função distribuição w é definida como:

$$w(C, \eta) = \begin{cases} \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) + (\eta - \eta^*) & \text{se } C_\eta < C \\ \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) & \text{se } C_\eta \geq C \end{cases} \quad (3.42)$$

onde os intervalos no número de onda $[\alpha_i, \beta_i]$ são obtidos a partir da interseção da seção transversal de absorção C_η com a linha $C_\eta = C$; η^* é o maior número de onda da interseção onde o coeficiente de absorção C_η é menor que um prescrito valor de C . Isso é ilustrado na Figura 3.4.

De acordo com a sua definição, a função do número de onda acumulado $w(C, \eta)$ cresce linearmente com o número de onda para os valores de η onde C_η é menor que C . Por outro lado, $w(C, \eta)$ é uma linha reta para os valores de η onde C_η é maior que C . Assim, derivando-se a Equação 3.42 em relação à η tem-se:

$$\frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} = \begin{cases} 1 & \text{se } C_\eta < C \\ 0 & \text{se } C_\eta > C \end{cases} \quad (3.43)$$

Essa equação permite substituir a integração no número de onda pela integração da função w .

$$\int_{\{\eta: C_\eta < C\}} d\eta = \int_0^\infty \frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} d\eta = \int_0^\infty dw(C, \eta) \quad (3.44)$$

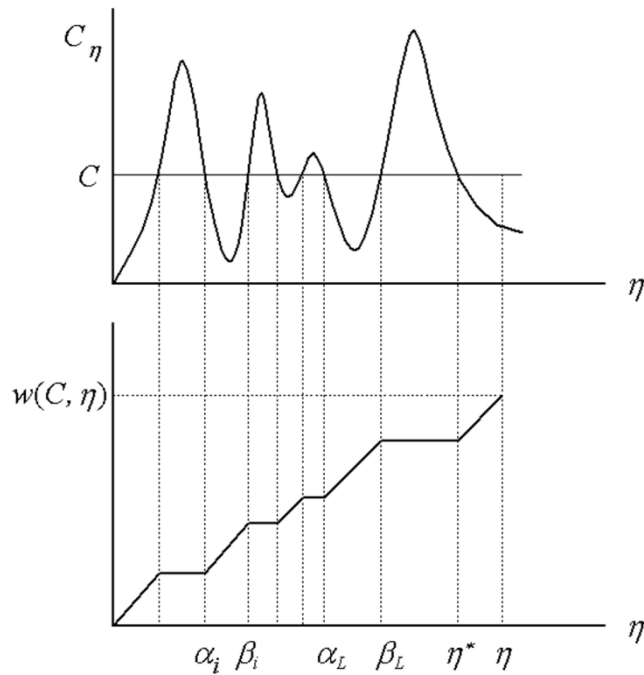


Figura 3.4 – Esquematização da função distribuição do número de onda acumulado.

No método CW, o espectro completo C_η é subdividido em n_g gases cinza definidos pelas seções transversais de absorção suplementares $\tilde{C}_j, j = 1, 2, \dots, n_g + 1$. A união entre todos os intervalos espectrais para os quais C_η fica entre os valores suplementares \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j-1} é expressa por H_j , onde:

$$H_j = \left\{ \eta : \tilde{C}_{j-1} \leq C_\eta \leq \tilde{C}_j \right\} \quad j = 1, 2, \dots, n_g + 1 \quad (3.45)$$

Assim como no modelo SLW, os valores da seção transversal suplementar \tilde{C}_j são prescritos e logaritmicamente espaçados entre os valores máximos e mínimos de C_η .

O modelo também considera q intervalos Δ_i no número onda, tal que:

$$\Delta_i = [\eta_{i-1}, \eta_i] \quad i = 1, 2, \dots, q \quad (3.46)$$

A interseção dos intervalos Δ_i e H_j define o número de onda do gás cinza fracional D_{ij} , dado por:

$$D_{ij} = \Delta_i \cap H_j \quad (3.47)$$

Enquanto Δ_i é um intervalo fixo do espectro, H_j e D_{ij} dependem do estado termodinâmico e assim variam com a posição s quando o meio não é uniforme. Para resolver problemas não isotérmicos e não homogêneos, o modelo CW propõem uma correlação espectral local, que assume que as dependências da função w em relação à posição (ou ao estado termodinâmico) e ao espectro podem ser separadas de acordo com a relação a seguir:

$$w(\tilde{C}_j, s, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, s, \eta) = u_{ij}(s)v_{ij}(\eta) \quad \text{para } \eta \in \Delta_i \quad (3.48)$$

onde u_{ij} e v_{ij} são funções que descrevem, respectivamente, o estado termodinâmico e o comportamento espectral do gás. Essa proposição é muito menos restritiva que a aproximação de escala adotada no modelo SLW e tende a fornecer melhores resultados quando o intervalo Δ_i é pequeno e os valores \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j-1} são próximos.

Impondo-se $u_{ij}(s^*) = 1$, onde s^* é escolhido como um estado de referência no qual a temperatura e a composição do meio são conhecidas, tem-se:

$$w(\tilde{C}_j, s^*, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, s^*, \eta) = v_{ij}(\eta) \quad (3.49)$$

Assim, a função local $u_{ij}(s)$ pode ser calculada combinando-se as Equações 3.48 e 3.49.

$$u_{ij}(s) = \frac{w(\tilde{C}_j, s, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, s, \eta)}{w(\tilde{C}_j, s^*, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, s^*, \eta)} \quad (3.50)$$

Os resultados apresentados por Solovjov e Webb, 2002; 2005, demonstraram que a solução do modelo CW permanece praticamente inalterada, independente do estado de referência adotado.

Como demonstrado por Solovjov e Webb, 2002, a integração da intensidade espectral direcional no intervalo D_{ij} , empregando-se as propriedades da função número de onda acumulado, conduz a:

$$\int_{D_{ij}^+} I_{\eta m}^+ d\eta = u_{ij}(s) J_{ijm}^+(s) \quad (3.51)$$

$$\int_{D_{ij}^-} I_{\eta m}^- d\eta = u_{ij}(s) J_{ijm}^-(s) \quad (3.52)$$

$$\int_{D_{ij}(s)} I_{b\eta} d\eta = u_{ij}(s) J_{bij}(s) \quad (3.53)$$

Aqui, $u_{ij}(s)$ pode ser entendido como um fator de correção local para as intensidades do gás cinza fracional. J_{ijl}^+ e J_{ijl}^- são as intensidades de gás cinza fracional para $\mu_l > 0$ e $\mu_l < 0$, respectivamente. J_{bij} é intensidade de radiação de corpo negro fracional, dada por:

$$J_{bij}(s) = \int_{\Delta_i} I_{b\eta}(s) d[w(\tilde{C}_j, s^*, \eta) - w(\tilde{C}_{j-1}, s^*, \eta)] \quad (3.54)$$

As intensidades de gás cinza fracional J_{ijm}^+ e J_{ijm}^- são determinadas através do uso da Equação 3.44 na integração da equação da transferência radiativa no intervalo Δ_i . Para o meio plano paralelo, de acordo com Solovjov e Webb, 2002, essa integração conduz a:

$$\mu_m \frac{dJ_{ijm}^+(x)}{dx} = -\kappa_j J_{ijm}^+(x) + \kappa_j J_{bij}(x) \quad (3.55)$$

$$-\mu_m \frac{dJ_{ijm}^-(x)}{dx} = -\kappa_j J_{ijm}^-(x) + \kappa_j J_{bij}(x) \quad (3.56)$$

Considerando-se paredes negras em $x = 0$ e $x = L$, as condições de contorno para as Equações 3.55 e 3.56 são, respectivamente, $J_{jm}^+(0) = J_{bij}(0)$ e $J_{jm}^-(L) = J_{bij}(L)$. No modelo CW, a

integração da equação da transferência radiativa não produz termos de Leibniz, pois os intervalos Δ_i são fixos.

O coeficiente de absorção do gás cinza j , requerido nas Equações 3.55 e 3.56, é calculado através dos valores suplementares da seção transversal de absorção.

$$\kappa_j = N\sqrt{\tilde{C}_{j-1}\tilde{C}_j} \quad (3.57)$$

Uma vez obtidas as intensidades de gás cinza fracional J_{ijm}^+ e J_{ijm}^- , o fluxo de calor e o termo fonte radiativo podem ser determinados, respectivamente, através das equações a seguir:

$$q_R''(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{i,j=1}^{n_g} \left\{ 2\pi\mu_m \omega_m u_{ij}(x) [J_{ijm}^+(x) - J_{ijm}^-(x)] \right\} \quad (3.58)$$

$$Q_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{i,j=1}^{n_g} \left\{ 2\pi\omega_m \kappa_j u_{ij}(x) [J_{ijm}^+(x) + J_{ijm}^-(x)] - 4\pi\kappa_j u_{ij}(x) J_{bij}(x) \right\} \quad (3.59)$$

onde o somatório sobre todos os gases cinza (n_g) representa a integração espectral no modelo CW.

Como demonstrado por Galarça *et al.*, 2011, a dedução das Equações 3.55 e 3.56 requer uma simplificação. Uma importante consequência dessa simplificação é que o balanço de energia radiativa, $Q_R = -dq_R''/dx$, apenas se verifica se as duas condições abaixo forem satisfeitas:

$$\sum_{ij} J_{ijm}^+(x) \frac{\partial u_{ij}(x)}{\partial x} = 0 \quad (3.60)$$

$$\sum_{ij} J_{ijm}^-(x) \frac{\partial u_{ij}(x)}{\partial x} = 0 \quad (3.61)$$

Em geral, as relações acima não são verificadas, de modo que o balanço de energia radiativa não é atendido. Assim, embora o método CW tenha se mostrado capaz de fornecer

resultados adequados para o termo fonte radiativo, o balanço de energia radiativa não se verifica e, portanto, o fluxo de calor pode apresentar erros consideráveis.

3.4.1 Modelagem para mistura de espécies químicas no modelo CW

A modelagem para mistura no modelo CW é muito mais simples que no SLW, pois envolve apenas uma modificação na função w . Quando o modelo CW é empregado para resolver um meio participante composto n_e espécies químicas, a função do número de onda acumulado, requerida nas Equações 3.50 e 3.54, deve ser modificada de acordo com a equação abaixo:

$$w(\tilde{C}_j, \eta) = \sum_{i=1}^{n_e} w_i(\tilde{C}_j / Y_i, \eta) - (n_e - 1)\eta \quad (3.62)$$

Essa equação é conhecida como aproximação da superposição [Solovjov e Webb, 2002; 2005].

3.5 Número de onda acumulado modificado (MCW)

A literatura mostra que o modelo CW pode fornecer bons resultados para o termo fonte radiativo [Solovjov e Webb, 2002; 2005]. Contudo, o fluxo de calor apresenta desvios consideráveis em relação à solução LBL [Galarça *et al.*, 2011]. Esse comportamento é acarretado por uma falha na formulação do modelo, que impede que o balanço de energia seja atendido.

O modelo do número de onda acumulado modificado (MCW) [Galarça *et al.*, 2011] propõem uma alteração nas Equações 3.55 e 3.56. As intensidades dos gases cinza fracionais são modificadas através da inserção de termos adicionais na equação da transferência radiativa. Esses termos de correção são requeridos para que as Equações 3.60 e 3.61 sejam satisfeitas. E para que, assim, o balanço de energia seja atendido. Já que, em geral, os resultados do modelo CW para o termo fonte radiativo são bons, uma imposição no modelo MCW requer que o termo fonte radiativo seja igual àquele calculado através do modelo CW.

No MCW, os termos de correção não são obtidos por meio de observações físicas. São simplesmente calculados através de expressões que permitem o fechamento do sistema de

equações. Entretanto, esse procedimento requer um processo iterativo que pode aumentar significativamente o tempo computacional requerido pelo modelo.

3.6 Proposição de um novo modelo espectral: NCC-WSGG

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza com coeficientes não constantes (NCC-WSGG) foi desenvolvido neste trabalho a partir de algumas proposições dos modelos WSGG e SLW. Assim como nesses modelos, a integração da equação da transferência radiativa em relação ao número de onda é substituída por um somatório sobre uma quantidade finita de gases cinza. Para evitar o surgimento dos termos de Leibniz, adota-se uma condição de referência que mantém os intervalos de integração espectrais fixos (essa é outra característica compartilhada com o modelo SLW).

Como mencionado no Capítulo 2, o coeficiente de absorção, que é função da pressão total, da temperatura local e da fração molar, é calculado através da seguinte equação:

$$\kappa_{\eta}(p, T, Y) = N(p, T) Y C_{\eta}(p, T, Y) \quad (3.63)$$

onde $Y = p_i / p$ é a fração molar, $N(p, T) = p N_A / R_u T$ é a densidade molar, T é a temperatura do gás, N_A é o número de Avogadro e R_u é a constante universal dos gases. Definindo-se $N^* \equiv N_A / R_u$, tem-se:

$$\kappa_{\eta} = N^* \frac{p_i}{T} C_{\eta} \quad (3.64)$$

Como no caso do modelo WSGG, é conveniente definir o coeficiente de absorção baseado na pressão $\kappa_{p,\eta}$. Assim:

$$\kappa_{p,\eta} \equiv \frac{\kappa_{\eta}}{p_i} = \frac{N^*}{T} C_{\eta} \quad (3.65)$$

Incorporando-se o coeficiente de absorção baseado na pressão na RTE e desprezando-se o efeito do espalhamento, tem-se:

$$\frac{dI_\eta}{ds} = -p_i \kappa_{p,\eta} I_\eta + p_i \kappa_{p,\eta} I_{b\eta} \quad (3.66)$$

No NCC-WSGG, a integração espectral da RTE é realizada definindo-se uma condição de referência para a qual são prescritas seções transversais no espectro de absorção. Esse é um ponto em comum entre o NCC-WSGG e o SLW. Na condição de referência (caracterizada pela temperatura T_{ref}), toda vez que o valor da seção transversal de absorção C_η estiver entre os valores prescritos \tilde{C}_j e \tilde{C}_{j+1} , definem-se os intervalos espectrais $\Delta\eta_{i,j}$ (Figura 3.5), que, como a condição de referência não se altera, são mantidos fixos.

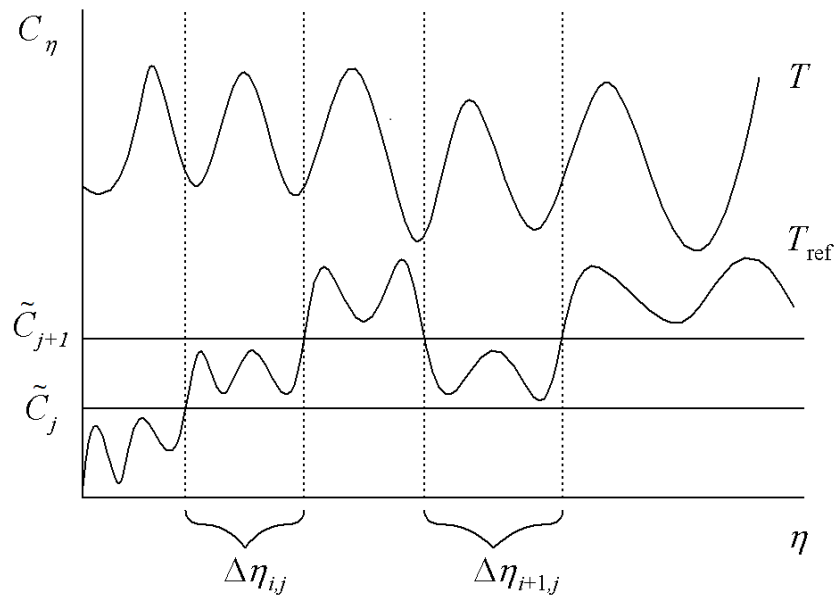


Figura 3.5 – Definição dos intervalos espectrais para integração da RTE.

A integração do lado esquerdo da RTE no intervalo $\Delta\eta_{i,j}$ resulta em:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \frac{dI_\eta}{ds} d\eta = \frac{d}{ds} \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_\eta d\eta = \frac{dI_j}{ds} \quad (3.67)$$

onde I_j é a intensidade de radiação do gás cinza j . Como os intervalos espectrais $\Delta\eta_{i,j}$ são mantidos fixos, a derivada d/ds pode ser retirada de dentro da integral sem produzir termos de Leibniz.

Da integração do primeiro termo do lado direito da RTE (termo de absorção) tem-se:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta} I_\eta d\eta \approx \frac{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta}(T) I_{b\eta}(T_a) d\eta}{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta}(T_a) d\eta} = \frac{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta}(T) I_{b\eta}(T_a) d\eta}{C_{e,j}(T_a) I_b(T_a)} \quad (3.68)$$

onde T_a é denominada temperatura de absorção e $C_{e,j}$ é a fração da energia de corpo negro emitida nos intervalos espectrais, definida da seguinte forma:

$$C_{e,j}(T) \equiv \frac{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta}(T) d\eta}{I_b(T)} \quad (3.69)$$

Logo, a integração do termo de absorção da RTE resulta em:

$$\frac{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta}(T) I_{b\eta}(T_a) d\eta}{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta}(T_a) d\eta} = \frac{\frac{N^*}{T} \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} C_\eta(T) I_{b\eta}(T_a) d\eta}{C_{e,j}(T_a) I_b(T_a)} \equiv \kappa_{p,j,a}(T, T_a) \quad (3.70)$$

onde o coeficiente de absorção do gás cinza j , $\kappa_{p,j,a}$, depende da temperatura local e da temperatura de absorção.

A integração do termo de emissão, segundo termo no lado direito da RTE, é exata e pode ser escrita como:

$$\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta} I_{b\eta} d\eta = \frac{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta} I_{b\eta} d\eta}{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta} \quad (3.71)$$

$$\frac{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} \kappa_{p,\eta} I_{b\eta} d\eta}{\sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} I_{b\eta} d\eta} = \frac{\frac{N^*}{T} \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} C_\eta(T) I_{b\eta}(T) d\eta}{C_{e,j}(T) I_b(T)} \equiv \kappa_{p,j,e}(T) \quad (3.72)$$

onde $\kappa_{p,j,e}$ é o coeficiente de emissão do gás cinza j e depende da temperatura local.

Na condição de referência, utilizada para definir os intervalos espectrais, tem-se:

$$\kappa_{p,j,e,ref} = \frac{\frac{N^*}{T_{ref}} \sum_i \int_{\Delta\eta_{i,j}} C_{\eta,ref} I_{b\eta}(T_{ref}) d\eta}{C_{e,j}(T_{ref}) I_b(T_{ref})} \quad (3.73)$$

Finalmente, substituindo-se os resultados das integrações dos termos de absorção e de emissão na RTE tem-se:

$$\frac{dI_j}{ds} = -p_i \kappa_{p,j,a} I_j + p_i \kappa_{p,j,e} I_{bj} \quad (3.74)$$

onde $I_{bj} = C_{e,j} \sigma T^4 / \pi$. A forma da RTE no NCC-WSGG é idêntica aquela do modelo WSGG (Equação 3.7). Porém, aqui, os coeficientes de absorção e de emissão de cada gás cinza j não são iguais e dependem da temperatura.

Assim como no modelo WSGG, no NCC-WSGG, são definidas janelas transparentes, com coeficientes de absorção e emissão nulos. Entretanto, para assegurar o balanço de energia, a fração de energia de corpo negro associada às janelas transparentes é diferente de zero e é dada por:

$$C_{e,0}(T) = 1 - \sum_{j=1}^{n_g} C_{e,j}(T) \quad (3.75)$$

Para um meio plano paralelo, tem-se:

$$\mu_m \frac{dI_{jm}^+(x)}{dx} = -p_i \kappa_{p,j,a} I_{jm}^+(x) + p_i \kappa_{p,j,e} I_{bj}(x) \quad (3.76)$$

$$-\mu_m \frac{dI_{jm}^-(x)}{dx} = -p_i \kappa_{p,j,a} I_{jm}^-(x) + p_i \kappa_{p,j,e} I_{bj}(x) \quad (3.77)$$

para paredes negras separadas por uma distancia L , as condições de contorno são:

$$I_{jm}^+(0) = C_{e,j} \sigma T^4(0) / \pi \text{ e } I_{jm}^-(L) = C_{e,j} \sigma T^4(L) / \pi.$$

O fluxo de calor e o termo fonte radiativo são calculados, respectivamente, através de:

$$q_R''(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_g} 2\pi\mu_m\omega_m [I_{jm}^+(x) - I_{jm}^-(x)] \quad (3.78)$$

$$Q_R(x) = \sum_{m=1}^{n_d} \sum_{j=1}^{n_g} \left\{ 2\pi\omega_m p_i \kappa_{p,j,a} [I_{jm}^+(x) + I_{jm}^-(x)] - 4\pi p_i \kappa_{p,j,e} C_{e,j} I_b(x) \right\} \quad (3.79)$$

onde o somatório sobre todos os gases cinza (n_g) representa a integração espectral no modelo NCC-WSGG.

Uma das principais dificuldades envolvidas na solução LBL é a exigência do uso de bancos de dados espectrais. Para facilitar a aplicação do modelo NCC-WSGG, os coeficientes de absorção, emissão e a fração de energia de corpo negro serão apresentados na forma de correlações.

As funções que representam os coeficientes de absorção, emissão e a fração de energia de corpo negro de cada gás cinza podem ser ajustadas através de funções polinomiais. A fração de energia de cada gás cinza j , que depende somente da temperatura local T , pode ser escrita da seguinte forma:

$$C_{e,j}(T^*) = \sum_{k=0}^5 a_{s,j,k} (T^*)^k \quad (3.80)$$

onde termos $a_{s,j,k}$'s são os coeficientes da função polinomial. A temperatura local adimensional, definida em função da temperatura de referência T_{ref} , é dada por $T^* = (T - T_{ref}) / T_{ref}$.

O coeficiente de emissão de cada gás cinza j depende somente da temperatura local T e pode ser relacionado ao coeficiente de emissão na condição de referência através da função a seguir:

$$\frac{\kappa_{p,j,e}(T^*)}{\kappa_{p,j,e,ref}} = \sum_{k=0}^5 b_{s,j,k} (T^*)^k \quad (3.81)$$

onde termos $b_{s,j,k}$'s são os coeficientes da função polinomial.

O coeficiente de absorção de cada gás cinza j depende da temperatura local e de uma temperatura de absorção, T_a . Logo:

$$\frac{\kappa_{p,j,a}(T^*, T_a^*)}{\kappa_{p,j,e}(T^*)} = \sum_{k=0}^5 c_{s,j,k} (T_a^*)^k \quad (3.82)$$

onde a temperatura de absorção adimensional é calculada através de $T_a^* = (T_a - T)/T_{ref}$. Vários testes revelaram que se pode assumir $T_a = T$. Os coeficientes $c_{s,j,k}$'s, que expressam a dependência do coeficiente de absorção em relação à temperatura local, também são ajustados através de expressões polinomiais, como segue:

$$c_{s,j,k}(T^*) = \sum_{l=0}^5 d_{s,j,k,l} (T^*)^l \quad (3.83)$$

onde os termos $d_{s,j,k,l}$'s são os coeficientes da função polinomial.

4 RESULTADOS

4.1 Avaliação de alguns modelos globais para integração espectral da RTE

4.1.1 Soluções para uma única espécie química

Nesta Seção, considerou-se um gás confinado entre duas paredes negras separadas por uma distância $L = 1$ m. A região entre as placas é preenchida com 10 % de dióxido de carbono e 90 % de nitrogênio (ou outro gás inerte). São apresentados também os resultados para outra situação, onde o dióxido de carbono é substituído por vapor de água. Nesse caso, o meio é composto por 20 % de vapor de água e 80 % de nitrogênio. Em todos os problemas apresentados, a pressão total é 1 atm.

Na integração espectral da equação da transferência radiativa, foram aplicados os modelos SLW e CW, ambos com 20 gases cinza. Os resultados são apresentados em termos do fluxo de calor e do termo fonte radiativo. As soluções, obtidas a partir dos modelos espectrais, foram comparadas com a solução LBL. Todos os resultados foram obtidos através da última versão do banco de dados HITEMP. O Apêndice A, apresenta todas as simplificações adotadas para geração do espectro através do banco de dados HITEMP 2010.

Para avaliar os modelos espectrais em meios não isotérmicos, foram estudados alguns casos não isotérmicos com os seguintes perfis de temperatura:

$$T(x) = 1000 - 500 \left(\frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (4.1)$$

$$T(x) = 400 + 1400 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) \quad (4.2)$$

$$T(x) = 400 + 1400 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{2\pi x}{L} \right) \quad (4.3)$$

$$T(x) = \begin{cases} 880 + 920 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{2\pi x}{L} \right) & \text{se } x \leq L/4 \\ 400 + 1400 \left\{ 1 - \operatorname{sen}^{3/2} \left[\frac{2\pi}{3} \left(\frac{x}{L} - 0,25 \right) \right] \right\} & \text{se } x > L/4 \end{cases} \quad (4.4)$$

onde $x = 0$ e $x = L$ indicam a posição das paredes esquerda e direita, respectivamente. A Figura 4.1 mostra os perfis de temperatura.

Os desvios dos modelos em relação à solução LBL nos cálculos do fluxo de calor e do termo fonte radiativo são calculados, respectivamente, de acordo com:

$$\delta(\%) = 100 \frac{|q''_{R,\text{modelo}} - q''_{R,\text{LBL}}|}{\max |q''_{R,\text{LBL}}|} \quad (4.5)$$

$$\zeta(\%) = 100 \frac{|Q_{R,\text{modelo}} - Q_{R,\text{LBL}}|}{\max |Q_{R,\text{LBL}}|} \quad (4.6)$$

onde δ e ζ são, respectivamente, os erros locais no cálculo do fluxo de calor e do termo fonte radiativo, em %; $\max |q''_{R,\text{LBL}}|$ e $\max |Q_{R,\text{LBL}}|$ são, respectivamente, os valores máximos absolutos do fluxo e do termo fonte radiativo fornecidos pela solução LBL em cada caso analisado. Os símbolos δ_{\max} e ζ_{\max} designam os erros máximos; δ_{med} e ζ_{med} , os erros médios.

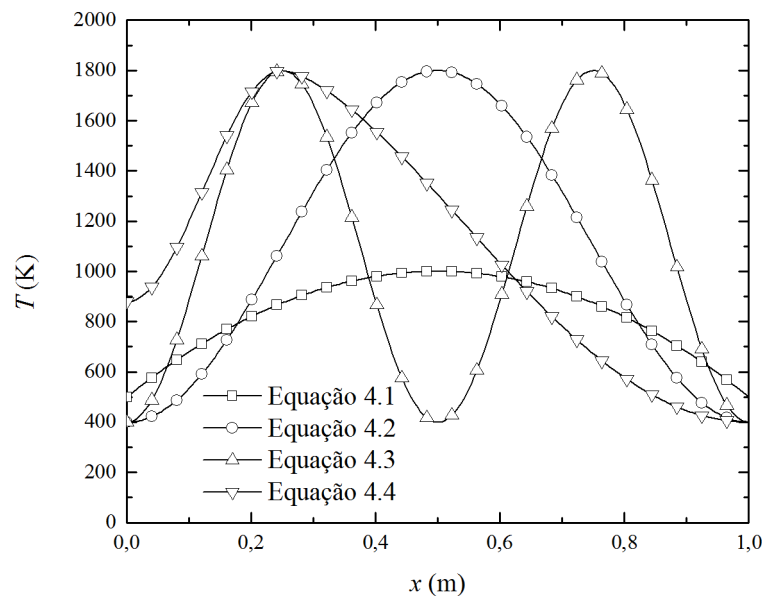


Figura 4.1 – Perfis de temperatura.

A Figura 4.2 mostra uma avaliação da discretização espacial através da solução LBL. O termo fonte radiativo foi calculado para a Equação 4.2 com $Y_c = 0,1$. Foram empregados 50

($\Delta x = 0,02$ m), 100 ($\Delta x = 0,01$ m), 150 ($\Delta x = 0,007$ m) e 200 pontos ($\Delta x = 0,005$ m) entre $0 \leq x \leq 1$ m. A solução com 200 pontos ($\Delta x = 0,005$ m) está adequada para este trabalho, pois o aumento do número de pontos (250 pontos, $\Delta x = 0,004$ m) provoca uma variação de apenas 0,2 % no termo fonte radiativo calculado no ponto onde a temperatura é máxima. Além disso, foi utilizado $n_d = 4$ para o número de direções. A alteração no número de direções ($n_d = 6$) provoca uma variação de 0,1 % no termo fonte radiativo. Para n_d direções, os nós μ_m e os fatores de ponderação ω_m foram obtidos através da quadratura de Gauss Legendre no intervalo [0,1].

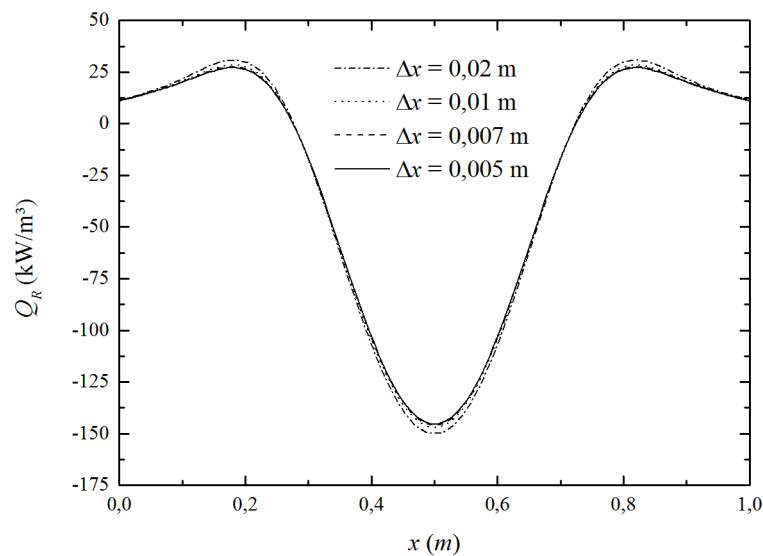


Figura 4.2 – Avaliação da discretização espacial através da solução LBL para o termo fonte radiativo (Equação 4.2, com $Y_c = 0,1$).

Os resultados para o perfil de temperatura definido pela Equação 4.1 estão representados em termos do fluxo de calor e do termo fonte radiativo nas Figuras 4.3 e 4.4, respectivamente. Nesse perfil, a temperatura varia de 500 K (paredes) até 1000 K (centro do domínio). Verifica-se que há um grande desvio entre as soluções CW e LBL no cálculo do fluxo de calor. Nas regiões próximas as paredes, o erro máximo chega a 37,8 %. Como demonstrado por Galarça *et al.*, 2011, em geral, isso ocorre porque o modelo CW não é conservativo, $Q_R \neq -dq_R''/dx$. Por outro lado, o modelo SLW, que é conservativo, fornece (no caso da Equação 4.1) resultados muito bons para o fluxo de calor. Isso fica evidenciado pelos erros máximo e médio de 1,5 % e 0,8 %, respectivamente. Apesar da deficiência apresentada pelo modelo CW no cálculo do fluxo de calor, quando esse modelo foi

empregado para o cálculo do termo fonte radiativo, foram obtidos erros máximo e médio de 3,8 % e 2,2 %, respectivamente. No cálculo do termo fonte radiativo, o método SLW foi ligeiramente superior ao CW. Os erros máximo e médio foram, respectivamente, de 3,1 % e 1,5 %.

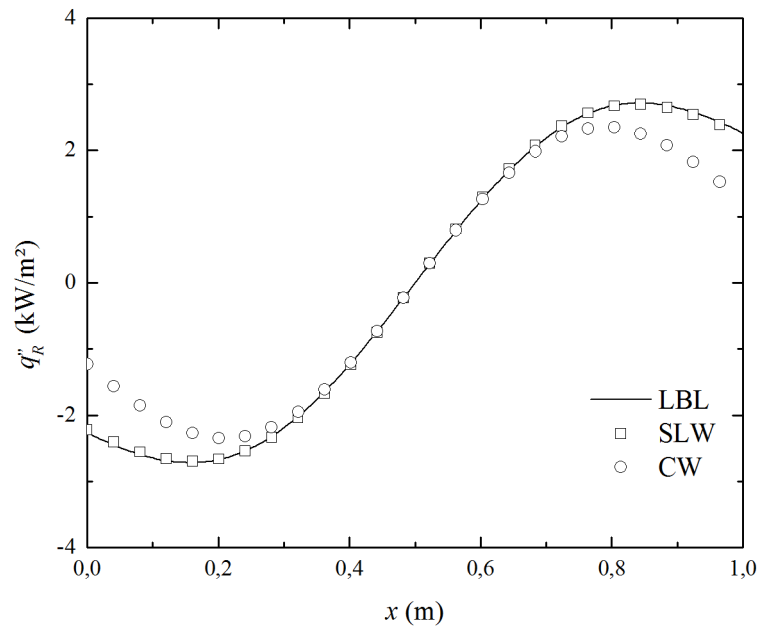


Figura 4.3 – Fluxo de calor para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1$).

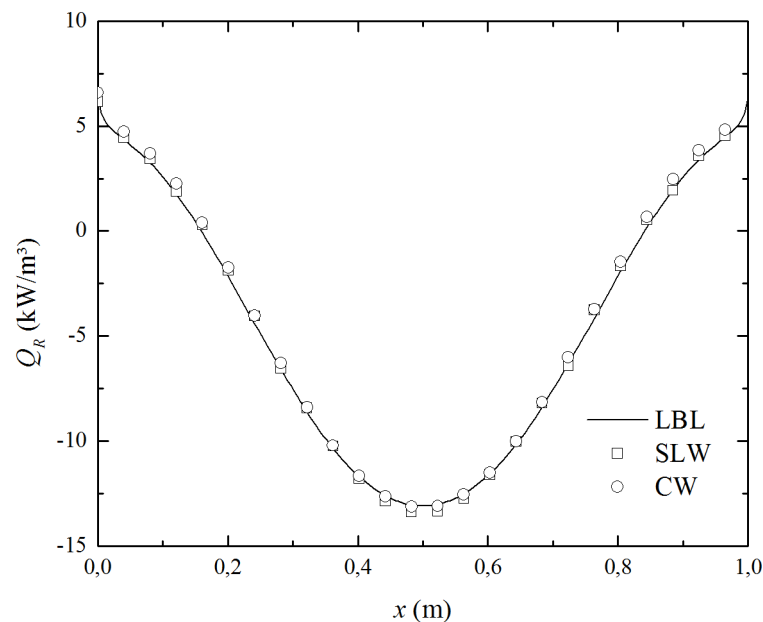


Figura 4.4 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1$).

As Figuras 4.5 e 4.6 mostram, respectivamente, o fluxo de calor e o termo fonte radiativo para a Equação 4.2. Nesse perfil, a temperatura varia de 400 K (paredes) até 1800 K

(centro do domínio). A Figura 4.5 mostra que o fluxo de calor é nulo a meia distância entre as placas devido à simetria no perfil de temperatura. Por outro lado, o termo fonte radiativo, na Figura 4.6, apresenta um pico em $x = 0,5$ m, onde a temperatura é máxima; o sinal negativo indica que, nessa região, o meio perde energia devido à radiação. As Figuras 4.5 e 4.6 mostram que o modelo SLW apresenta uma concordância mais satisfatória que o CW em relação à solução LBL. No caso do modelo SLW, os erros máximo e médio no termo fonte radiativo são de 6,0 % e 3,2 %, respectivamente. No modelo CW, os resultados para o termo fonte radiativo são semelhantes aos do SLW, mas no fluxo de calor o erro máximo é maior que 50,0 %, com erro médio de aproximadamente 25 %. Enquanto isso, no modelo SLW, os erros máximo e médio no fluxo de calor são menores que 6 %.

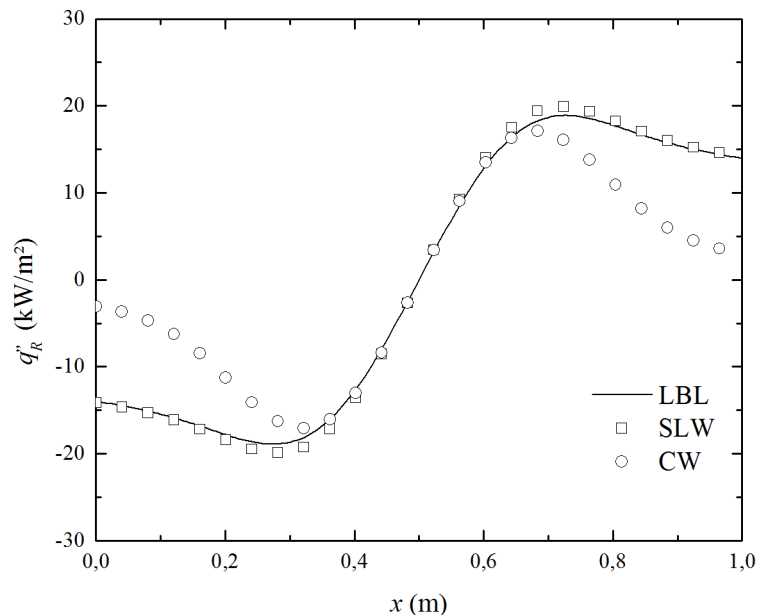


Figura 4.5 – Fluxo de calor Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$).

O próximo caso considera o perfil de temperatura dado pela Equação 4.3. Como visto na Figura 4.1, esse perfil também é simétrico, com pontos de máxima temperatura em $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m. As Figuras 4.7 e 4.8 mostram, respectivamente, o fluxo de calor e o termo fonte radiativo. Devido à simetria no perfil de temperaturas, novamente, o fluxo de calor é nulo a meia distância entre as placas. Para o fluxo de calor, a concordância entre os resultados do modelo SLW com a solução LBL é satisfatória, com erros máximo e médio de 6,4 % e 3,8 %, respectivamente, como verificado na Tabela 4.1. Já na solução com o modelo CW, o erro máximo é quase 60 %, próximo às paredes. O termo fonte radiativo, Figura 4.8, é simétrico em relação à meia distância entre as placas, alcançando valores máximos absolutos

em $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m, o que já era esperado, pois é justamente nessas posições que a temperatura atinge os valores máximos. Na solução SLW, houve um leve acréscimo nos valores dos erros máximo e médio, que atingiram 7,6 % e 4,0 %, respectivamente, como mostra a Tabela 4.1. Na solução CW, o acréscimo nos erros foi mais acentuado. Os valores máximo e médio atingiram 15,5 % e 6,8 %, respectivamente.

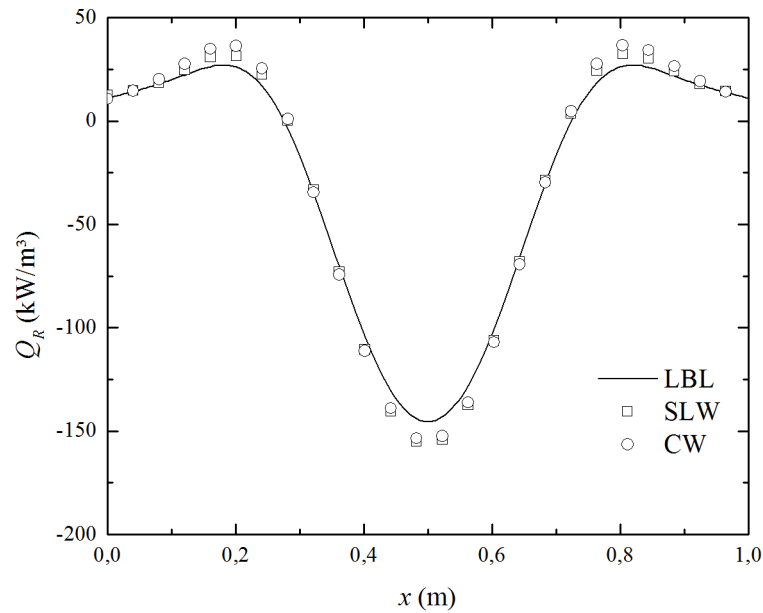


Figura 4.6 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$).

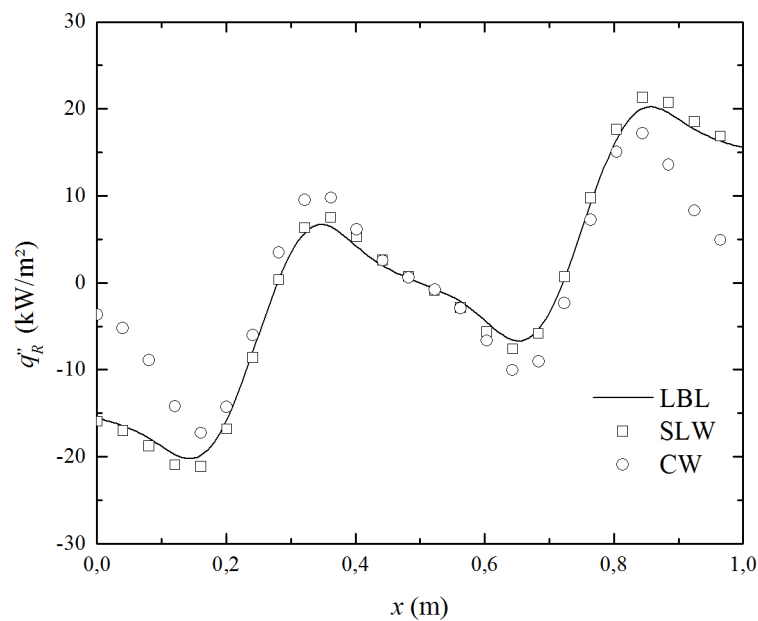


Figura 4.7 – Fluxo de calor para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$).

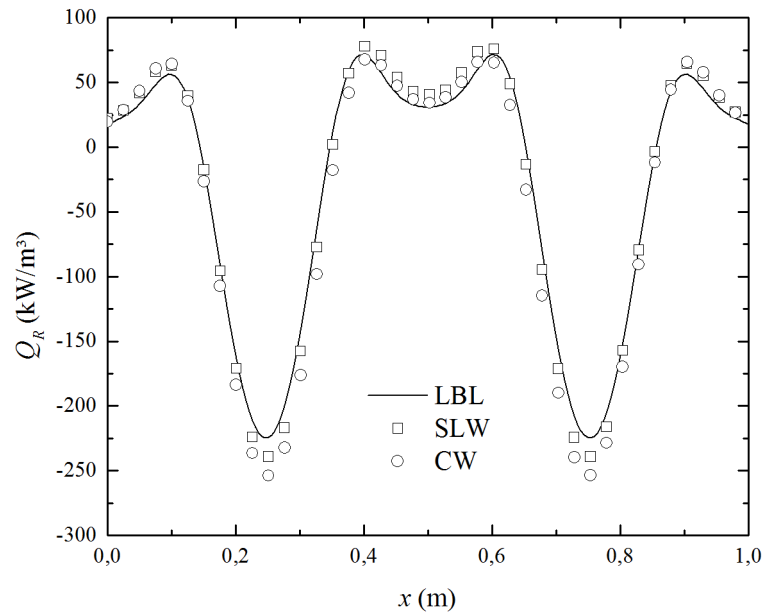


Figura 4.8 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$).

Ao contrário dos casos anteriores, o perfil de temperatura representado pela Equação 4.4 não é simétrico. O pico de temperatura permanece o mesmo (1800 K), mas ocorre em $x = 0,25$ m. Nesse caso, as paredes encontram-se em temperaturas diferentes: em $x = 0$, $T = 880$ K, e em $x = 1$ m, $T = 400$ K. A Figura 4.9 apresenta o fluxo de calor. Nesse caso, também há boa concordância do modelo SLW com a solução LBL. A Tabela 4.1 mostra que os erros máximo e médio são de 5,8 % e 3,3 %. Em relação aos perfis de temperatura anteriores, a solução CW para o fluxo de calor proporcionou uma grande queda no valor do erro máximo, mas, mesmo assim, esse valor ficou próximo de 15 %. A Figura 4.10 mostra que o valor do termo fonte radiativo é muito baixo próximo à parede em $x = L$, pois, nessa região, a temperatura varia muito pouco em relação à temperatura da parede. No cálculo do termo fonte radiativo, o erro máximo na solução SLW não passa de 6,4 %, enquanto que no CW é de 7,0 %. A Tabela 4.1 mostra que o erro máximo nos modelos aumentou com o acréscimo na diferença entre as temperaturas máxima e mínima no domínio. Na Equação 4.1, primeiro perfil de temperatura, a diferença era de 500 K. Nos demais perfis, esse valor aumentou para 1400 K.

Quando os problemas anteriores foram resolvidos para vapor de água ($Y_w = 0,2$), os perfis para o fluxo de calor e para o termo fonte radiativo foram idênticos, diferindo apenas na ordem de magnitude. A Tabela 4.2 mostra os erros máximo e médio para cada perfil de temperatura. Em geral, verificam-se os mesmos comportamentos relatados para as soluções da Tabela 4.1.

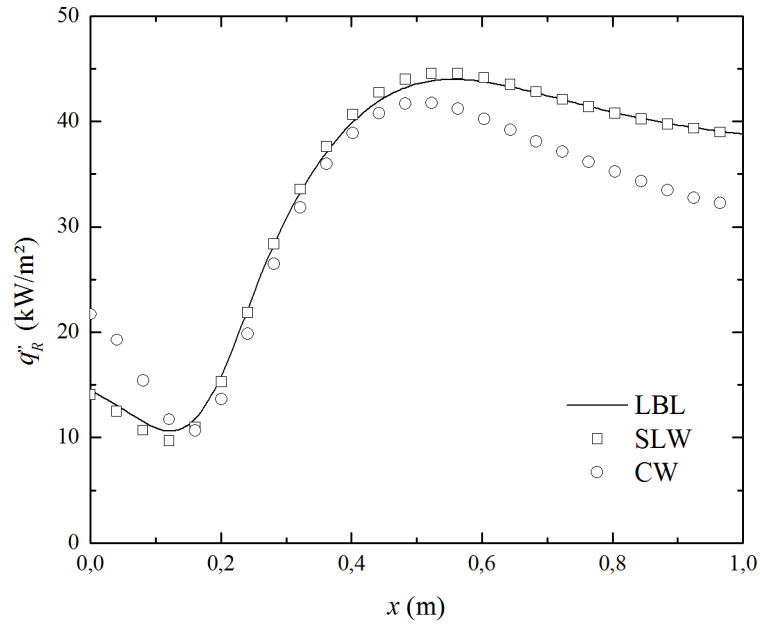


Figura 4.9 – Fluxo de calor Resultados para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$).

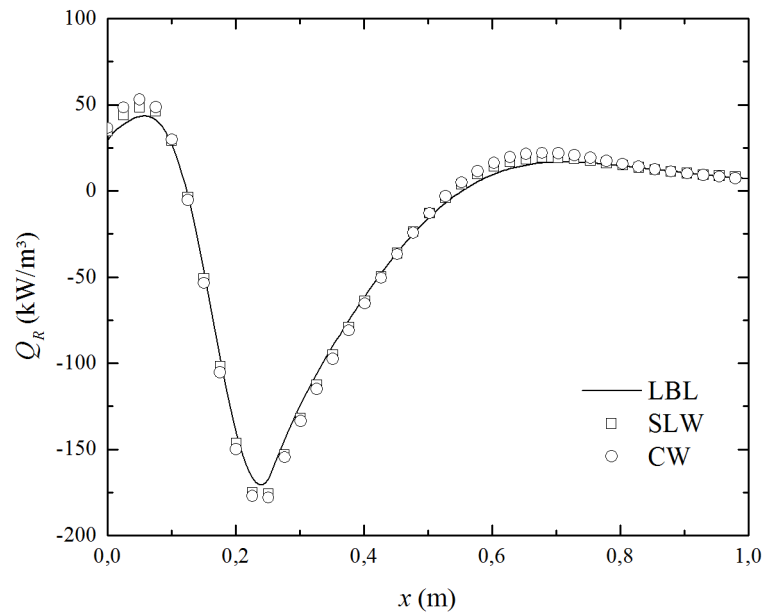


Figura 4.10 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$).

Tabela 4.1 – Desvio percentual entre as soluções CW, SLW e LBL ($Y_c = 0,1$).

	CW				SLW			
	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
Equação 4.1	37,8	11,8	3,8	2,2	1,5	0,8	3,1	1,5
Equação 4.2	57,6	25,9	7,0	3,7	6,0	3,2	7,6	2,9
Equação 4.3	58,9	20,2	15,5	6,8	6,4	3,8	7,6	4,0
Equação 4.4	16,2	8,2	7,0	2,9	5,8	3,3	6,4	2,1

Tabela 4.2 – Desvio percentual entre as soluções CW, SLW e LBL ($Y_w = 0,2$).

	CW				SLW			
	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
Equação 4.1	33,1	14,2	8,9	4,7	4,4	3,1	3,9	2,5
Equação 4.2	50,2	23,1	8,6	2,8	3,3	1,3	7,0	2,6
Equação 4.3	54,6	19,5	23,1	6,0	4,3	2,2	10,9	4,1
Equação 4.4	28,2	19,9	14,1	3,1	3,8	1,3	9,0	2,1

4.1.2 Soluções para mistura de CO₂ e H₂O

Os resultados apresentados nas seções anteriores consideraram um meio participante constituído por uma única espécie química. Nesta seção, a região entre duas placas, separadas por uma distância $L = 1$ m, é preenchida com uma mistura não isotérmica e homogênea de dióxido de carbono ($Y_c = 0,1$) e vapor de água ($Y_w = 0,2$). A pressão total é 1 atm.

Foram selecionados dois perfis de temperatura (Equações 4.1 e 4.2) para efetuar a comparação entre os modelos espectrais CW, SLW e WSGG. No modelo WSGG, foram utilizadas as correlações propostas por Dorigon *et al.*, 2013, que consideram 4 gases cinza. Esses dados estão disponíveis na Tabela 3.1 (Seção 3.2), para a razão $p_w/p_c = 2$. As soluções CW e SLW são com 20 gases cinza.

Nas Figuras 4.11 e 4.12 aparecem, respectivamente, o fluxo e o termo fonte radiativo para a Equação 4.1. No fluxo de calor, são observados os mesmos comportamentos relatados anteriormente para uma única espécie química. Como pode ser verificado na Tabela 4.3, o erro máximo no fluxo de calor é de 1,6 % para o modelo SLW, enquanto que no WSGG o erro é de 2,4 %. No cálculo do termo fonte radiativo para mistura de CO₂ e H₂O, o modelo CW (erro máximo de 4,0 %) foi inferior ao SLW (erro máximo de 2,9 %).

As Figuras 4.13 e 4.14 mostram o fluxo de calor e o termo fonte radiativo, respectivamente, para a Equação 4.2. Em função do considerável aumento entre as temperaturas máxima e mínima no domínio (na Equação 4.1 era de 500 K, para a Equação 4.2 é 1400 K), os erros nos modelos CW e SLW apresentaram um incremento, como pode ser observado na Tabela 4.3. No SLW, o erro máximo no termo fonte radiativo, por exemplo, passou de 2,9 % para 11 %. Assim como nos casos anteriores, a maior discrepância nos modelos CW e SLW, quando comparados à solução LBL, ocorre na região onde a

temperatura é máxima. A solução WSGG não foi afetada pelo aumento na diferença entre as temperaturas máxima e mínima no domínio.

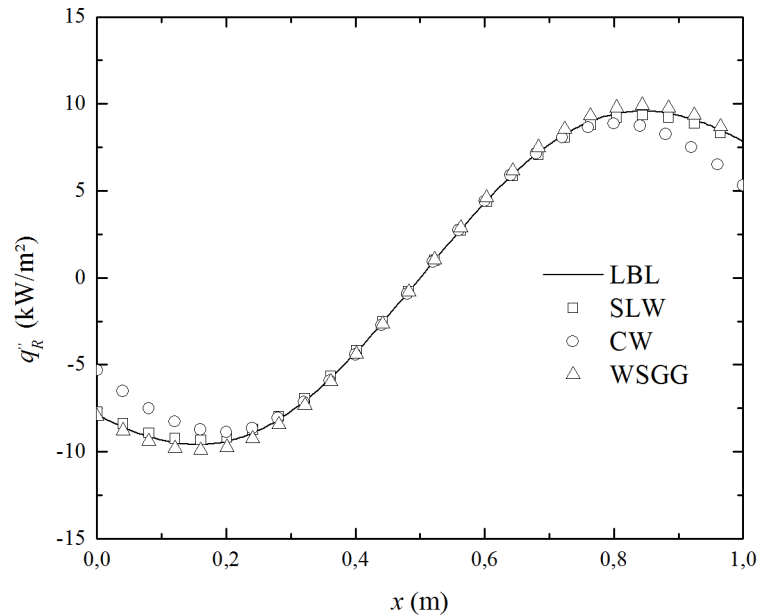


Figura 4.11 – Fluxo de calor para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1$, $Y_w = 0,2$).

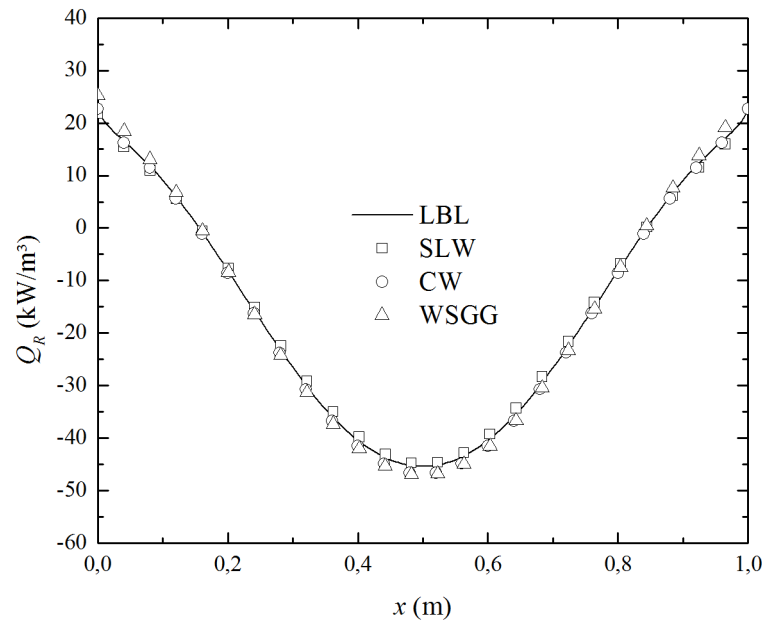


Figura 4.12 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.1 ($Y_c = 0,1$, $Y_w = 0,2$).

Observando-se os resultados apresentados nesta seção, parece um contrassenso que um modelo como o WSGG, com apenas 4 gases cinza, apresente resultados compatíveis com os de modelos mais sofisticados (CW e SLW), com 20 gases. Esse tipo de comportamento

pode ser atribuído aos métodos de acoplamento entre as espécies químicas na mistura (Seções 3.3.1 e 3.4.1). Os modelos CW e SLW utilizam aproximações para fazer a mistura, enquanto que o WSGG não necessita de nenhum método de acoplamento, pois a mistura das espécies químicas é realizada antes da obtenção das correlações. Entretanto, essas correlações apresentam limitações, pois são obtidas para razão fixa entre as pressões parciais das espécies químicas. Por exemplo, nas correlações obtidas a partir da mistura de CO_2 e H_2O para metano p_w/p_c deve ser próxima de 2 (Tabela 3.1, Seção 3.2).

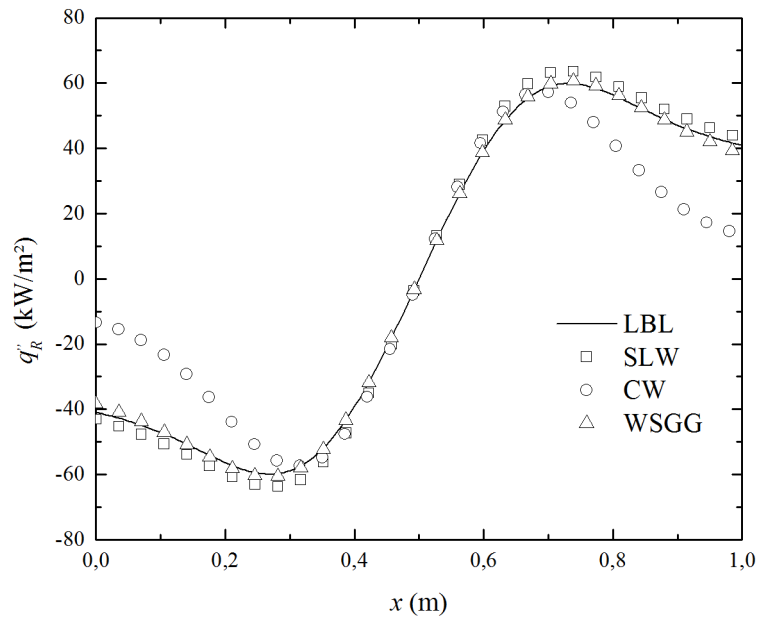


Figura 4.13 – Fluxo de calor para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$, $Y_w = 0,2$).

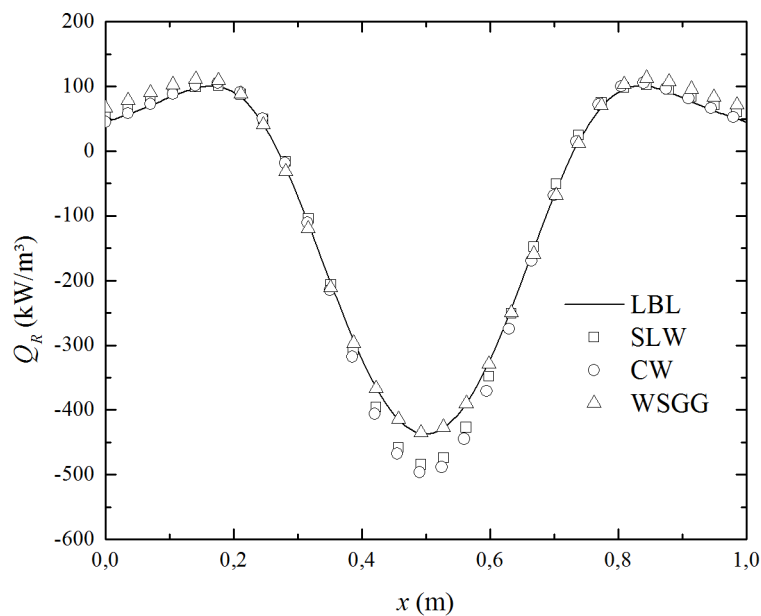


Figura 4.14 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$, $Y_w = 0,2$).

Tabela 4.3 – Desvio percentual dos modelos CW, SLW, WSGG em relação à solução LBL
($Y_c = 0,1$ e $Y_w = 0,2$).

CW	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
Equação 4.1	26,4	7,0	3,7	2,0
Equação 4.2	45,9	19,7	14,0	3,9
SLW	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
Equação 4.1	2,6	1,6	2,9	1,6
Equação 4.2	7,3	5,3	11,0	3,0
WSGG	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
Equação 4.1	3,6	2,4	5,8	2,5
Equação 4.2	4,5	1,1	5,1	2,1

4.2 Estudo do modelo SLW

Como mencionado nas Seções 3.4 e 3.5, sabe-se que o modelo CW não é conservativo e, portanto, apresenta resultados ruins para o fluxo de calor. Em relação ao modelo SLW, que é conservativo, os próprios desenvolvedores do método mostram um caso onde o erro no cálculo do fluxo de calor (problema unidimensional, mistura não isotérmica e não homogênea de H₂O e CO₂) atingiu 17 % [Solovjov *et al.*, 2011b]. O objetivo desta seção é apresentar um estudo detalhado do modelo, analisando os fatores que provocam erros em relação à solução LBL.

4.2.1 Estudo do efeito da temperatura de referência

Denison e Webb, 1995b, verificaram que, assumindo-se a validade da aproximação de escala, a temperatura de corpo negro T_b deve ser fixa e igual à temperatura de referência. Porém, como será mostrado posteriormente, a aproximação de escala é uma das maiores fontes de erro no modelo SLW. Como discutido na Seção 3.3, a aproximação de escala é aplicada na forma da seguinte equação, conhecida como aproximação de referência:

$$\begin{aligned}
 & F[C_j; T_b = T_{ref}; T_g = T_{loc}; Y = Y_{loc}; p = p_{loc}] \\
 & = F[C_{j,ref}; T_b = T_{ref}; T_g = T_{ref}; Y = Y_{ref}; p = p_{ref}]
 \end{aligned}
 \tag{4.7}$$

A seguir, será estudado o efeito da temperatura de referência na solução SLW através da alteração do valor de T_{ref} nos dois lados da Equação 4.7. A análise baseia-se em duas situações. Na primeira, a diferença entre as temperaturas máxima e mínima no domínio ΔT é variada, mas a temperatura média T_{med} é mantida constante. Na segunda, a temperatura média é modificada mantendo-se ΔT constante. Nos testes, um meio unidimensional composto por 10 % de CO_2 e 90 % de nitrogênio, confinado entre paredes negras, está sujeito ao seguinte perfil de temperatura:

$$T(x) = T_w + \Delta T \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (4.8)$$

onde T_w é a temperatura das paredes e $L = 1$ m.

De acordo com a proposta de Denison e Webb, 1995b, na formulação do modelo SLW, adota-se $T_{ref} = T_{med}$. Porém, nos resultados apresentados a seguir, a temperatura T_{ref} é modificada (na Equação 4.7) e assumem-se valores entre as temperaturas mínima e máxima no domínio. As Figuras 4.15 até 4.17 mostram o efeito da temperatura de referência nos erros no fluxo de calor δ e no termo fonte radiativo ζ , variando-se ΔT com T_{med} constante. Como pode ser verificado nas figuras, em todos os casos, existe forte dependência da solução SLW em relação ao parâmetro T_{ref} , sendo que para temperaturas inferiores a T_{med} essa dependência é mais significativa.

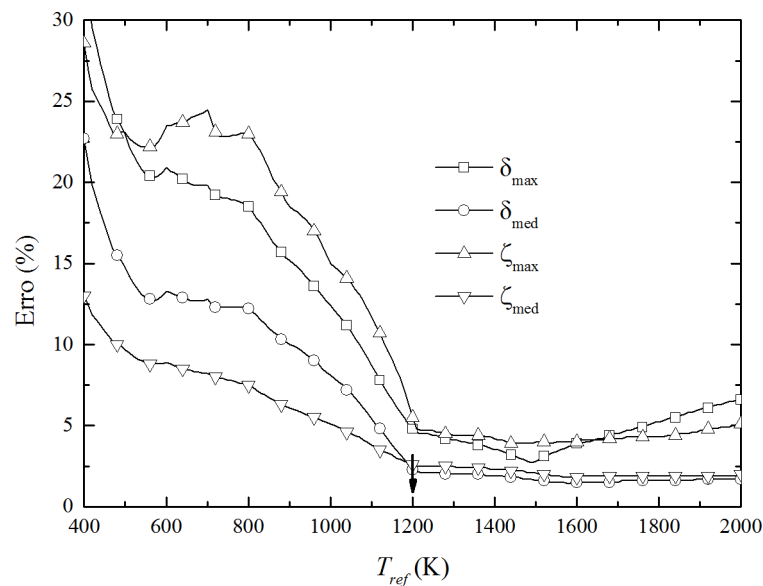


Figura 4.15 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 400$ K, $\Delta T = 1600$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$.

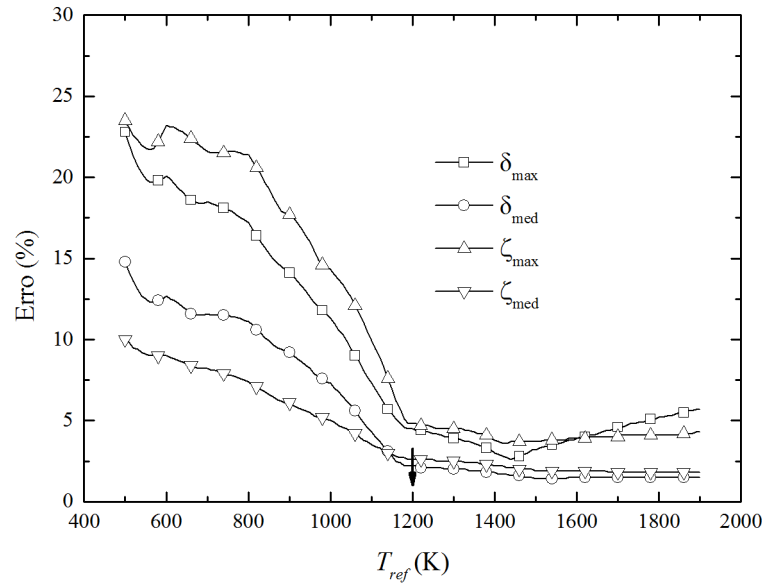


Figura 4.16 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 500$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$.

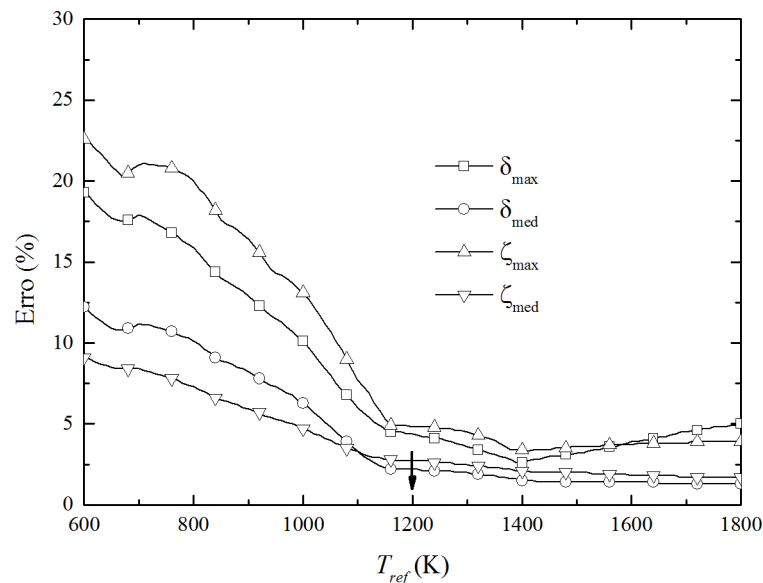


Figura 4.17 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 600$ K, $\Delta T = 1200$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$.

A Tabela 4.4 resume os resultados das soluções SLW apresentadas nas Figuras 4.15 – 4.17, nas quais se analisou o efeito da variação da diferença de temperaturas ΔT quando a temperatura média é constante. A Tabela 4.4 compara soluções do modelo SLW, que utilizam $T_{ref} = T_{med}$ (valor recomendado por Denison e Webb, 1995b), com resultados onde $T_{ref} = \Delta T$. Na maioria dos casos, há uma redução nos erros máximos e médios para o fluxo de calor e

para o termo fonte radiativo assumindo-se T_{ref} igual à diferença de temperaturas ΔT . Pode-se chegar às mesmas conclusões quando dióxido de carbono é substituído por vapor de água.

Tabela 4.4 – Efeito da temperatura de referência na solução SLW para T_{med} constante.

$T_{ref} = T_{med}$ (Denison e Webb, 1995b)				$T_{ref} = \Delta T$			
δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
4,8 ⁽¹⁾	2,3	5,5	2,6	3,9	1,5	4,0	1,8
4,5 ⁽²⁾	2,2	4,8	2,6	3,0	1,8	3,8	2,2
4,4 ⁽³⁾	2,2	4,8	2,7	4,4	2,2	4,8	2,7

(¹) Figura 4.15, (²) Figura 4.16, (³) Figura 4.17.

As Figuras 4.18 até 4.20 apresentam os erros no fluxo de calor δ e no termo fonte radiativo ζ para alguns casos onde T_{ref} é modificada na Equação 4.7, variando-se T_{med} (com ΔT constante). Nos casos apresentados nas Figuras 4.18 até 4.20, mais uma vez, T_{ref} assume valores entre as temperaturas mínima e máxima no domínio. Novamente, em todos os problemas estudados, existe forte dependência da solução SLW em relação ao parâmetro T_{ref} .

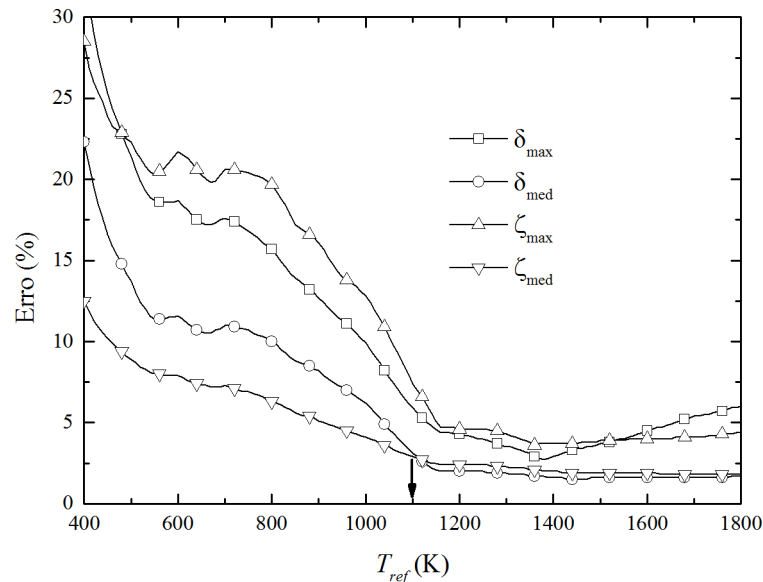


Figura 4.18 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 400$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1100$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$.

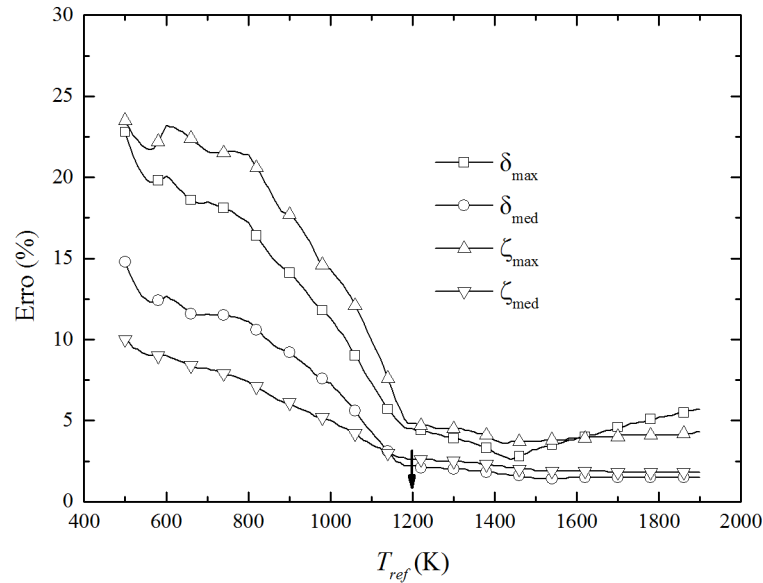


Figura 4.19 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 500$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1200$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$.

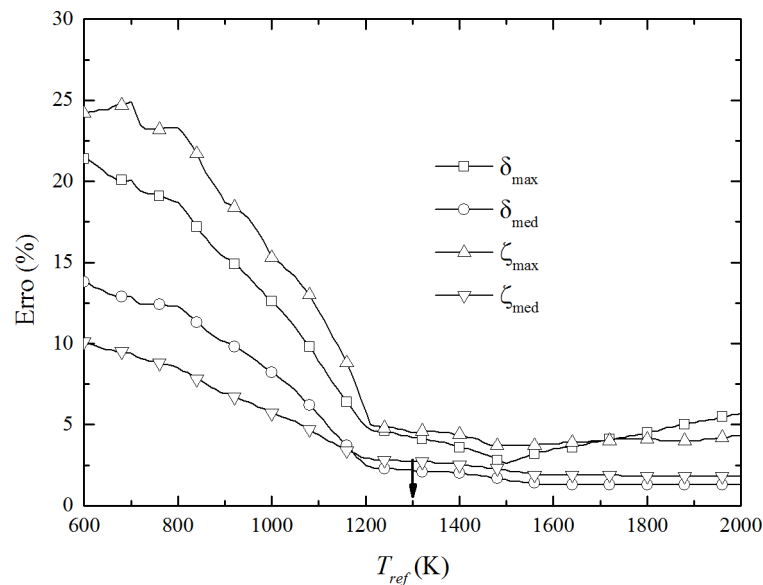


Figura 4.20 – Avaliação da temperatura de referência para $T_w = 600$ K, $\Delta T = 1400$ K, $T_{med} = 1300$ K ($Y_c = 0,1$). A seta para baixo indica o valor de $T_{ref} = T_{med}$.

A Tabela 4.5 resume os resultados das soluções SLW apresentadas nas Figuras 4.18 – 4.20, nas quais se analisou o efeito da variação da temperatura média quando a diferença de temperatura é constante. A Tabela 4.5 compara soluções do modelo SLW, que utilizam $T_{ref} = T_{med}$ (valor recomendado por Denison e Webb, 1995b), com resultados onde $T_{ref} = \Delta T$. Assim como nos casos anteriores, há redução nos erros máximo e médio do modelo SLW

assumindo-se T_{ref} igual à diferença de temperatura ΔT . Pode-se chegar às mesmas conclusões quando dióxido de carbono é substituído por vapor de água.

Tabela 4.5 – Efeito da temperatura de referência na solução SLW para ΔT constante.

$T_{ref} = T_{med}$ (Denison e Webb, 1995b)				$T_{ref} = \Delta T$			
δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
5,9 ⁽¹⁾	3,1	7,4	2,9	2,9	1,6	3,7	2,0
4,5 ⁽²⁾	2,2	4,8	2,6	3,0	1,8	3,8	2,2
4,2 ⁽³⁾	2,2	4,5	2,7	3,6	2,0	4,4	2,5

⁽¹⁾ Figura 4.18, ⁽²⁾ Figura 4.19, ⁽³⁾ Figura 4.20.

4.2.2 Avaliação da aproximação de escala através da construção de um espectro fictício

Como descrito na Seção 3.3, a extensão do modelo SLW para meios não homogêneos e/ou não isotérmicos depende da aproximação de escala, na qual um gás não isotérmico e/ou não homogêneo é substituído por um gás isotérmico e homogêneo equivalente. A Figura 4.21 mostra uma faixa estreita do espectro obtido, para $Y_c = 1$, a partir do banco de dados HITEMP 2010. O valor da seção transversal de absorção é apresentado para diversas temperaturas. Uma análise da Figura 4.21 revela que o espectro real não obedece à aproximação de escala. Se o espectro seguisse essa aproximação, as curvas para C_η (em qualquer temperatura) seriam idênticas, diferindo apenas na magnitude de C_η . No intervalo espectral mostrado na Figura 4.21, as curvas para $T = 1300$ K e $T = 1500$ K são muito semelhantes. Assim, pode-se dizer que estão de acordo com a aproximação de escala. A falha na aproximação é a maior responsável pelos desvios observados nas Tabelas 4.1 e 4.2 para o modelo SLW.

A partir do espectro real, é possível criar um espectro fictício de acordo com a aproximação de escala. Para isso, deve-se definir uma condição de referência e um fator de escala para cada temperatura. O novo espectro é criado artificialmente, para uma dada temperatura, multiplicando-se o valor da seção transversal na condição de referência pelo fator de escala correspondente.

Neste trabalho, o espectro real de dióxido de carbono com $Y_c = 1$ foi utilizado para obtenção de um fator de escala f_e , calculado para temperatura variando de 400 K até 1800 K, com passo de 100 K. O fator f_e é dado pela equação a seguir:

$$f_e(T) = \frac{\int_{\eta} \kappa_{\eta}(T) d\eta}{\int_{\eta} \kappa_{\eta}(T_{ref}) d\eta} \quad (4.9)$$

onde $T_{ref} = 1100$ K (para a temperatura de referência, $f_e = 1$). A Figura 4.22 mostra os valores do fator de escala para temperatura variando de 400 K até 1800 K.

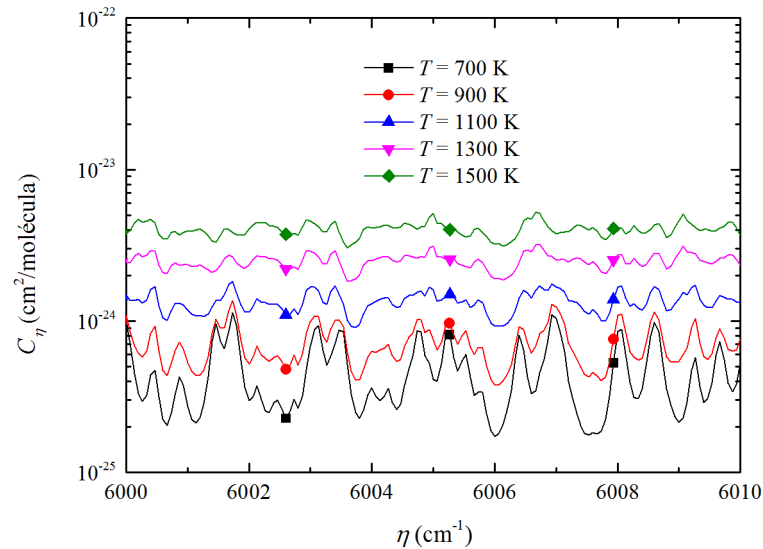


Figura 4.21 – Faixa estreita do espectro real de CO_2 para algumas temperaturas ($Y_c = 0,1$).

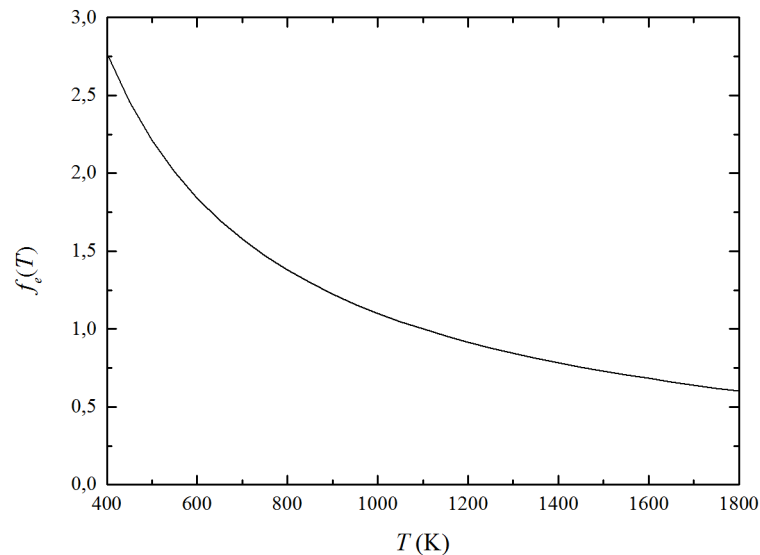


Figura 4.22 – Fator de escala calculado através do espectro real de CO_2 .

O espectro fictício, construído multiplicando-se o valor da seção transversal de absorção para $T_{ref} = 1100$ K pelo fator de escala f_e , está apresentado na Figura 4.23. A seção transversal de absorção fictícia C_η^* , para uma dada temperatura T , é calculada através de:

$$C_\eta^*(T) = f_e(T) C_\eta(T_{ref}) \quad (4.10)$$

A Figura 4.23 mostra que, como o espectro foi construído de acordo com a aproximação de escala, as curvas para C_η são idênticas para qualquer temperatura, diferindo apenas na magnitude de C_η .

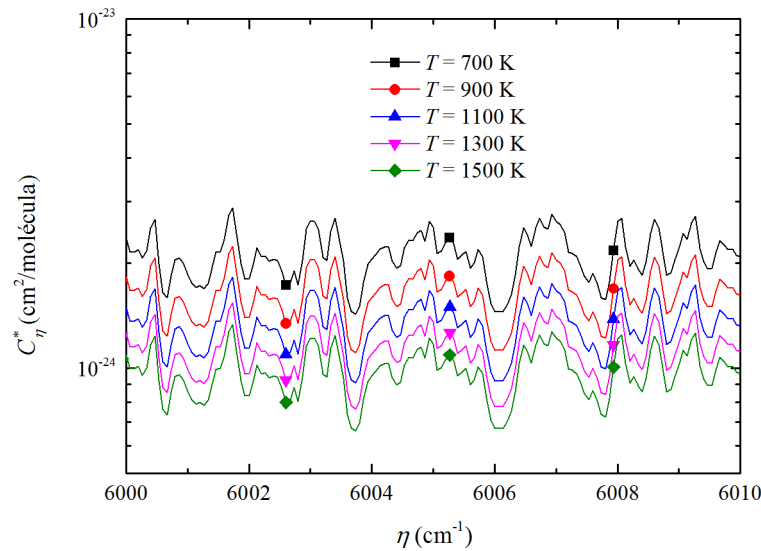


Figura 4.23 – Faixa estreita do espectro fictício de CO_2 gerado a partir da aplicação da aproximação de escala no espectro real com $T_{ref} = 1100$ K.

As Figuras 4.24 – 4.29 mostram os resultados para o mesmo problema proposto no início deste capítulo (meio não isotérmico unidimensional preenchido com 10 % de CO_2 mais 90 % de nitrogênio). Porém, o espectro real de CO_2 foi substituído pelo espectro fictício. Novamente, são apresentadas soluções em termos do fluxo e do termo fonte radiativo. Os resultados são mostrados para três perfis de temperatura (Equação 4.2 – 4.4). Observa-se que, como o espectro foi construído de acordo com a aproximação de escala, o modelo SLW fornece resultados que se aproximam muito aos da solução LBL, com erros máximos menores que 2,0 % (Tabela 4.6).

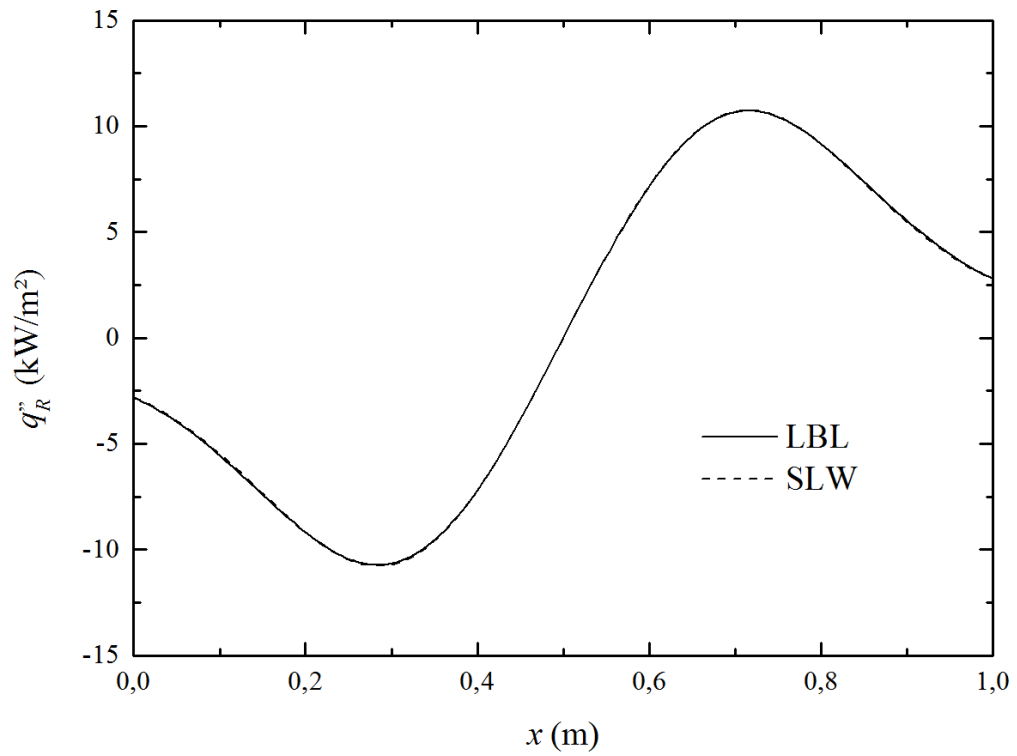


Figura 4.24 – Fluxo de calor para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).

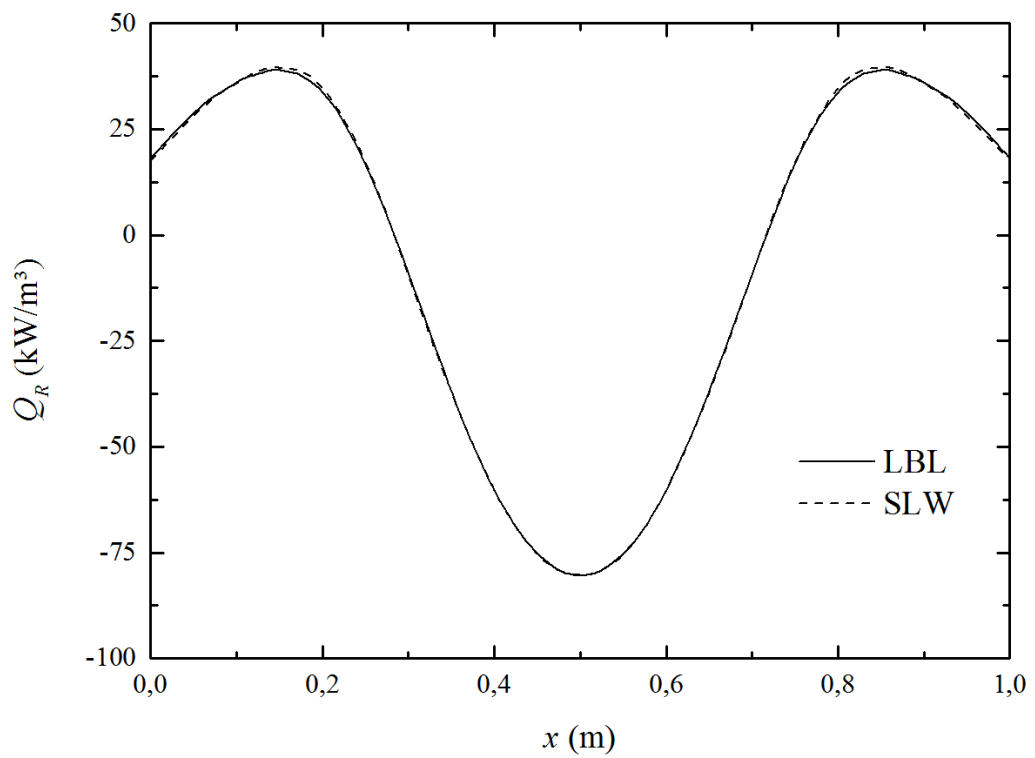


Figura 4.25 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).

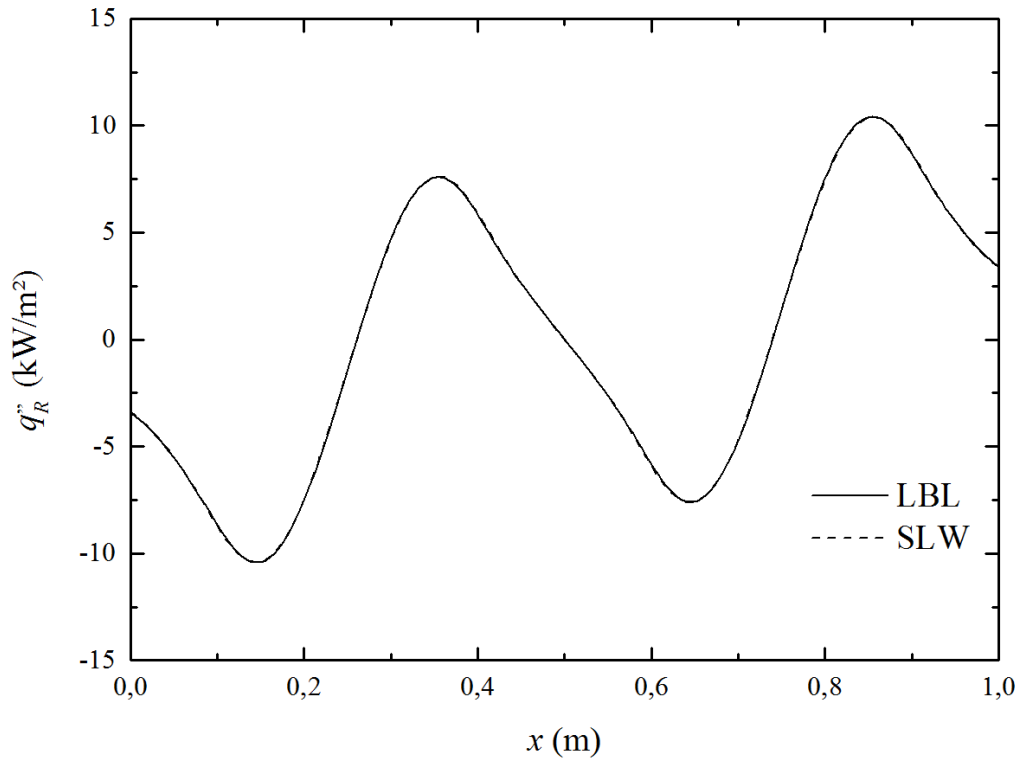


Figura 4.26 – Fluxo de calor para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).

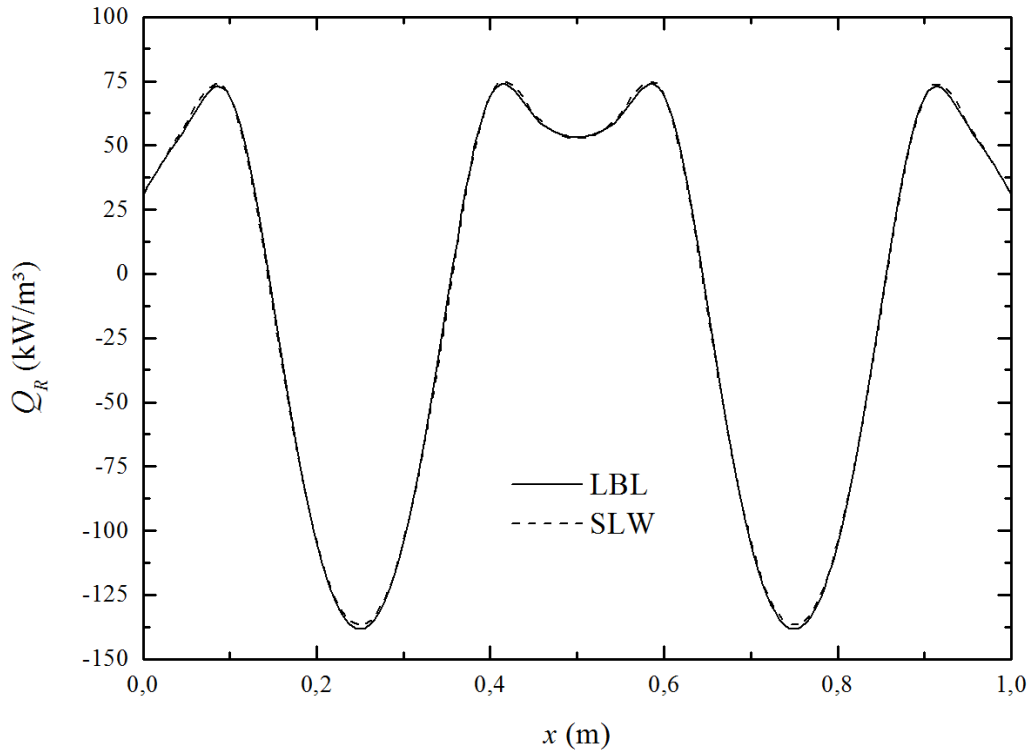


Figura 4.27 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.3 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).

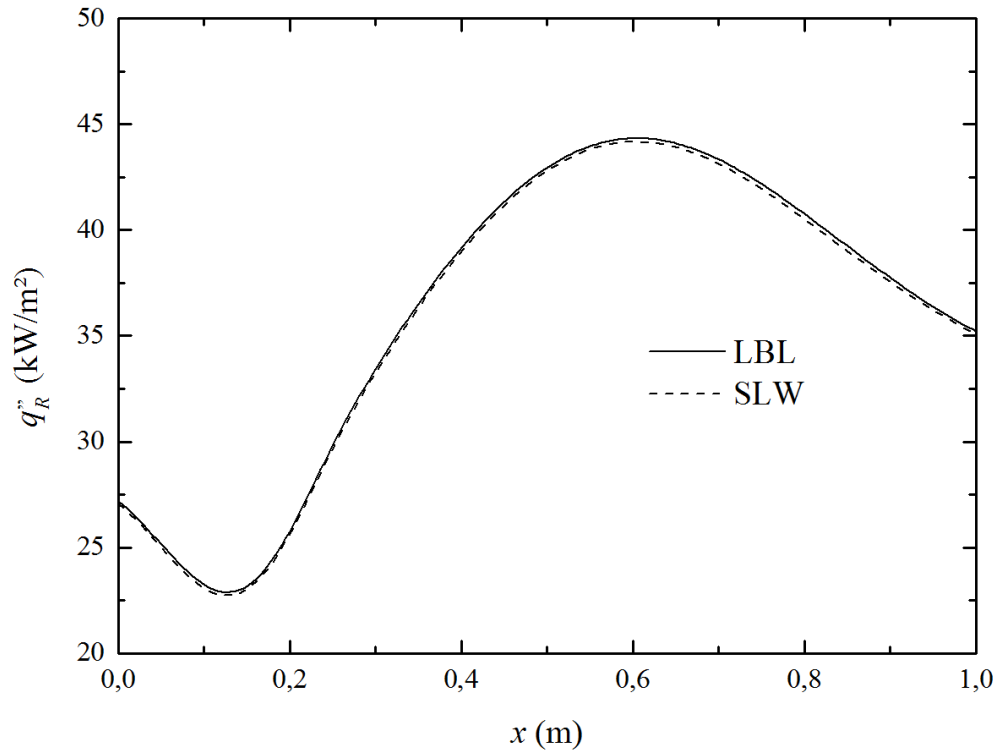


Figura 4.28 – Fluxo de calor para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).

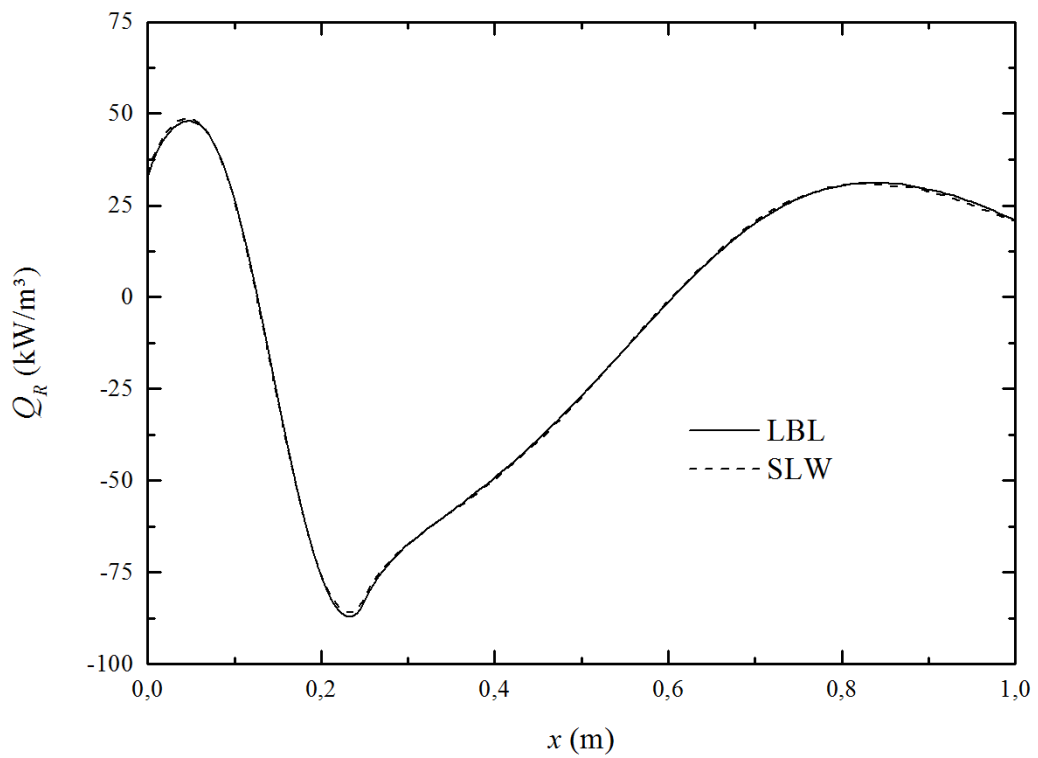


Figura 4.29 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.4 ($Y_c = 0,1$ – espectro fictício).

A Tabela 4.6 mostra uma comparação entre as soluções SLW e LBL, ambas baseadas no espectro fictício da Figura 4.23. Nesse caso, os erros máximos no fluxo de calor e no termo fonte radiativo são inferiores a 1,0 % e 2,0 %, respectivamente. Isso prova que, se o espectro é construído de acordo com a aproximação de escala, os resultados do modelo SLW ficam muito próximos aos da solução LBL.

Tabela 4.6 – Desvio percentual entre as soluções SLW e LBL (espectro fictício – $Y_c = 0,1$).

	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
Equação 4.2	0,7	0,3	1,8	0,5
Equação 4.3	0,8	0,3	1,8	0,8
Equação 4.4	0,6	0,4	1,3	0,5

4.2.3 Avaliação da temperatura de corpo negro no espectro fictício

Na Seção 3.3, foi apresentada a aproximação de referência (Equação 3.25), que é consequência da aplicação da aproximação de escala (Equação 3.22) entre dois estados termodinâmicos diferentes e permite a extensão do modelo SLW para problemas não isotérmicos e/ou não homogêneos. A Equação 3.25 depende da temperatura de corpo negro T_b , que é utilizada para calcular o valor da função distribuição ALB (Equação 3.20). No modelo SLW, nos dois lados da Equação 3.25, T_b é mantida fixa e igual à temperatura média no domínio, $T_b = T_{ref}$. Se a aproximação de escala é válida, a temperatura T_b deve ser fixa para garantir que a fração de energia de corpo negro entre dois estados termodinâmicos seja equivalente.

A seguir, será avaliado o efeito da temperatura de corpo negro na solução SLW aplicada no espectro fictício. Esta é uma avaliação semelhante a que foi realizada na Seção 4.2.1. Na aproximação de referência, será empregado $T_b = T$, onde T é uma temperatura qualquer fixa entre 400 K e 1800 K. A aproximação de referência, nesse caso, é dada pela equação abaixo:

$$\begin{aligned}
 & F[C_j; T_b = T; T_g = T_{loc}; Y = Y_{loc}; p = p_{loc}] \\
 & = F[C_{j,ref}; T_b = T; T_g = T_{ref}; Y = Y_{ref}; p = p_{ref}]
 \end{aligned}
 \tag{4.11}$$

As Figuras 4.30 – 4.32 mostram o termo fonte radiativo para as Equações 4.2 – 4.4, respectivamente, para o espectro fictício de dióxido de carbono (Figura 4.23). As soluções do modelo SLW, apresentadas para alguns valores de T_b (600 K, 1000 K, 1400 K, 1800 K), são comparadas com a solução LBL. Em todos os casos, a temperatura de referência é 1100 K e a concentração do meio é mantida constante ($Y_c = 0,1$).

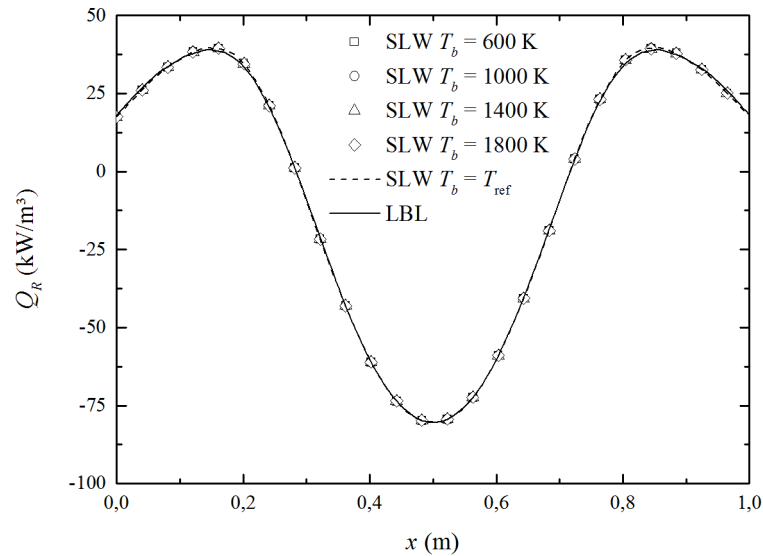


Figura 4.30 – Avaliação da temperatura de corpo negro no cálculo do termo fonte radiativo para a Equação 4.2 (Espectro fictício – $Y_c = 0,1$).

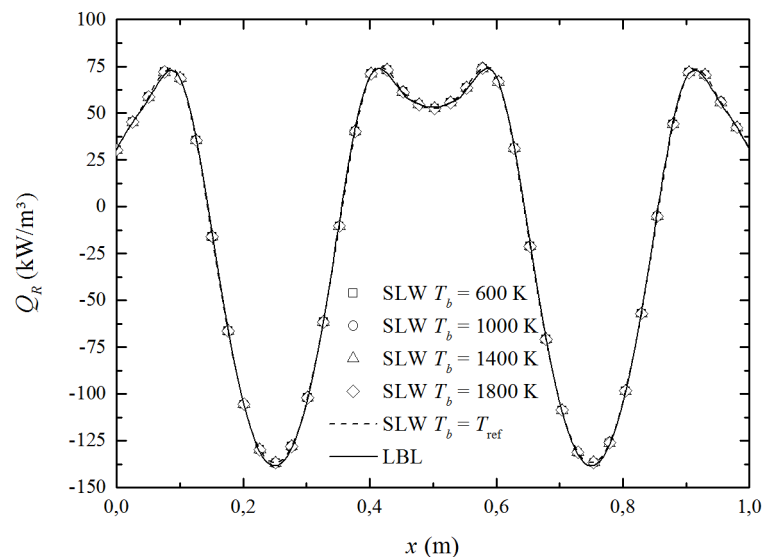


Figura 4.31 – Avaliação da temperatura de corpo negro no cálculo do termo fonte radiativo para a Equação 4.3 (Espectro fictício – $Y_c = 0,1$).

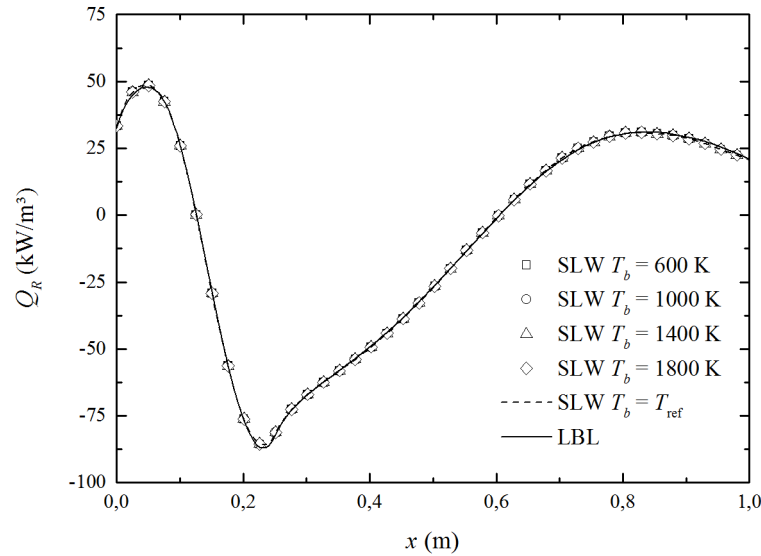


Figura 4.32 – Avaliação da temperatura de corpo negro no cálculo do termo fonte radiativo para a Equação 4.4 (Espectro fictício – $Y_c = 0,1$).

A partir das Figuras 4.30 – 4.32, constata-se que, para todos os perfis de temperatura, a modificação no valor da temperatura de corpo negro não exerce nenhuma influência na solução SLW. Isso ocorre porque no espectro fictício, construído de acordo com a aproximação de escala, os intervalos espectrais são mantidos fixos para qualquer valor fixo de T_b utilizado na Equação 4.11.

4.2.4 Comparação entre as soluções SLW (espectro fictício) e LBL (espectro real)

A obtenção do espectro fictício (Seção 4.2.2) pode ser interpretada como uma regularização do espectro real. O objetivo desta seção é comparar duas soluções. A primeira baseada no espectro fictício (SLW); a segunda, no espectro real (LBL). A Figura 4.33 mostra um resultado para a Equação 4.2 com $Y_c = 0,1$. Como pode ser observado na Figura 4.33, a diferença entre as soluções LBL e SLW é muito grande. Isso quer dizer que a regularização proposta para o espectro através das Equações 4.9 e 4.10 não está adequada. Teoricamente, se o fator de escala for adequado, é possível obter um espectro regularizado que obedeça à aproximação de escala e, ao mesmo tempo, melhore os resultados do modelo SLW. O fator de escala f_e pode ser redefinido como a razão entre dois termos fontes radiativos: um baseado no espectro real Q_R ; o outro, no espectro regularizado Q_R^* . O valor de f_e , obtido na solução LBL através de um cálculo iterativo, é dado pela equação a seguir:

$$f_e(x) = \frac{Q_R(x)}{Q_R^*(x)} \quad (4.12)$$

onde a temperatura T está associada a cada posição espacial x do domínio.

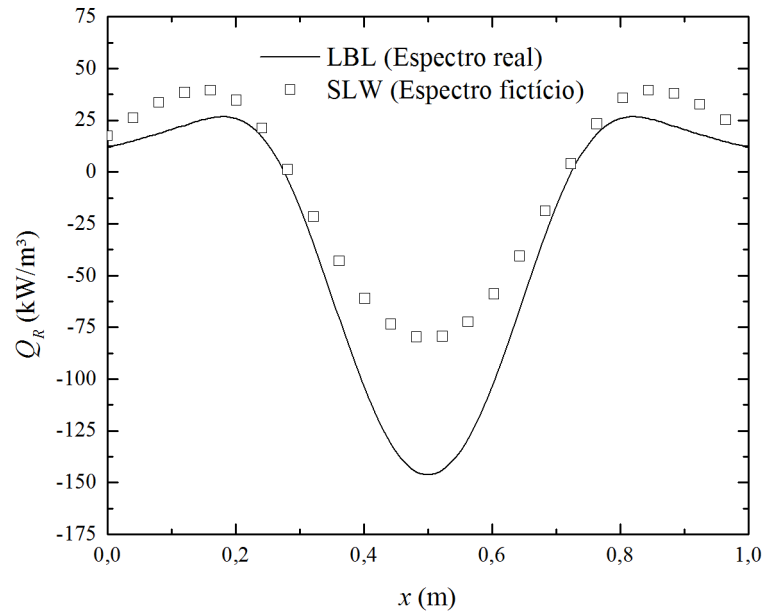


Figura 4.33 – Termo fonte radiativo para a Equação 4.2 ($Y_c = 0,1$).

A Equação 4.12 impõe que a solução LBL, baseada no espectro regularizado, deve fornecer o mesmo resultado para o termo fonte radiativo da solução obtida através do espectro real. A cada iteração, o coeficiente de absorção regularizado κ_η^* é calculado de acordo com a equação abaixo:

$$\kappa_\eta^*(x) = f_e(x) \kappa_\eta(T_{ref}) \quad (4.13)$$

Esse método mostrou-se muito condicionado ao perfil de temperatura e ao valor de T_{ref} . Dependendo do perfil de temperatura, a Equação 4.12 origina alguns problemas de convergência. Por exemplo, como observado na solução da Figura 4.33, o termo fonte radiativo na solução LBL pode ser nulo (nas regiões do domínio onde emissão e absorção são equivalentes), isso afeta Q_R^* , que é o denominador da Equação 4.12.

4.3 Estudo do modelo NCC-WSGG

Nas seções anteriores, foram exibidas algumas avaliações dos modelos WSGG, SLW e CW. Em geral, apesar de apresentar uma formulação bastante simples, o modelo WSGG proporcionou melhores resultados, principalmente para gradientes de temperatura elevados.

No estudo do modelo SLW, foram identificadas as suas principais fontes de erro: a forte dependência em relação à condição de referência e a hipótese da aproximação de escala. Foi provado também que, se um espectro é construído artificialmente de acordo com a aproximação de escala, os resultados do modelo ficam muito bons e independem da condição de referência. O principal objetivo deste trabalho era propor uma correção para o modelo SLW. Entretanto, depois de várias tentativas, verificou-se que as abordagens adotadas para corrigir o modelo funcionariam, no máximo, para casos muito específicos. Foi nesse ponto que surgiram algumas propostas para o desenvolvimento de um novo modelo espectral, baseado em alguns conceitos dos modelos WSGG e SLW. O novo modelo será denominado soma-ponderada-de-gases-cinza com coeficientes não constantes (NCC-WSGG). Os motivos para adoção dessa nomenclatura ficaram mais claros a seguir.

4.3.1 Obtenção de correlações para CO₂ e H₂O

Para obtenção das correlações, deve-se definir uma temperatura de referência. Como no caso do modelo SLW, espera-se que os resultados sejam dependentes da escolha dessa condição. A avaliação da influência da temperatura de referência será verificada através de alguns problemas unidimensionais, onde a temperatura entre duas placas negras é mantida entre 400 K e 1800 K. Porém, as correlações serão obtidas através de dados espectrais para temperatura variando de 300 K até 2500 K, com passo de 100 K nas temperaturas local e de absorção (T e T_a). Serão considerados gases cinza espaçados logaritmicamente entre $10^{-24} \leq C_\eta \leq 10^{-18}$ cm²/molécula para CO₂ e H₂O. As pressões parciais consideradas na geração do espectro para CO₂ e H₂O são, respectivamente, $p_c = 0,1$ atm e $p_w = 0,2$ atm.

Antes de apresentar as correlações propriamente ditas, será realizada a avaliação dos seguintes parâmetros do modelo: o número de gases cinza e a temperatura de referência. Nesta etapa, considera-se que o espaço entre duas placas planas negras ($L = 1$ m) está sujeito a um perfil não homogêneo e não isotérmico. A temperatura de absorção será assumida igual à temperatura local.

$$T(x) = 400 + 1400\text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.14)$$

$$Y(x) = 0,2\text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.15)$$

Na avaliação do número de gases cinza n_g , a temperatura de referência foi mantida fixada ($T_{ref} = 1000$ K, valor escolhido arbitrariamente). A Tabela 4.7 mostra que, para CO_2 e H_2O , os erros no fluxo, δ , e no termo fonte radiativo, ζ , não se alteram significativamente para um número de gases cinza maior que 10. Assim, será empregado $n_g = 10$ para as duas espécies químicas analisadas. Os erros para dióxido de carbono estão muito elevados porque a temperatura de referência ainda não está adequada.

Tabela 4.7 – Avaliação do número de gases cinza $T_{ref} = 1000$ K, $T_a = T(x)$.

n_g	NCC-WSGG (CO_2)				NCC-WSGG (H_2O)			
	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
4	28,9	24,1	37,4	8,3	11,4	8,9	9,5	3,5
6	32,2	24,5	42,6	10,9	8,3	6,5	7,6	2,5
8	28,2	23,4	37,0	8,3	6,7	5,3	6,5	2,1
10	27,0	22,3	36,4	8,1	6,0	4,8	6,0	1,8
12	26,7	22,4	35,4	7,7	5,4	4,4	5,5	1,7
14	26,0	21,9	34,7	7,5	5,4	4,3	5,4	1,7

A Tabela 4.8 mostra que, para temperatura variando entre 400 K e 1800 K, mantendo-se o número de gases cinza fixo ($n_g = 10$), $T_{ref} = 1400$ K fornece o menor erro máximo no cálculo do fluxo de calor δ_{max} tanto para CO_2 quanto para H_2O . No caso do termo fonte radiativo, a temperatura de referência mais adequada também fica na vizinhança de $T_{ref} = 1400$ K. Assim, assume-se $T_{ref} = 1400$ K para CO_2 e H_2O . Através da Tabela 4.8, verifica-se que os resultados do modelo NCC-WSGG são fortemente dependentes da escolha da temperatura de referência.

O Apêndice B mostra os coeficientes das correlações para CO_2 . A Tabela B.1 apresenta os coeficientes de emissão de cada gás cinza para CO_2 na condição de referência. As Tabelas B.2, B.3 e B.4 apresentam, respectivamente, os coeficientes para a fração de energia de corpo negro, coeficiente de emissão e para o coeficiente de absorção de CO_2 .

Tabela 4.8 – Avaliação da temperatura de referência, $T_a = T(x)$, $n_g = 10$.

$T_{ref}(K)$	NCC-WSGG – CO ₂				NCC-WSGG – H ₂ O			
	$\delta_{max} (%)$	$\delta_{med} (%)$	$\zeta_{max} (%)$	$\zeta_{med} (%)$	$\delta_{max} (%)$	$\delta_{med} (%)$	$\zeta_{max} (%)$	$\zeta_{med} (%)$
400	87,9	69,7	106,7	27,3	28,7	22,4	26,7	9,0
600	73,6	59,6	90,1	22,1	19,1	15,2	18,7	5,8
800	50,1	41,3	63,8	14,7	11,5	9,2	11,8	3,5
1000	27,0	22,3	36,4	8,1	6,0	4,8	6,0	1,8
1200	11,7	9,2	16,9	4,1	3,0	2,2	2,2	0,9
1300	6,5	4,5	9,8	2,8	2,2	1,3	2,2	0,6
1400	3,2	1,9	4,7	2,2	1,6	1,0	2,6	0,9
1500	5,0	1,5	4,5	2,0	1,7	0,9	3,1	1,2
1600	7,2	3,0	5,1	2,7	2,9	1,1	5,3	1,8
1800	10,4	5,2	6,3	3,8	5,3	2,0	9,7	2,9

No Apêndice C, estão disponibilizados os coeficientes das correlações para H₂O. A Tabela C.1 mostra os coeficientes de emissão para cada gás cinza de H₂O na condição de referência. As Tabelas C.2, C.3 e C.4 apresentam, respectivamente, os coeficientes para a fração de energia de corpo negro, coeficiente de emissão e para o coeficiente de absorção de H₂O.

4.3.2 Solução de problemas unidimensionais para CO₂ e H₂O

Como os parâmetros n_g e T_{ref} já foram definidos e as correlações, apresentadas, o modelo NCC-WSGG será testado em alguns problemas unidimensionais não isotérmicos e não homogêneos. Será considerado, inicialmente, que o domínio está preenchido com CO₂. Em seguida, o mesmo problema será resolvido para H₂O. Os resultados serão comparados com o modelo WSGG (correlações propostas por Cassol *et al.*, 2014 – Tabelas 3.2 e 3.3, Seção 3.2) e com a solução LBL. Os casos estudados, com os respectivos perfis de temperatura e de concentração, são apresentados a seguir.

No Caso 1, os perfis de temperatura e de concentração são simétricos (Figura 4.34). A temperatura varia de 400 K, nas paredes, até 1800 K, no centro do domínio. A concentração vai de zero até 0,2.

$$T(x) = 400 + 1400\text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.16)$$

$$Y(x) = 0,2\text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.17)$$

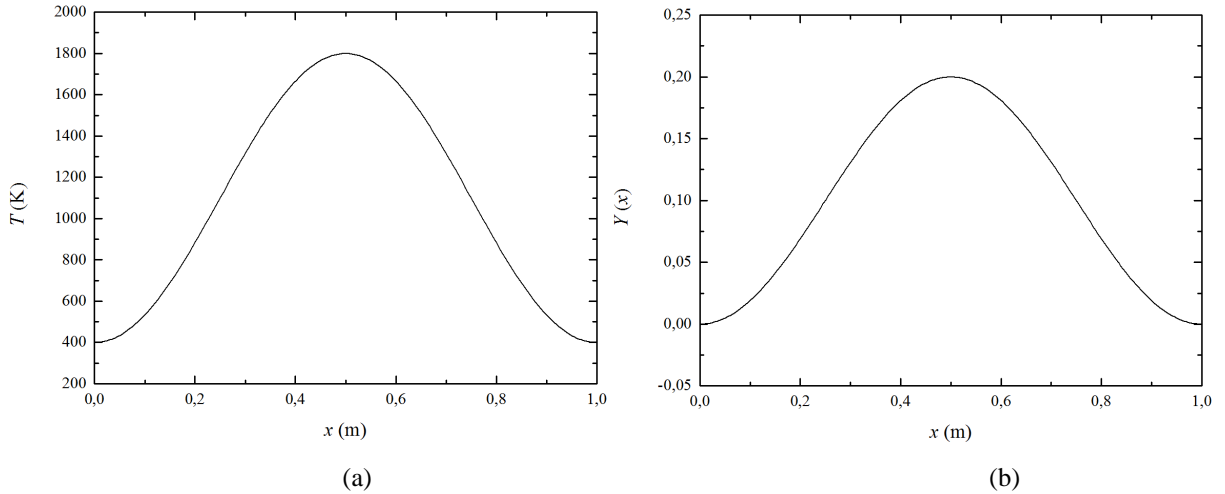


Figura 4.34 – Caso 1. (a) Perfil de temperatura, (b) Perfil de concentração.

O Caso 2 também é descrito por perfis simétricos (Figura 4.35). Nesse caso, os valores máximos de temperatura ($T = 1800$ K) e de concentração ($Y = 0,2$) ocorrem nos pontos $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m.

$$T(x) = 400 + 1400\text{sen}^2(2\pi x / L) \quad (4.18)$$

$$Y(x) = 0,2\text{sen}^2(2\pi x / L) \quad (4.19)$$

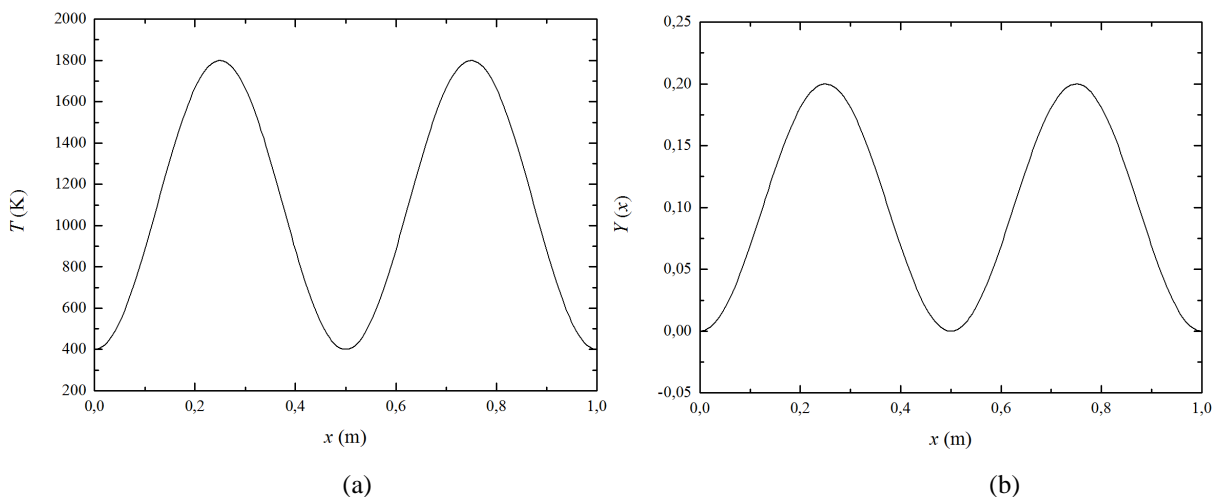


Figura 4.35 – Caso 2. (a) Perfil de temperatura, (b) Perfil de concentração.

No Caso 3, os perfis não são simétricos (Figura 4.36) e as paredes estão com temperaturas diferentes ($T(0) = 880$ K e $T(L) = 400$ K). Os picos de temperatura ($T = 1800$ K) e de concentração ($Y = 0,25$) ocorrem em $x = 0,25$ m.

$$T(x) = \begin{cases} 880 + 920 \text{sen}^2(2\pi x/L) & \text{se } x/L \leq 0,25 \\ 400 + 1400 \left\{ 1 - \text{sen}^3 \left[\frac{2}{3} \pi(x/L - 0,25) \right] \right\} & \text{se } x/L > 0,25 \end{cases} \quad (4.20)$$

$$Y(x) = \begin{cases} 0,25 \text{sen}^2(2\pi x/L) & \text{se } x/L \leq 0,25 \\ 0,25 \left\{ 1 - \text{sen} \left[\frac{2}{3} \pi(x/L - 0,25) \right] \right\} & \text{se } x/L > 0,25 \end{cases} \quad (4.21)$$

Em todos os casos, as paredes do domínio são negras e estão posicionadas em $x = 0$ e em $x = L$. Além disso, os valores médios de temperatura e de concentração são, respectivamente, $T_{med} = 1100$ K e $Y_{med} = 0,1$. A pressão total é de 1 atm.

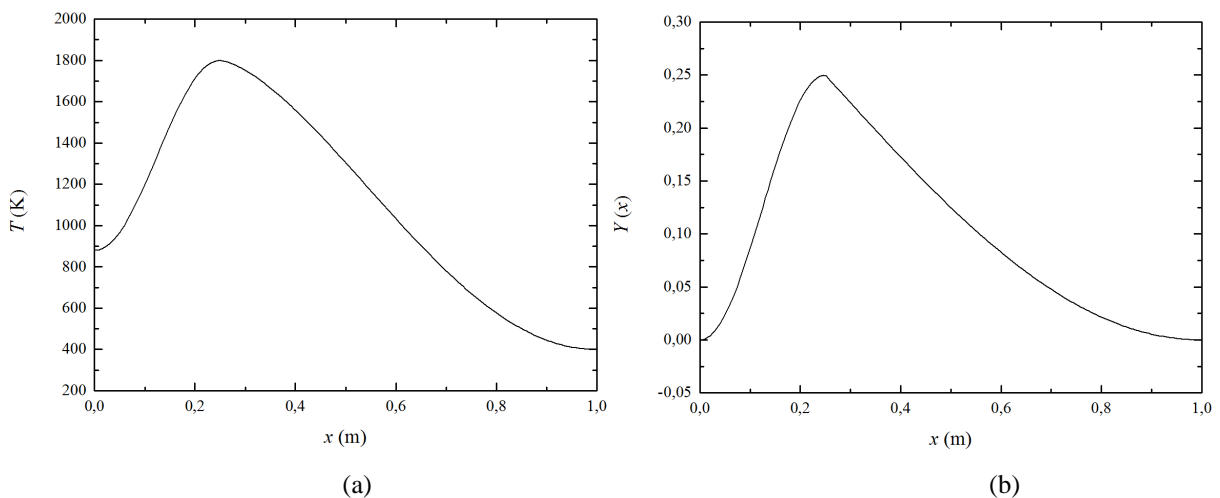


Figura 4.36 – Caso 3. (a) Perfil de temperatura, (b) Perfil de concentração.

As Figuras 4.37 e 4.38 mostram o fluxo de calor e o termo fonte radiativo, respectivamente, para o Caso 1. Neste caso, o perfil de temperatura (Equação 4.16) e o de concentração (Equação 4.17) são simétricos, como mostra a Figura 4.34. A temperatura varia de 400 K nas paredes até 1800 K na metade do domínio. A fração molar varia de 0 a 0,2 (ou p_c de 0 atm até 0,2 atm). Devido à simetria nos perfis, o fluxo de calor é zero em $x = 0,5$ m (Figura 4.37). Uma vez que o fluxo de calor é dirigido da região de alta temperatura para as paredes, q_R'' é positivo para $x > 0,5$ m (na mesma direção de x) e negativo para $x < 0,5$ m (na direção oposta de x). Por outro lado, o valor absoluto do termo fonte radiativo na Figura 4.38

alcança um pico em $x = 0,5$ m, onde a temperatura e a concentração atingem os valores máximos. De acordo com a Tabela 4.9, no modelo NCC-WSGG, o erro máximo no cálculo do fluxo de calor é $\delta_{max} = 3,2$ %, valor muito menor que no modelo WSGG ($\delta_{max} = 7,2$ %). O mesmo comportamento foi observado para o termo fonte radiativo. Na região de baixa temperatura, onde predomina a absorção ($Q_R > 0$), os modelos apresentam resultados similares. Próximo às paredes, onde a temperatura e a concentração são muito baixas, a concordância entre os modelos e a solução LBL é excelente. O erro máximo no cálculo de Q_R , ζ_{max} , através dos modelos ocorre na região central do domínio, onde a temperatura atinge o valor máximo ($T = 1800$ K) e predomina a emissão ($Q_R < 0$). Novamente, o NCC-WSGG fornece o menor erro ($\zeta_{max} = 4,7$ %).

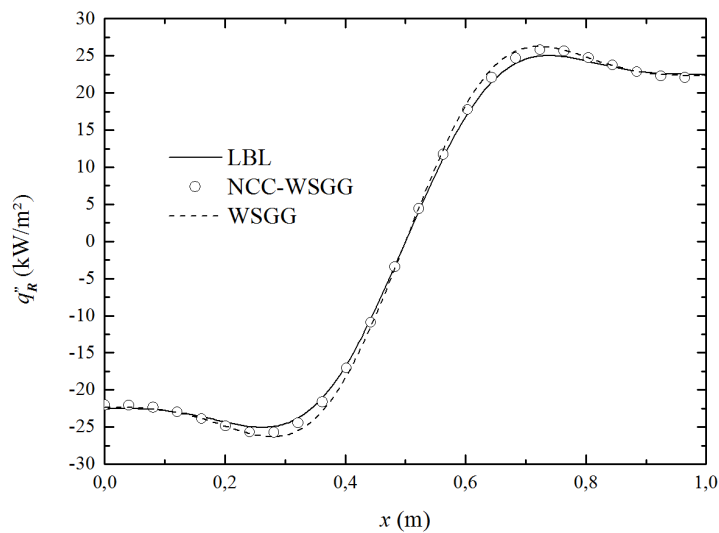


Figura 4.37 – Fluxo de calor (Caso 1 com CO₂).

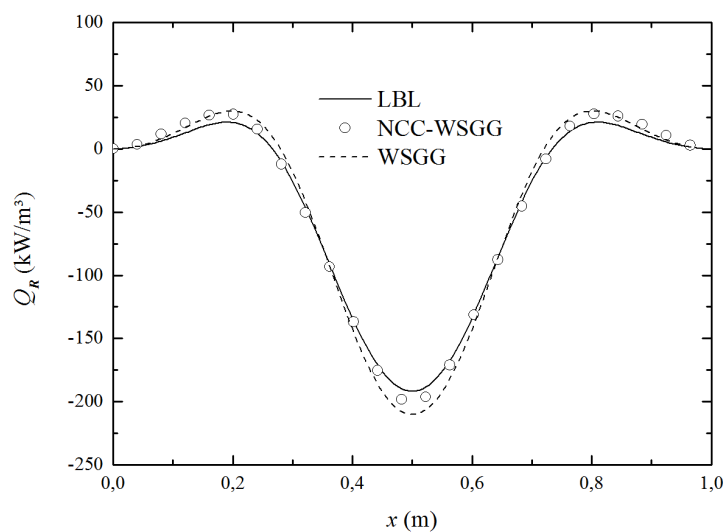


Figura 4.38 – Termo fonte radiativo (Caso 1 com CO₂).

No Caso 2, os perfis de temperatura e de concentração são dados pelas Equações 4.18 e 4.19. Como pode ser visto na Figura 4.35, os dois perfis são simétricos, com dois pontos de máximo: $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m. Os valores máximos na temperatura e na concentração são iguais aos do caso anterior, mas os gradientes são aumentados por um fator de dois, uma vez que as mesmas variações ocorrem na metade da distância. Devido à dupla simetria nos perfis, o fluxo de calor é nulo nos pontos onde a temperatura é máxima ($x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m), como mostra a Figura 4.39. No cálculo do fluxo de calor, o modelo WSGG foi ligeiramente superior ao NCC-WSGG, como pode ser verificado na Tabela 4.9. O termo fonte radiativo (Figura 4.40) também é simétrico, alcançando valores máximos absolutos em $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m, o que já era esperado, pois a temperatura e a concentração atingem valores máximos nesses pontos. No cálculo do termo fonte radiativo, os dois modelos tem desempenho semelhante, mantendo o erro máximo próximo de 10 %. Nesse caso, o modelo NCC-WSGG obteve melhor concordância com a solução LBL na região de alta temperatura, que ocorre na vizinhança dos pontos $x = 0,25$ m e $x = 0,75$ m.

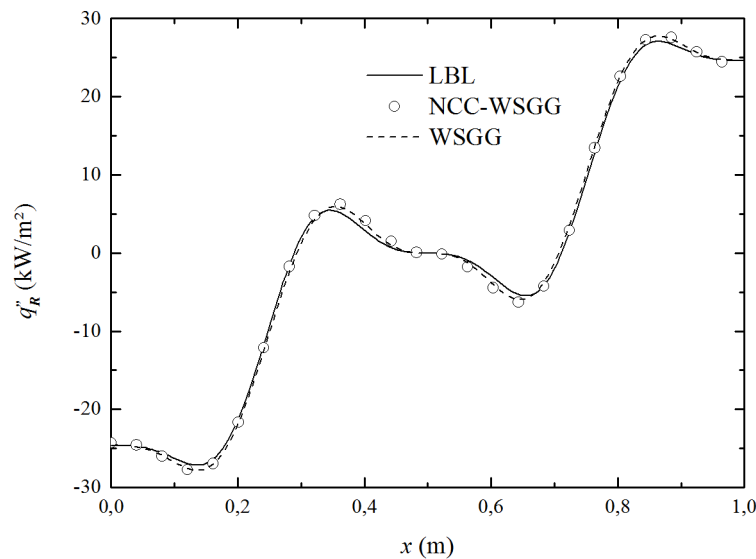


Figura 4.39 – Fluxo de calor (Caso 2 com CO₂)

No Caso 3, a temperatura e a concentração são representadas pelas Equações 4.20 e 4.21. Ao contrário dos outros estudos mostrados anteriormente, os perfis de temperatura e de concentração não são simétricos, ambos alcançam seus picos em $x = 0,25$ m. O valor máximo da temperatura ainda é 1800 K, mas as paredes estão com temperaturas diferentes: em $x = 0$, $T = 880$ K, e em $x = 1$ m, $T = 400$ K. O valor máximo da concentração é $Y = 0,25$, acima dos casos anteriores. Entretanto, o valor médio permanece o mesmo $Y_{med} = 0,1$. Como verificado

na Figura 4.41, o fluxo de calor varia pouco a partir de $x = 0,85$ m, o que é provocado, principalmente, pela baixa concentração nesta região. A Figura 4.42 mostra o valor máximo do termo fonte radiativo corresponde ao ponto onde a temperatura e a concentração são máximas ($x = 0,25$ m). Para $x > 0,85$ m, Q_R é próximo de zero devido à baixa concentração de CO_2 . Como pode ser verificado na Tabela 4.9, o modelo NCC-WSGG fornece erros máximos $\delta_{max} = 1,8 \%$ e $\zeta_{max} = 4,1 \%$ no fluxo e no termo fonte radiativo, respectivamente. Novamente, os erros máximos em Q_R estão associados ao ponto onde a temperatura é máxima ($x = 0,25$ m).

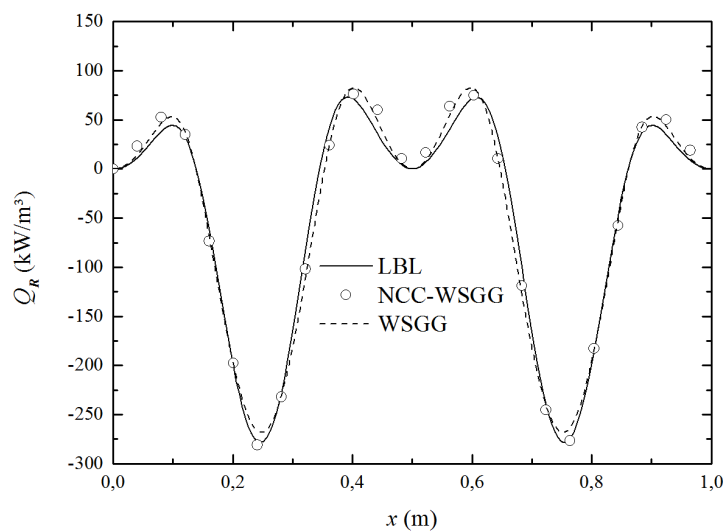


Figura 4.40 – Termo fonte radiativo (Caso 2 com CO_2).

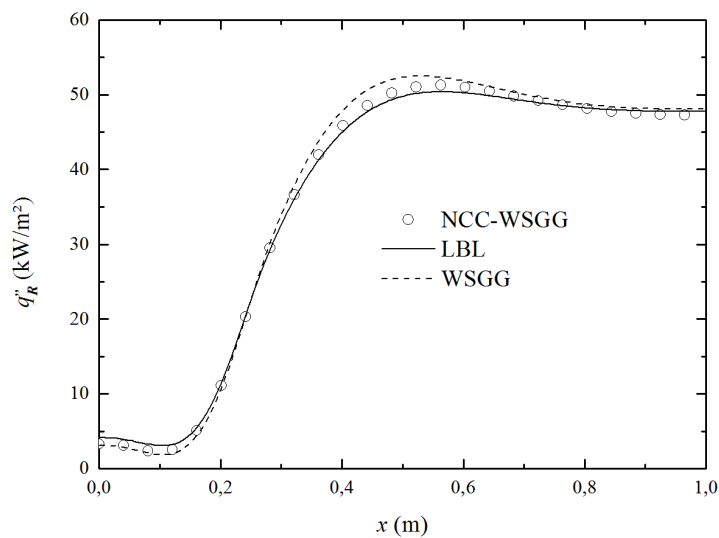


Figura 4.41 – Fluxo de calor (Caso 3 com CO_2).

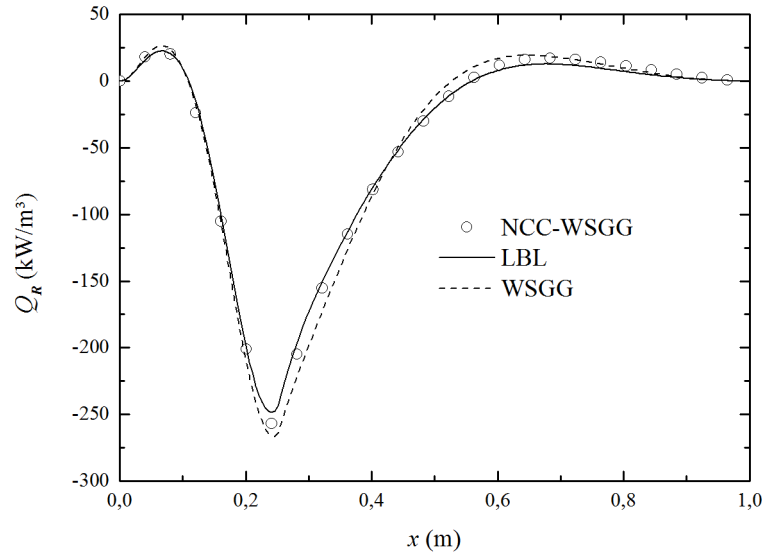


Figura 4.42 – Termo fonte radiativo (Caso 3 com CO₂).

A Tabela 4.9 mostra os erros máximos e médios das soluções WSGG e NCC-WSGG para CO₂ em relação ao método LBL. A solução NCC-WSGG, na maioria dos casos, forneceu resultados melhores que o modelo WSGG.

Tabela 4.9 – Desvio percentual entre as soluções WSGG, NCC-WSGG e LBL para CO₂.

Caso	WSGG				NCC-WSGG			
	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
1	7,2	3,2	9,9	3,8	3,2	1,9	4,7	2,2
2	3,7	1,8	11,1	3,2	5,1	2,0	9,5	3,7
3	5,9	2,5	10,7	2,8	1,8	1,1	4,1	1,3

As Figuras 4.43 até 4.48, mostram os resultados para Casos 1, 2 e 3 quando CO₂ é substituído por H₂O. Em geral, o comportamento da solução para H₂O é idêntico ao da solução para CO₂. Entretanto, como pode ser verificado na Tabela 4.10, a solução NCC-WSGG para H₂O fornece resultados muito melhores que o modelo WSGG. Quando se calcula o fluxo de calor através do modelo NCC-WSGG para H₂O, os erros máximos são inferiores a 2,0 %. As Figuras 4.44, 4.46 e 4.48 mostram que, no cálculo do termo fonte radiativo, os desvios em relação à solução LBL são baixos mesmo nas regiões onde a temperatura e a concentração são elevadas. De acordo com a Tabela 4.10, os erros máximos em Q_R são inferiores a 4 %.

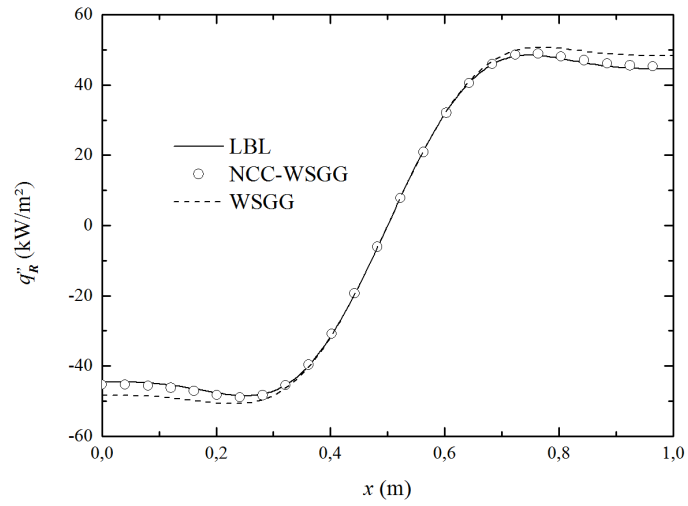


Figura 4.43 – Fluxo de calor para H₂O (Caso 1).

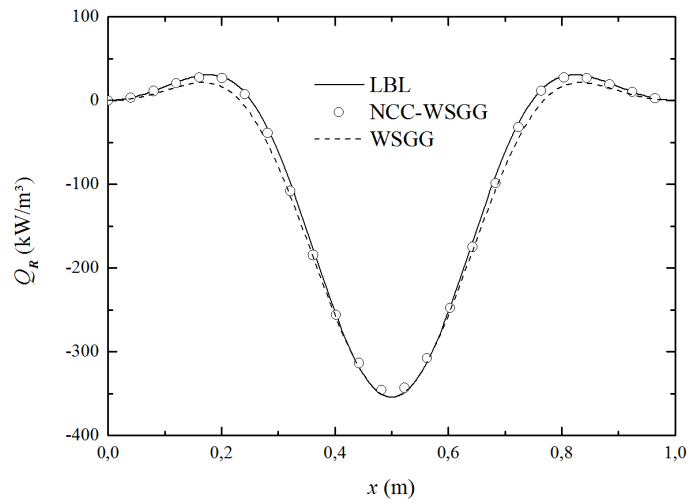


Figura 4.44 – Termo fonte radiativo para H₂O (Caso 1).

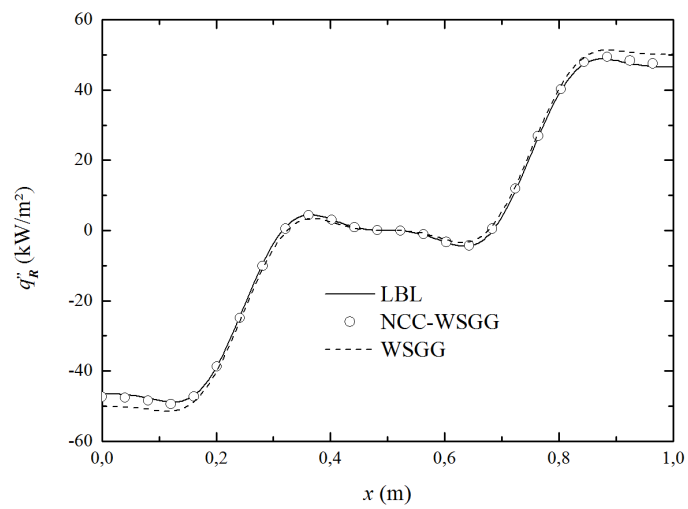


Figura 4.45 – Fluxo de calor para H₂O (Caso 2).

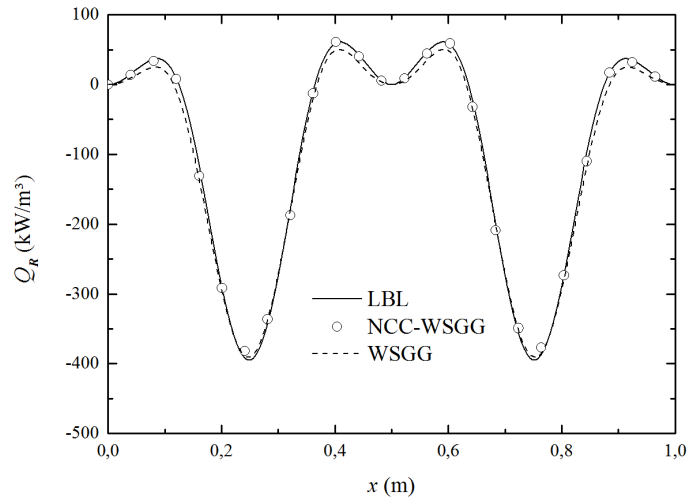


Figura 4.46 – Termo fonte radiativo para H₂O (Caso 2).

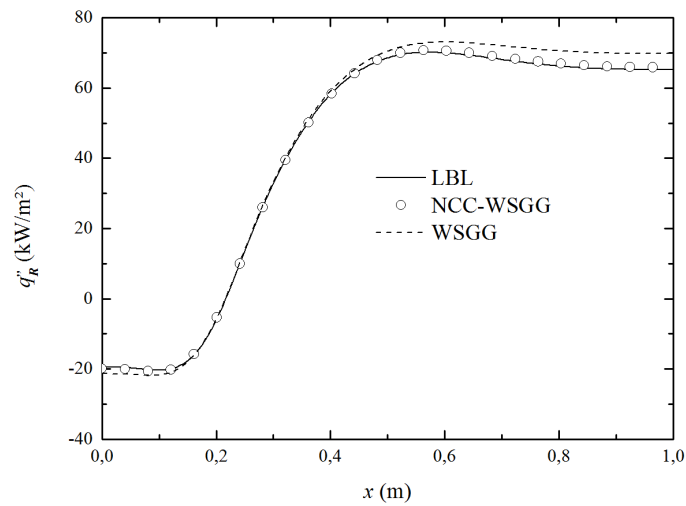


Figura 4.47 – Fluxo de calor para H₂O (Caso 3).

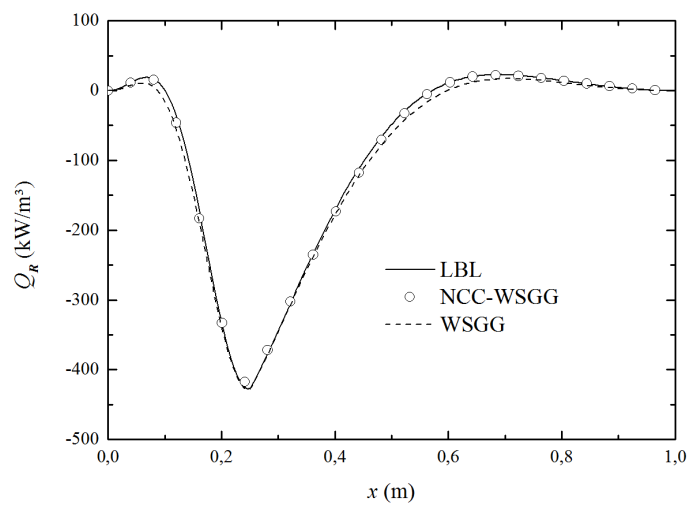
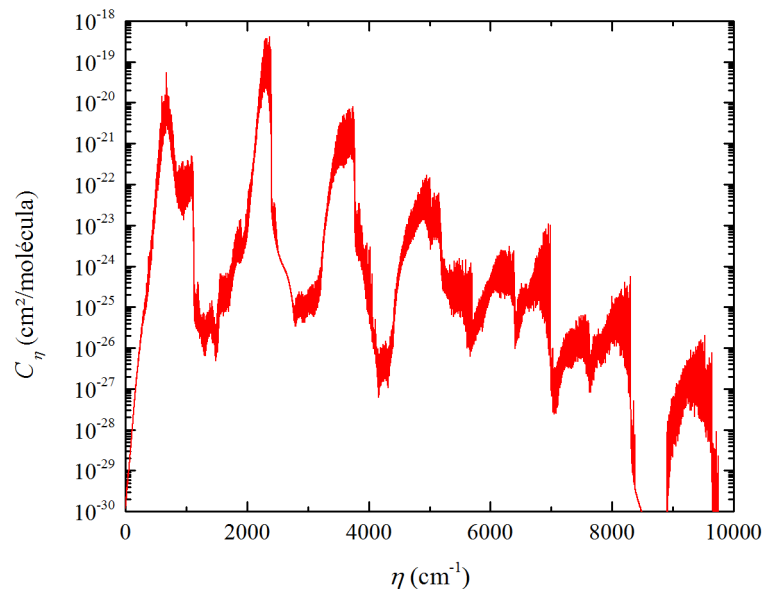


Figura 4.48 – Termo fonte radiativo para H₂O (Caso 3).

Tabela 4.10 – Desvio percentual entre as soluções WSGG, NCC-WSGG e LBL para H₂O.

Caso	WSGG				NCC-WSGG			
	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
1	9,9	5,8	5,7	2,7	1,6	1,0	2,6	0,9
2	9,4	4,4	5,8	2,3	1,8	0,9	3,8	1,2
3	7,4	4,3	5,3	1,9	1,0	0,6	2,9	0,6

Como apresentado nesta Seção, os modelos WSGG e NCC-WSGG fornecem resultados melhores quando são aplicados para resolver problemas com H₂O do que com CO₂. A explicação para isso pode ser encontrada analisando-se o espectro dessas espécies químicas. Se um espectro de dióxido de carbono (Figura 4.49) for comparado com um de vapor de água (Figura 4.50) observa-se que essas duas moléculas apresentam comportamento espectral bastante distinto. Pode-se destacar que o número de linhas espectrais para vapor de água é muito maior do que para dióxido de carbono (como mostrado na Seção 2.3, Tabela 2.1). Além disso, para vapor de água, os valores da seção transversal de absorção C_η concentram-se entre 10^{-25} e 10^{-18} cm²/molécula. Enquanto que para dióxido de carbono, existem muitos valores de C_η menores que 10^{-25} cm²/molécula. Essas diferenças entre os espectros podem explicar por que a temperatura de referência exerce mais influência para CO₂ do que para H₂O, como verificado na Tabela 4.7.

Figura 4.49 – Espectro para CO₂ ($p_c = 0,1$ atm, $T = 1400$ K).

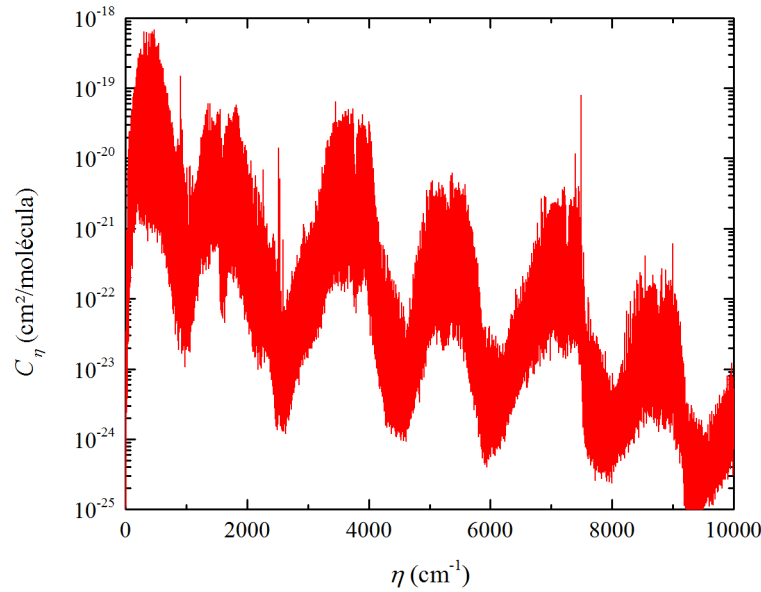


Figura 4.50 – Espectro para H₂O ($p_w = 0,2$ atm, $T = 1400$ K).

4.3.3 Influência da T_{med} e de ΔT na temperatura de referência T_{ref}

Na seção anterior, foi verificado que a solução do modelo NCC-WSGG depende fortemente do valor adotado para a temperatura de referência. Além disso, constatou-se que $T_{ref} = 1400$ K pode ser adotado quando a temperatura no domínio está entre 400 K e 1800 K. Resta saber se quando a temperatura média, T_{med} , e a diferença entre as temperaturas máxima e mínima no domínio, ΔT , forem diferentes dos casos anteriores, T_{ref} se manterá inalterado. Considera-se, novamente, um problema unidimensional, onde a temperatura e a concentração de H₂O são dadas pelos perfis a seguir:

$$T(x) = T_w + \Delta T \text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.22)$$

$$Y(x) = 0,2 \text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.23)$$

onde T_w é a temperatura das paredes. A temperatura média no domínio é $T_{med} = T_w + \Delta T / 2$.

A Tabela 4.11 mostra o efeito da variação da temperatura média sobre os erros máximos e médios no termo fonte radiativo quando ΔT é mantido constante. Na Tabela 4.12, ΔT é variado enquanto a temperatura média é mantida constante. Em ambos os casos, observa-se que, em geral, $T_{ref} = 1400$ K fornece os menores erros no termo fonte radiativo, independentemente do valor da temperatura média e da diferença de temperaturas ΔT .

Tabela 4.11 – Influência da temperatura média na temperatura de referência (erros no termo fonte radiativo para H_2O , $n_g = 10$, $\Delta T = 1400$ K).

	$T_w = 400$ K		$T_w = 500$ K		$T_w = 600$ K	
	$T_{med} = 1100$ K		$T_{med} = 1200$ K		$T_{med} = 1300$ K	
T_{ref} (K)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
1000	6,0	4,8	9,2	2,8	11,5	3,1
1200	3,0	2,2	5,0	1,6	7,4	1,9
1300	2,2	1,3	3,2	1,2	5,6	1,5
1400	1,6	1,0	3,4	1,0	3,9	1,1
1500	1,7	0,9	3,8	1,1	3,3	1,0
1600	2,9	1,1	4,5	1,7	3,9	1,3
1800	5,3	2,0	8,2	3,0	7,1	2,6

Tabela 4.12 – Influência de ΔT na temperatura de referência (erros no termo fonte radiativo para H_2O , $n_g = 10$, $T_{med} = 1200$ K).

	$T_w = 400$ K		$T_w = 500$ K		$T_w = 600$ K	
	$\Delta T = 1600$ K		$\Delta T = 1400$ K		$\Delta T = 1200$ K	
T_{ref} (K)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
1000	10,6	2,8	9,2	2,8	8,7	2,8
1200	6,7	1,6	5,0	1,6	4,3	1,7
1300	5,0	1,2	3,2	1,2	3,4	1,3
1400	3,4	1,0	3,4	1,0	3,5	1,1
1500	3,5	1,0	3,8	1,1	3,9	1,1
1600	4,1	1,4	4,5	1,7	4,7	1,6
1800	7,4	2,7	8,2	3,0	8,0	2,7

4.3.4 Obtenção de correlações para mistura de CO_2 e H_2O

Nesta seção, as correlações foram obtidas para mistura de vapor de água e dióxido de carbono com razão $p_w/p_c = 2$. Os procedimentos são os mesmos empregados no caso de correlações para espécies químicas individuais (CO_2 e H_2O). O caso teste baseia-se em um problema unidimensional não isotérmico e não homogêneo, onde o domínio é preenchido por

uma mistura de dióxido de carbono e vapor de água. A razão p_w/p_c ou Y_w/Y_c (pressão total de 1 atm) é mantida constante e igual a 2.

$$T(x) = 400 + 1400\text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.24)$$

$$Y_c(x) = 0,2\text{sen}^2(\pi x / L) \quad Y_w(x) = 2Y_c(x) \quad (4.25)$$

Inicialmente, será avaliado o número de gases cinza n_g . A Tabela 4.13 mostra o efeito da alteração desse parâmetro quando a temperatura de referência é $T_{ref} = 1000$ K. Como nas avaliações para espécies químicas individuais, se for utilizado $n_g > 10$ para a mistura, não haverá redução significativa nos erros no fluxo de calor, δ , e no termo fonte radiativo, ζ .

Tabela 4.13 – Avaliação do número de gases cinza ($T_{ref} = 1000$ K, $T_a = T(x)$)

NCC-WSGG ($p_w/p_c = 2$)				
n_g	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
4	22,5	17,4	27,5	7,4
6	16,3	12,8	21,1	5,2
8	14,7	11,6	19,4	4,7
10	13,9	11,1	18,5	4,3
12	13,5	10,8	18,1	4,2
14	13,2	10,7	17,8	4,0

O número de gases cinza já está definido para a mistura de dióxido de carbono e vapor de água ($n_g = 10$). Entretanto, ainda é necessário determinar a temperatura de referência. A Tabela 4.14 demonstra que, assim como nas avaliações para uma única espécie química, $T_{ref} = 1400$ K é o valor que reduz os erros no fluxo e no termo fonte radiativo.

As correlações para mistura de CO_2 e H_2O estão no Apêndice D. A Tabela D.1 apresenta os coeficientes de emissão da mistura de CO_2 e H_2O na condição de referência. As Tabelas D.2, D.3 e D.4 mostram os coeficientes para o cálculo da energia de corpo negro, do coeficiente de emissão e do coeficiente de absorção, respectivamente.

Tabela 4.14 – Avaliação da temperatura de referência ($n_g = 10$, $T_a = T(x)$).

$T_{ref}(K)$	NCC-WSGG ($p_w/p_c = 2$)			
	$\delta_{max} (%)$	$\delta_{med} (%)$	$\zeta_{max} (%)$	$\zeta_{med} (%)$
400	61,0	47,2	72,0	19,3
600	43,1	34,6	52,5	12,9
800	26,0	21,1	33,2	7,7
1000	13,9	11,1	18,5	4,3
1200	5,7	4,3	7,9	2,0
1300	2,8	1,8	3,7	1,3
1400	1,7	0,6	1,9	1,0
1500	3,7	2,4	4,0	1,7
1600	4,9	3,4	6,1	2,2
1800	8,9	6,7	13,7	3,9

4.3.5 Solução de problemas unidimensionais para mistura de CO₂ e H₂O

A seguir, são apresentados alguns resultados para problemas unidimensionais. O espaço entre duas paredes negras separadas por uma distância $L = 1$ m é preenchido com uma mistura não isotérmica e não homogênea de CO₂ e H₂O. Em todos os casos, a razão p_w/p_c ou Y_w/Y_c é igual a 2 (pressão total de 1 atm). A integração espectral é realizada através dos modelos WSGG (correlações propostas por Dorigon *et al.*, 2013) e NCC-WSGG. Os resultados são comparados com a solução LBL. Os perfis para a temperatura e para a concentração no domínio são dados por:

Caso 4

$$T(x) = 400 + 1400\text{sen}^2(\pi x / L) \quad (4.26)$$

$$Y_c(x) = 0,2\text{sen}^2(\pi x / L) \quad Y_w(x) = 2Y_c(x) \quad (4.27)$$

Caso 5

$$T(x) = 400 + 1400\text{sen}^2(2\pi x / L) \quad (4.28)$$

$$Y_c(x) = 0,2 \text{sen}^2(2\pi x/L) \quad Y_w(x) = 2Y_c(x) \quad (4.29)$$

Caso 6

$$T(x) = \begin{cases} 880 + 920 \text{sen}^2(2\pi x/L) & \text{se } x/L \leq 0,25 \\ 400 + 1400 \left\{ 1 - \text{sen}^{3/2} \left[\frac{2}{3} \pi(x/L - 0,25) \right] \right\} & \text{se } x/L > 0,25 \end{cases} \quad (4.30)$$

$$Y_c(x) = \begin{cases} 0,25 \text{sen}^2(2\pi x/L) & \text{se } x/L \leq 0,25 \\ 0,25 \left\{ 1 - \text{sen} \left[\frac{2}{3} \pi(x/L - 0,25) \right] \right\} & \text{se } x/L > 0,25 \end{cases} \quad Y_w(x) = 2Y_c(x) \quad (4.31)$$

As Figuras 4.51 e 4.52 mostram o fluxo de calor e o termo fonte radiativo para o caso 4, respectivamente. Em ambos os modelos, os erros máximos são inferiores a 2 %, como pode ser verificado na Tabela 4.15. Se esses resultados forem comparados com aqueles apresentados para espécies químicas individuais, verifica-se que os erros são muito semelhantes àqueles obtidos para H₂O. Prevalece o comportamento observado para H₂O porque o coeficiente de absorção para vapor de água é maior do que o de dióxido de carbono. Além disso, a concentração de vapor de água no domínio é maior.

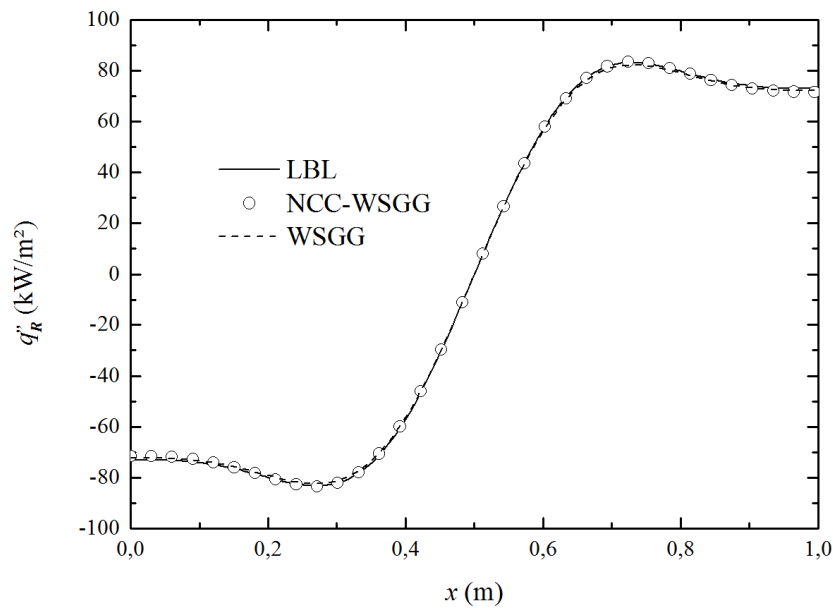


Figura 4.51 – Fluxo de calor ($p_w/p_c = 2$, caso 4).

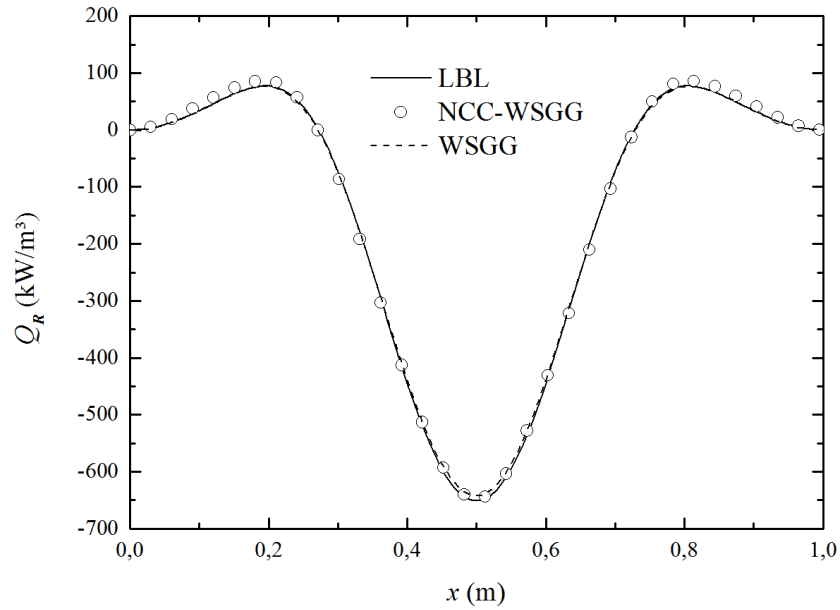


Figura 4.52 – Termo fonte radiativo ($p_w/p_c = 2$, caso 4).

Os resultados para o caso 5 estão apresentados nas Figuras 4.53 e 4.54. No cálculo do fluxo de calor, os dois modelos tem desempenho semelhante. Já no termo fonte radiativo, o modelo WSGG apresenta erro máximo 4 % inferior ao exibido pelo NCC-WSGG. Mesmo assim, o resultado para mistura é melhor do que aquele obtido somente para CO_2 .

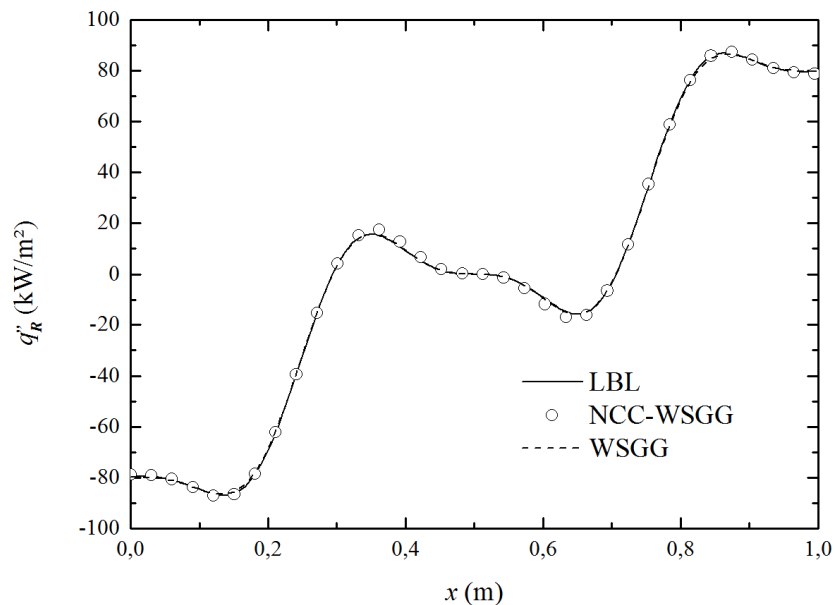


Figura 4.53 – Fluxo de calor ($p_w/p_c = 2$, caso 5).

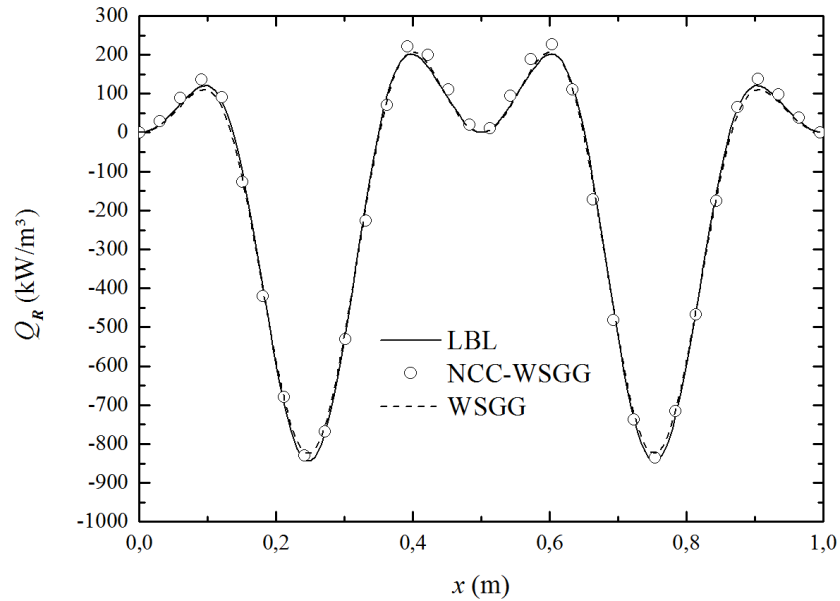


Figura 4.54 – Termo fonte radiativo ($p_w/p_c = 2$, caso 5).

As Figuras 4.55 e 4.56 mostram os resultados para o caso 6. Como pode ser observado na Tabela 4.15, os erros máximos são da ordem de 3 %, com uma ligeira vantagem do WSGG sobre o NCC-WSGG. Em todos os casos analisados para mistura de CO_2 e H_2O , os resultados são muito semelhantes àqueles observados para H_2O , porém os gradientes no fluxo de calor e no termo fonte radiativo são mais elevados porque a concentração das espécies químicas é maior.

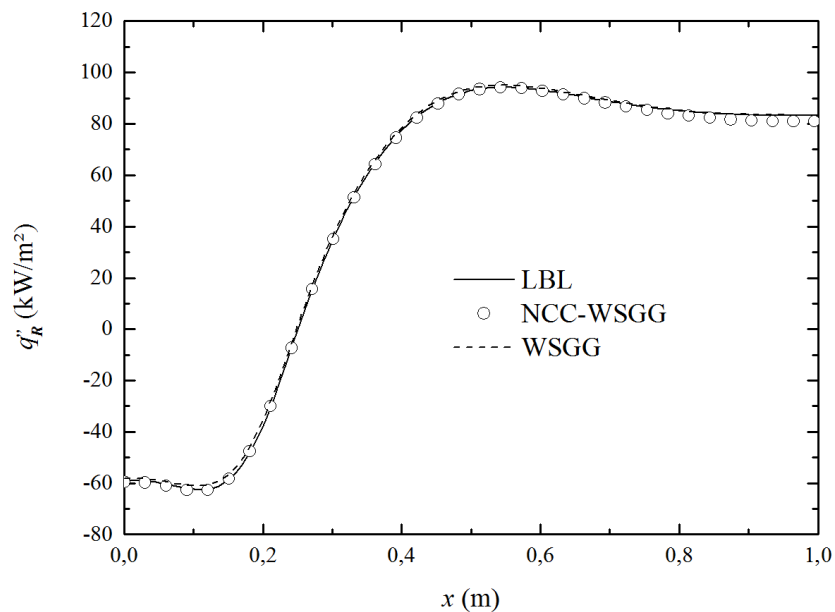


Figura 4.55 – Fluxo de calor ($p_w/p_c = 2$, caso 6).

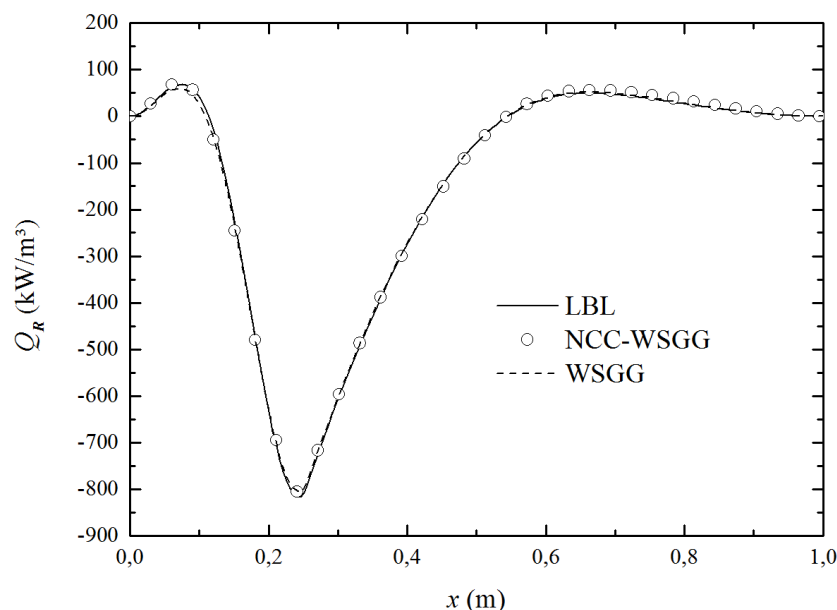


Figura 4.56 – Termo fonte radiativo ($p_w/p_c = 2$, caso 6).

Tabela 4.15 – Desvio percentual entre as soluções WSGG, NCC-WSGG e LBL para mistura de CO_2 e H_2O , com $p_w/p_c = 2$.

Caso	WSGG				NCC-WSGG			
	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
4	1,2	0,9	1,4	0,4	1,7	0,6	1,9	1,0
5	1,1	0,4	2,1	1,0	2,7	0,7	6,2	2,0
6	2,3	1,0	1,9	0,4	2,4	0,9	3,0	0,7

4.3.6 Aplicação do modelo NCC-WSGG em uma cavidade cilíndrica axissimétrica

No Brasil, a redução da oferta de energia hidráulica em períodos de estiagem impulsiona o uso de outras fontes de energia. A queima de gás natural, por exemplo, é uma alternativa para produção de energia elétrica. Em processos que envolvem temperaturas elevadas, como no caso da combustão, a radiação térmica torna-se o mecanismo de transferência de calor predominante. Estimativas inadequadas das taxas de transferência de calor radiativas podem afetar no aproveitamento da energia proveniente da combustão. Essas aplicações estão intrinsecamente associadas com a segurança e a eficiência energética da combustão e com redução da emissão de poluentes. Nesse contexto, a geometria cilíndrica é

muito importante para a engenharia, pois está presente em câmaras de combustão, tubos de caldeiras flamotubulares, etc.

Esta seção apresenta uma aplicação do modelo NCC-WSGG na integração espectral da RTE em coordenadas cilíndricas. Os resultados são comparados com os da solução LBL, o que é um grande avanço, pois a maioria dos trabalhos que utilizam modelos espectrais em problemas multidimensionais não apresenta comparações com a solução LBL. Aliás, a integração LBL para problemas multidimensionais representa uma grande contribuição deste trabalho.

Uma das maiores dificuldades para o desenvolvimento de uma rotina LBL multidimensional está relacionada ao tamanho das matrizes. Neste trabalho, para evitar *overflow* nas matrizes, dividiu-se o espectro em faixas estreitas, dentro das quais se executou a integração LBL da RTE. Em cada faixa do espectro resolvida, calculou-se o fluxo de calor e o termo fonte radiativo e armazenaram-se os resultados. Repetiu-se o processo até que todo o espectro fosse percorrido [$0 \leq \eta \leq 10.000 \text{ cm}^{-1}$].

Os perfis de temperatura e concentrações bidimensionais utilizados neste trabalho provêm da câmara de combustão analisada por Centeno *et al.*, 2014, onde se considerou uma câmara abastecida com gás natural através do bico injetor cilíndrico de um queimador situado na sua linha central, que fornece as quantidades necessárias de ar e gás natural. No estudo realizado por Centeno *et al.*, 2014, admitiu-se que a composição mássica do ar de entrada é de 23 % de O₂, 76 % de N₂ e 1 % de H₂O. Também, assumiu-se que o gás natural é composto por 90 % de CH₄ e 10 % de N₂. Utilizou-se um excesso de combustível de 5 %, resultando em uma vazão mássica de combustível de 0,01453 kg/s com temperatura de 313,15 K, e vazão mássica de ar de 0,1988 kg·s⁻¹ com temperatura de 323,15 K.

A câmara, que está representada na Figura 4.57, é cilíndrica e tem comprimento de 1,7 m e diâmetro de 0,5 m. As discretizações espacial e direcional empregadas neste trabalho são as mesmas utilizadas por Centeno *et al.*, 2014, com 50 e 90 divisões nas direções radial e axial, respectivamente. Na integração direcional, foram utilizadas 24 direções ($M = 24$).

Neste trabalho, as únicas espécies participantes são H₂O e CO₂, as paredes da cavidade são assumidas negras e a pressão total é 1 atm. Os perfis de temperatura e concentrações de vapor de água e de dióxido de carbono, representados na Figura 4.58, foram extraídos do trabalho de Centeno *et al.*, 2014.

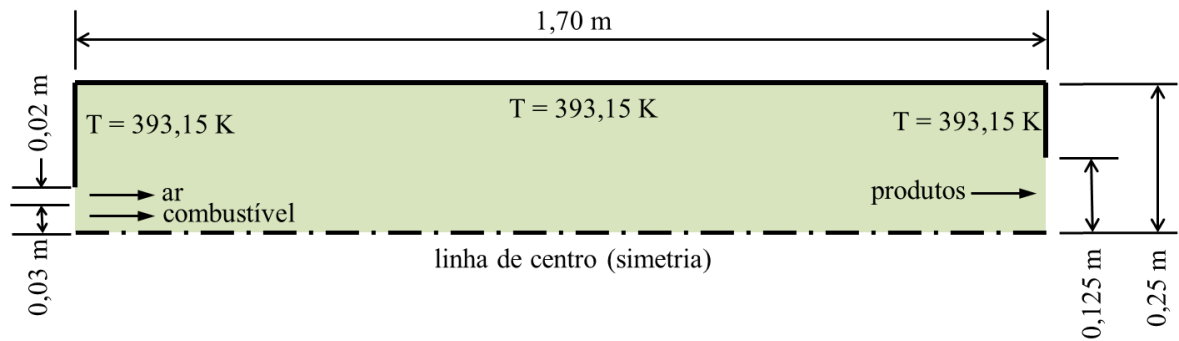


Figura 4.57 – Representação da câmara de combustão [adaptada de Centeno *et al.*, 2014].

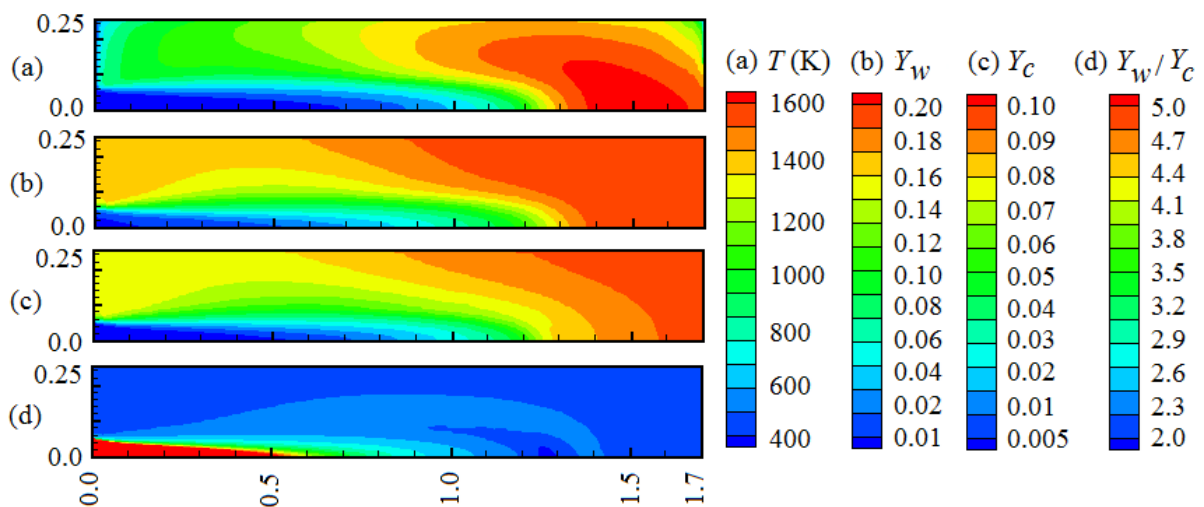


Figura 4.58 – (a) Campo de temperatura, (b) Fração molar de H₂O, (c) Fração molar de CO₂, (d) Razão entre as frações molares ou pressões parciais de H₂O e CO₂ ($p = 1$ atm) [Centeno *et al.*, 2014].

A temperatura máxima no domínio, calculada através do perfil, é de 1750 K. Nos problemas unidimensionais estudados anteriormente, a razão p_w/p_c ou Y_w/Y_c (pressão total de 1 atm) era mantida constante. No caso bidimensional, como mostrado na Figura 4.58(c), a razão Y_w/Y_c varia ao longo da câmara de combustão. O perfil de temperatura [Centeno *et al.*, 2014] é dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 T(r, z) = & t_{00} + t_{10}r + t_{01}z + t_{20}r^2 + t_{11}rz + t_{02}z^2 + t_{30}r^3 + t_{21}r^2z + \\
 & t_{12}rz^2 + t_{03}z^3 + t_{40}r^4 + t_{31}r^3z + t_{22}r^2z^2 + t_{13}rz^3 + t_{04}z^4 + t_{50}r^5 + \\
 & t_{41}r^4z + t_{32}r^3z^2 + t_{23}r^2z^3 + t_{14}rz^4 + t_{05}z^5
 \end{aligned} \quad (4.32)$$

onde r e z são as coordenadas radial e axial, respectivamente. Os coeficientes t_{ij} estão apresentados na Tabela 4.16.

Tabela 4.16 – Coeficientes para temperatura no domínio.

i	t_{0i}	t_{1i}	t_{2i}	t_{3i}	t_{4i}	t_{5i}
0	301,9	$-1,032 \times 10^4$	$4,467 \times 10^5$	$-4,409 \times 10^6$	$1,724 \times 10^7$	$-2,404 \times 10^7$
1	1228	2215	$-7,247 \times 10^4$	$6,402 \times 10^5$	$-1,493 \times 10^6$	-
2	-5095	$2,442 \times 10^4$	$-5,288 \times 10^4$	$5,978 \times 10^4$	-	-
3	6286	$-2,765 \times 10^4$	$2,257 \times 10^4$	-	-	-
4	-2011	7156	-	-	-	-
5	-4,257	-	-	-	-	-

Os perfis para concentrações de H₂O e CO₂ são, respectivamente [Centeno *et al.*, 2014]:

$$Y_w(r, z) = y_{w,1} \cosh\left[\frac{\pi(r - y_{w,2})}{y_{w,3}}\right] \text{sen}\left[\frac{\pi(z - y_{w,4})}{y_{w,5}}\right] + y_{w,6} \quad (4.33)$$

$$Y_c(r, z) = y_{c,1} \cosh\left[\frac{\pi(r - y_{c,2})}{y_{c,3}}\right] \text{sen}\left[\frac{\pi(z - y_{c,4})}{y_{c,5}}\right] + y_{c,6} \quad (4.34)$$

onde os coeficientes para os perfis de concentração de vapor de água ($y_{w,1}$, $y_{w,2}$, $y_{w,3}$, $y_{w,4}$, $y_{w,5}$ e $y_{w,6}$) e de dióxido de carbono ($y_{c,1}$, $y_{c,2}$, $y_{c,3}$, $y_{c,4}$, $y_{c,5}$ e $y_{c,6}$) estão apresentados na Tabela 4.17.

Tabela 4.17 – Coeficientes para concentração de H₂O e CO₂.

$y_{w,1}$	$y_{w,2}$	$y_{w,3}$	$y_{w,4}$	$y_{w,5}$	$y_{w,6}$
$3,633 \times 10^{-2}$	$2,315 \times 10^{-1}$	$2,884 \times 10^{-1}$	1,597	2,763	$2,066 \times 10^{-1}$
$y_{c,1}$	$y_{c,2}$	$y_{c,3}$	$y_{c,4}$	$y_{c,5}$	$y_{c,6}$
$1,742 \times 10^{-2}$	$2,473 \times 10^{-1}$	$3,042 \times 10^{-1}$	1,576	2,631	$9,685 \times 10^{-2}$

A Figura 4.59 apresenta o termo fonte radiativo Q_R calculado através das soluções LBL, WSGG (correlações de Dorigon *et al.*, 2013, Tabela 3.1 – Seção 3.2) e NCC-WSGG.

Como mostra a Figura 4.59, o termo fonte radiativo pode ser positivo (emissão supera a absorção; regiões com temperatura elevada) ou negativo (absorção excede a emissão; regiões com temperatura baixa). Uma análise da Figura 4.59 revela que os resultados obtidos para Q_R através dos modelos espectrais são muito semelhantes àqueles encontrados por meio da solução LBL.

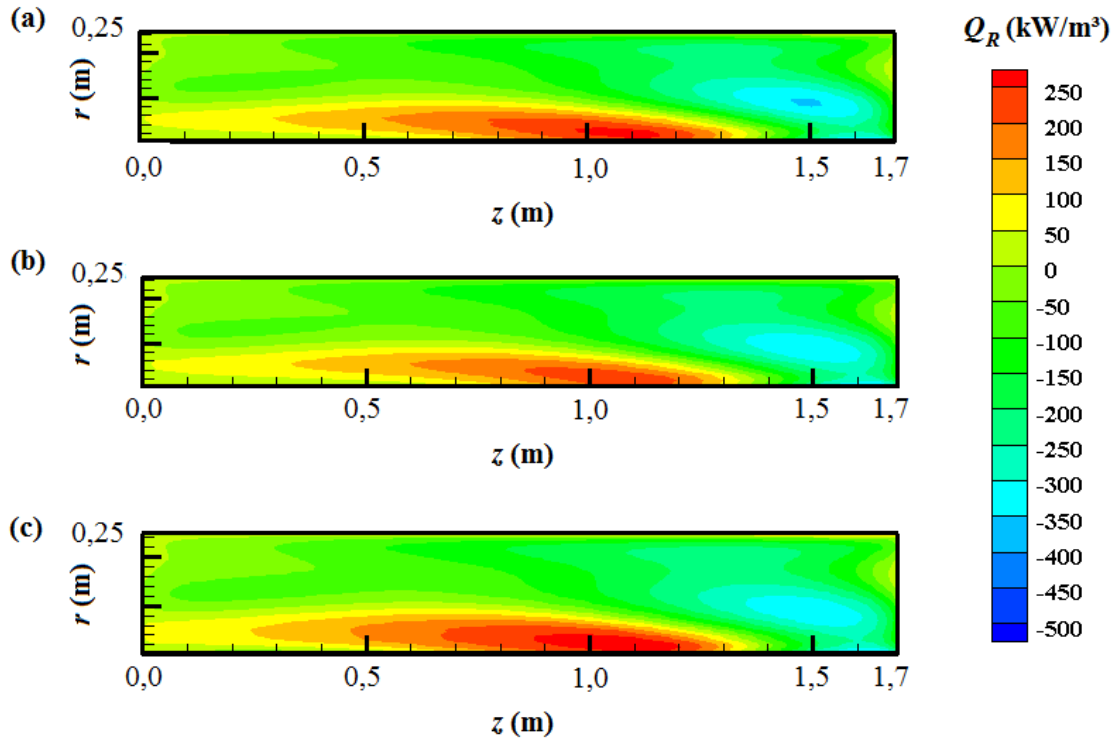


Figura 4.59 – Comparação entre as soluções (a) LBL, (b) WSGG e (c) NCC-WSGG.

Em geral, os modelos WSGG e NCC-WSGG conseguem prever o termo fonte radiativo muito bem, pois, na maior parte do domínio, o erro máximo no cálculo de Q_R é inferior a 5 % (Figura 4.60). De acordo com a Tabela 4.18, os erros máximos e médios nos dois modelos são inferiores a 10 % e 2 %, respectivamente. O erro em Q_R em relação ao método LBL é obtido através de:

$$\zeta (\%) = 100 \frac{|Q_{R,\text{modelo}} - Q_{R,\text{LBL}}|}{\max |Q_{R,\text{LBL}}|} \quad (4.35)$$

A Figura 4.61 mostra o valor de Q_R ao longo da linha de centro da câmara de combustão. Pode-se observar que, para $z < 0,6$ m, existe um desvio entre as soluções NCC-WSGG e LBL. De acordo com a Figura 4.58 (a), apesar de a temperatura ser relativamente baixa para $z < 0,6$ m a razão Y_w/Y_c ao longo da linha de centro da câmara de combustão é da ordem de 5, Figura 4.58 (d). Isso pode explicar o desvio verificado na Figura 4.61, pois todas as correlações foram obtidas para $Y_w/Y_c = 2$.

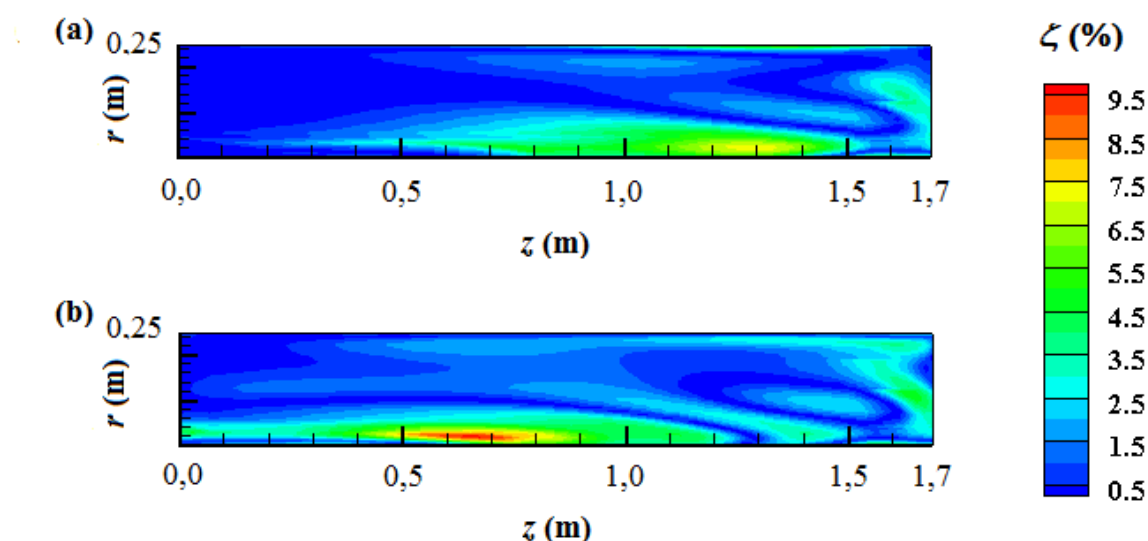


Figura 4.60 – Erro local, ζ , no termo fonte radiativo (a) WSGG e (b) NCC-WSGG.

Tabela 4.18 – Erros máximo e médio no termo fonte radiativo nas soluções WSGG e NCC-WSGG.

Modelo	ζ_{max} (%)	ζ_{med} (%)
WSGG	7,3	1,5
NCC-WSGG	9,7	1,9

O termo fonte radiativo está representado na Figura 4.62 para uma seção radial na posição $z = 1,0$ m. No início dessa seção, onde $Q_R > 0$, os modelos apresentam falhas para prever a absorção. Curiosamente, isso ocorre apesar de a temperatura ser relativamente baixa, Figura 4.58 (a), e de a razão Y_w/Y_c ser da ordem de 2, Figura 4.58 (d).

A Figura 4.63 exhibe o termo fonte radiativo para uma seção radial na posição $z = 1,5$ m. Apesar de a temperatura ser elevada ao longo de $z = 1,5$ m (existe predomínio da

emissão, pois $Q_R < 0$ em boa parte dessa seção), os resultados dos modelos concordam muito bem com a solução LBL, pois a razão Y_w/Y_c é muito próxima de 2, Figura 4.58 (d).

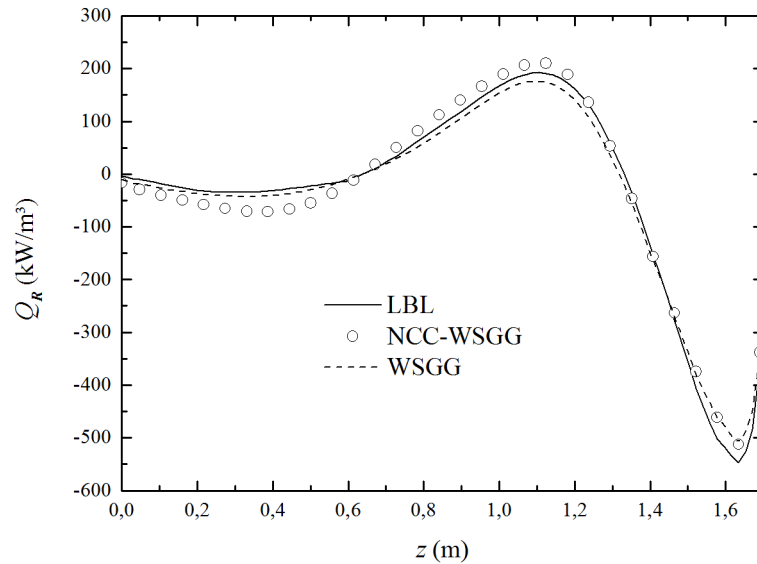


Figura 4.61 – Termo fonte radiativo ao longo da linha de centro da câmara.

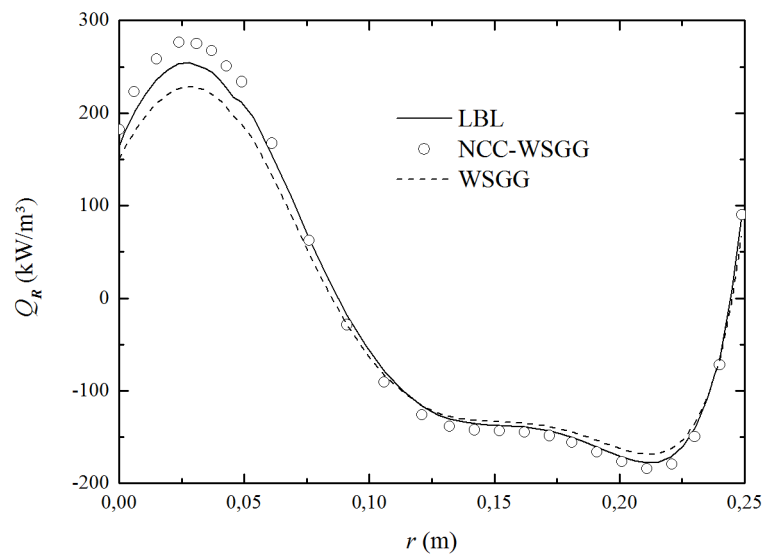


Figura 4.62 – Termo fonte radiativo na seção radial, $z = 1$ m.

A Figura 4.64 mostra que, no cálculo do fluxo de calor na parede da câmara cilíndrica, também existe boa concordância dos modelos WSGG e NCC-WSGG com a solução LBL. Como pode ser verificado na Tabela 4.19, os erros nos dois modelos, calculados de acordo com a equação a seguir, são muito semelhantes (erros máximos próximos de 2 %).

$$\delta(\%) = 100 \frac{|q''_{R,\text{modelo}} - q''_{R,\text{LBL}}|}{\max |q''_{R,\text{LBL}}|} \quad (4.36)$$

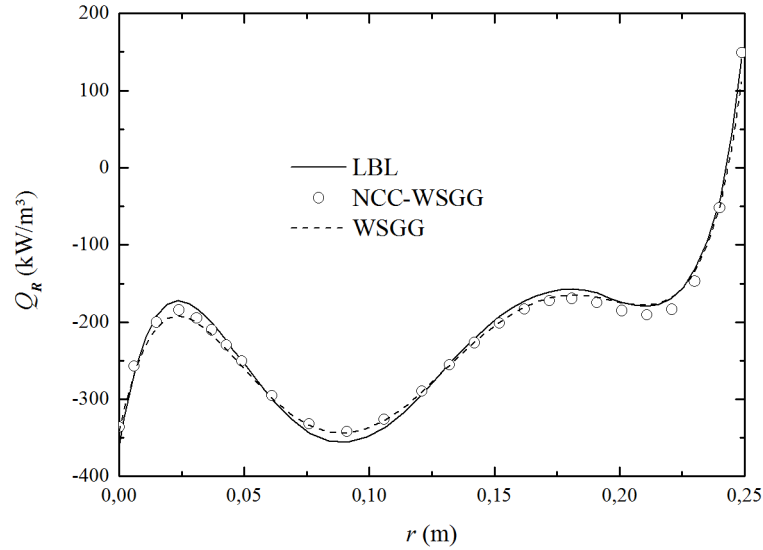


Figura 4.63 – Termo fonte radiativo na seção radial, $z = 1,5$ m.

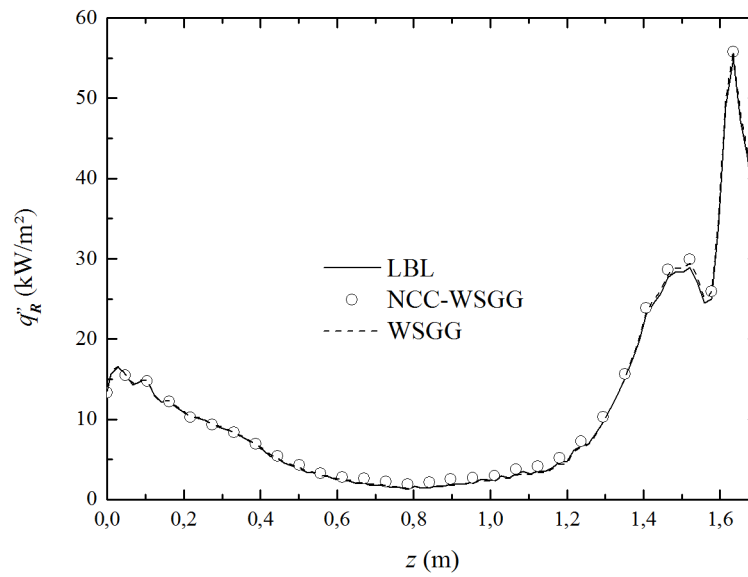


Figura 4.64 – Fluxo de calor na parede, $r = 0,25$ m.

Tabela 4.19 – Erros máximos e médios no fluxo de calor nas soluções WSGG e NCC-WSGG.

Modelo	δ_{max} (%)	δ_{med} (%)
WSGG	1,8	0,4
NCC-WSGG	2,0	0,9

As simulações foram realizadas em um computador *desktop* com processador AMD FX-8150 Eight-Core 3,6 GHz e 16,0 GB de memória RAM. Nessas condições, o tempo computacional requerido pelos modelos foi: WSGG, 2,4 s; NCC-WSGG, 6,9 s (em todas as rotinas foi empregada a computação sequencial). Um dos fatores que aumentam o tempo computacional do NCC-WSGG em relação ao WSGG é o número de gases cinza. O primeiro modelo utiliza 10 gases cinza; o segundo, apenas 4. Mesmo assim, o NCC-WSGG é muito mais rápido que a solução LBL, cujo tempo computacional, para o caso analisado, foi de 11,65 horas.

5 CONCLUSÕES

A radiação térmica é um processo de transferência de calor muito importante em aplicações que ocorrem em temperaturas elevadas. Esse mecanismo é muito complexo, pois o coeficiente de absorção apresenta forte dependência em relação ao número de onda. Isso dificulta a integração espectral da equação governante (equação da transferência radiativa – RTE), que pode ser executada através do método linha-por-linha (LBL). Entretanto, devido ao grande número de linhas do espectro, a integração LBL torna-se inviável, principalmente quando são necessários cálculos iterativos acoplados, como em casos onde a RTE deve ser resolvida juntamente com a equação da energia e das espécies químicas

Um dos modelos mais promissores para integração espectral da RTE é a soma-ponderada-de-gases-cinza (WSGG). É um modelo de ampla aplicação, que pode ser encontrado em diversos códigos computacionais comerciais. O WSGG é bastante simples, pois assume que o comportamento espectral do coeficiente de absorção pode ser representado por um número reduzido de gases cinza. Porém, o modelo pode enfrentar dificuldades para resolver problemas não homogêneos quando a razão entre as pressões parciais das espécies químicas varia muito. Vale ressaltar que, em geral, o modelo WSGG não é aplicado na sua melhor forma. Na literatura, a maioria dos trabalhos não considera que a formulação do modelo WSGG permite incorporar a variação da concentração das espécies químicas. Além disso, as correlações propostas por Smith *et al.*, 1987, que estão muito desatualizadas, continuam sendo aplicadas.

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinza baseada em linhas espectrais (SLW) representa um avanço em relação ao WSGG, pois incorpora uma metodologia que permite a solução de problemas não homogêneos. Além do mais, não existe nenhuma limitação em relação ao número de gases cinza.

Como discutido neste trabalho, a dependência altamente irregular do coeficiente de absorção dos gases em relação ao número de onda é uma das maiores dificuldades enfrentadas pelos modelos, principalmente na solução de problemas não isotérmicos e/ou não homogêneos. Para contornar essas dificuldades, o modelo SLW foi proposto baseado na aproximação de escala, que separa as dependências espacial e espectral do coeficiente de absorção. Curiosamente, como demonstrado neste estudo, a aproximação de escala, que deveria melhorar o desempenho do SLW na solução de problemas não isotérmicos e/ou não homogêneos, é a principal fonte de erro no modelo quando se resolve uma única espécie

química. Os resultados apresentados mostraram que, se um espectro é construído artificialmente de acordo com a aproximação de escala (espectro fictício), a concordância entre as soluções SLW e LBL, ambas baseadas nesse espectro, é muito satisfatória. Um estudo da dependência da temperatura de referência, que é empregada no cálculo da função distribuição ALB, revelou que a alteração desse parâmetro também pode melhorar a solução do modelo SLW. Nos testes realizados, a temperatura de referência exerceu grande influência na solução SLW. No caso do espectro fictício, o valor da temperatura de referência não exerce nenhuma influência na solução, pois, nesse caso, o espectro obedece à aproximação de escala.

Os fundamentos dos modelos WSGG e SLW nortearam o desenvolvimento de um novo modelo para integração espectral da RTE. Assim como no WSGG e no SLW, no modelo, denominado soma-ponderada-de-gases-cinza com coeficientes não constantes (NCC-WSGG), a integração no número de onda é substituída por um somatório sobre todos os gases cinza. Porém, os coeficientes de absorção e de emissão de cada gás cinza não são iguais e dependem da temperatura. Da mesma forma que no modelo SLW, no NCC-WSGG, os intervalos espectrais são mantidos fixos através da definição de uma condição de referência, que evita o surgimento dos termos de Leibniz na RTE.

O NCC-WSGG foi aplicado para vários casos não isotérmicos e não homogêneos, envolvendo espécies químicas independentes (CO_2 e H_2O) e para problemas onde se considerou mistura de CO_2 e H_2O . Os resultados foram comparados com as soluções do modelo WSGG e do método LBL, todas baseadas na mesma versão do banco de dados (HITEMP 2010). O desempenho do NCC-WSGG foi ligeiramente melhor que o do WSGG nos casos de meio participante composto por CO_2 . Os resultados para as soluções NCC-WSGG tiveram uma melhora considerável para meio composto por H_2O , principalmente no cálculo do fluxo de calor onde foram obtidos erros inferiores a 2 %. Para mistura de CO_2 e H_2O com razão p_w/p_c constante, os resultados dos dois modelos foram, em geral, muito semelhantes.

Analisou-se também um problema onde uma mistura não isotérmica e não homogênea de CO_2 e H_2O está confinada em uma câmara cilíndrica. Nesse caso a razão entre as pressões parciais das espécies químicas não foi mantida constante ao longo do domínio. Nessa etapa, entrou uma das maiores contribuições deste trabalho: o desenvolvimento de uma rotina bidimensional para o método LBL. Os resultados dos modelos WSGG e NCC-WSGG foram muito semelhantes, com erros máximos no termo fonte radiativo inferiores a 10 % e erros

médios menores que 2 %. No fluxo de calor na parede, os erros máximos e médios foram inferiores a 2 % e 1 %, respectivamente.

A grande vantagem dos modelos globais em relação à solução LBL é a redução do tempo computacional. Na solução do problema bidimensional apresentado neste trabalho, por exemplo, a razão entre os tempos computacionais do modelo WSGG e da solução LBL é de, aproximadamente, 1/17.500. O modelo NCC-WSGG é mais lento com uma razão de, aproximadamente, 1/6.080. Um dos motivos que aumentam o tempo computacional do NCC-WSGG em relação ao WSGG é o número de gases cinza. O primeiro modelo utiliza 10 gases cinza; o segundo, apenas 4.

5.1 Proposta de continuidade da pesquisa

O modelo NCC-WSGG foi aplicado em problemas unidimensionais e bidimensionais; e os resultados, comparados com a solução LBL. Os resultados do NCC-WSGG para CO_2 , H_2O e para mistura dessas duas espécies químicas foram muito bons, com erros máximos inferiores a 10 %. Entretanto, a formulação depende da definição de uma temperatura de referência, que afeta consideravelmente os resultados. O que se propõe é verificar a possibilidade de tornar as correlações independentes da condição de referência.

Nos resultados apresentados, a temperatura de absorção foi assumida igual à temperatura local. Pode-se incorporar no modelo NCC-WSGG uma formulação para o cálculo da temperatura de absorção em cada ponto do domínio.

Neste trabalho, as correlações exibidas para mistura incluem somente CO_2 e H_2O . Uma formulação para acoplar as espécies químicas de forma independente na mistura facilitaria a extensão do modelo para considerar outras espécies químicas, como CO e CH_4 . Em algumas soluções para espécies químicas independentes, o modelo NCC-WSGG apresentou resultados muito melhores que o WSGG. Essa é outra motivação para o desenvolvimento de um método para acoplar as espécies químicas de forma independente na mistura.

Em alguns problemas de combustão é importante incluir o efeito da fuligem. O modelo NCC-WSGG pode ser aplicado nesse tipo de estudo sem nenhuma alteração na formulação, pois é possível aplicar a mesma metodologia utilizada no modelo WSGG para acoplar a mistura gasosa com a fuligem.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Al-Omari, S.A.B. On the sensitivity of soot and thermal radiation simulation results to the adopted PDF for temperature under highly sooting combustion conditions, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 33, p. 1273–1280, 2006.

André, F.; Vaillon, R. A nonuniform narrow band correlated- k approximation using the k -moment method, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 1900-1911, 2010.

Barve, V.V. **Computations of Strongly Forced Laminar Cold-Flow Jets and Methane-Air Diffusion Flames**. 2006. 282 f. Tese – The University of Texas at Austin, 2006.

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

Bhuiyan, A.A.; Naser, J. Numerical modelling of oxy fuel combustion, the effect of radiative and convective heat transfer and burnout, **Fuel**, v. 139, p. 268-284, 2015.

Bressloff, N.W. The influence of soot loading on weighted sum of gray gases solutions to the radiative transfer equation across mixtures of gases and soot, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 42, p. 3469-3480, 1999.

Carlson, B.G., Lathrop, K.D. Transport theory: the method of discrete ordinates, **Computer Methods in Reactor Physics**, p. 165-266, 1968.

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

Cassol, F.; Brittes, R.; Centeno, F.R.; da Silva, C.V.; França, F.H.R. Evaluation of the gray gas model to compute radiative transfer in non-isothermal, non-homogeneous participating medium containing CO₂, H₂O and soot, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 37, p. 163-172, 2015.

Çayan, F.N.; Selçuk, N. A comparative study of modeling of radiative heat transfer using MOL solution of DOM with gray gas, wide-band correlated-*k* and spectral line-based weighted sum of gray gases models, **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 52, p. 281-296, 2007.

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

Centeno, F.R.; da Silva, C.V.; França, F.H.R. The influence of gas radiation on the thermal behavior of a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane-air flame, **Energy Conversion and Management**, v. 79, p. 405-414, 2014.

Chu, H.; Liu, F.; Zhou, H. Calculations of gas thermal radiation transfer in one-dimensional planar enclosure using LBL and SNB models, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 54, p. 4736-4745, 2011.

Chu, H.; Liu, F.; Zhou, H. Calculations of gas heat transfer in a two-dimensional rectangular enclosure using the LBL approach and the statistical narrow-band correlated-*k* model, **International Journal of Thermal Sciences**, v. 59, p. 66-74, 2012.

Clements, A.G.; Porter, R.; Pranzitelli, A.; Pourkashanian, M. Evaluation of FSK models for radiative heat transfer under oxyfuel conditions, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 151, p. 67-75, 2015.

Coelho, P.J.; Teerling, O.J.; Roekaerts, D. Spectral radiative effects and turbulence/radiation interaction in a non-luminous turbulent jet diffusion flame, **Combustion and Flame**, v. 133, p. 75-91, 2003.

Coelho, P.J. Turbulence-radiation interaction: from theory to application in numerical simulations, **Journal of Heat Transfer**, v. 134, p. 031001-(1:13), 2012.

Colomer, G.; Cònsul, R.; Oliva, A. Coupled radiation and natural convection: Different approaches of the SLW model for a non-gray gas mixture, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 107, p. 30-46, 2007.

Consalvi, J.L. Influence of turbulence-radiation interactions in laboratory-scale methane pool fires, **International Journal of Thermal Sciences**, v. 60, p. 122-130, 2012.

Consalvi, J.L.; Demarco, R.; Fuentes, A.; Melis, S.; Vantelon, J.P. On the modeling of radiative transfer in laboratory-scale pool fires, **Fire Safety Journal**, v. 60, p. 73-81, 2013.

Consalvi, J.L.; Liu, F. Radiative heat transfer in the core of axisymmetric pool fires – I: Evaluation of approximate radiative property models, **International Journal of Thermal Sciences**, v. 84, p. 104-117, 2014.

Crnomarkovic, N.; Sijercic, M.; Belosevic, S.; Tucakovic, D.; Zivanovic, T. Numerical investigation of processes in the lignite-fired furnace when simple gray gas and weighted sum of gray gases models are used, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 56, p. 197-205, 2013.

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, 1993a.

Denison, M.K.; Webb B.W. An absorption-line blackbody distribution function for efficient calculation of total gas radiative transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 50, p. 499-510, 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, 1995a.

Denison, M.K.; Webb B.W. The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media, **Journal of Heat Transfer**, v. 117, p. 359-365, 1995b.

Denison, M.K.; Webb B.W. The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model for H₂O/CO₂ mixtures, **Journal of Heat Transfer**, v. 117, p. 788-792, 1995c.

Denison, M.K.; Webb B.W. The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model – A review, Proceedings of the first Symposium on Radiation Transfer, Kuşadası, 1995d.

Deshmukh, K.V.; Haworth, D.C.; Modest, M.F. Direct numerical simulation of turbulence–radiation interactions in homogeneous nonpremixed combustion systems, Proceedings of the Combustion Institute, v. 31, p. 1641-1648, 2007.

Doner, N.; Selçuk, N. An application of spectral line-based weighted sum of gray gases (SLW) model with geometric optics approximation for radiative heat transfer in 3-D participating media, **Applied Thermal Engineering**, v. 50, p. 89-93, 2013.

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

Edwards, D.K.; Balakrishnan, A. Thermal radiation by combustion gases, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 16, p. 25-40, 1973.

Evseev, V.; Fateev, A.; Clausen, S. High-resolution transmission measurements of CO₂ at high temperatures for industrial applications, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 113, p. 2222-2233, 2012.

Fischer, J.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Rothman, L.S.; Perrin, A. Total internal partition sums for the molecular species in the 2000 edition of the HITRAN database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 82, p. 401-412, 2003.

Galarça, M.M.; Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.F. Correlations for the weighted-sum-of-gray-gases generated from the absorption-line blackbody distribution function, Proceedings of ENCIT 2008, Belo Horizonte, MG, 2008.

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

Garten, B.; Hunger, F.; Messig, D.; Stelzner, B.; Trimis, D.; Hasse, C. Detailed radiation modeling of a partial-oxidation flame, **International Journal of Thermal Sciences**, v. 87, p. 68-84, 2015.

Godson, W.L. The evaluation of infra-red radiative fluxes due to atmospheric water vapour, **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 79, p. 367-379, 1953.

Goody, R.; Chen, L.; Crisp, D. The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 42, p. 539-550, 1989.

Goody, R.M. A statistical model for water-vapor absorption, **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 78, p. 165-169, 1952.

Goody, R.M.; Yung, Y.L. **Atmospheric Radiation**. Clarendon Press, Oxford, 1989.

Goutiere, V.; Liu, F.; Charette, A. An assessment of real-gas modeling in 2D enclosures, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 64, p. 299-326, 2000.

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

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

Ibrahim, A.; Saury, D.; Lemonnier, D. Coupling of turbulent natural convection with radiation in an air-filled differentially-heated cavity at $Ra = 1,5 \times 10^9$, **Computers & Fluids**, v. 88, p. 115-125, 2013.

Ismail, K.A.R.; Salinas, C. Non-gray radiative conductive modeling of a double glass window with a cavity filled with a mixture of absorbing gases, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 49, p. 2972-2983, 2006.

Johansson, R.; Leckner, B.; Andersson, K.; Johnsson, F. Account for variations in the H_2O to CO_2 molar ratio when modeling gaseous radiative heat transfer with the weighted-sum-of-gray-gases model, **Combustion and Flame**, v. 158, p. 893-901, 2011.

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

Kaplan, C.R., Baek, S.W., Oran, E.S., Ellzey, J.L. Dynamics of a strongly radiating unsteady ethylene jet diffusion flame, **Combustion and Flame**, v. 96, p. 1-21, 1994.

Krishnamoorthy, G. A new weighted-sum-of-gray-gases model for CO_2 - H_2O gas mixtures, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 37, p. 1182-1186, 2010.

Laouar-Meftah, S.; Cherifi, M.; Lemonnier, D.; Benbrik, A. Gas radiation effects on opposing double-diffusive convection in a non-gray air-H₂O mixture, **International Journal of Thermal Sciences**, v. 77, p. 38-46, 2014.

Liu, F.; Becker, H.A.; Bindar, Y. A comparative study of radiative heat transfer modelling in gas-fired furnaces using the simple grey gas and the weighted-sum-of-grey-gases models, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 41, p. 3357-3371, 1998.

Liu, F.; Smallwood, G.J. An efficient approach for the implementation of the SNB based correlated-k method and its evaluation, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 84, p. 465-475, 2004.

Ma, J.; Li, B.; Howell, J.R. Thermal radiation heat transfer in one- and two-dimensional enclosures using the spectral collocation method with full spectrum *k*-distribution model, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 71, p. 35-43, 2014.

Maurente, A.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. Comparison of the standard weighted-sum-of-gray-gases with the absorption-line blackbody distribution function for the computation of radiative heat transfer in H₂O/CO₂ mixtures, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 109, p. 1758-1770, 2008.

Mazumder, S.; Modest, M.F. Application of the full spectrum correlated-k distribution approach to modeling non-gray radiation in combustion gases, **Combustion and Flame**, v. 129, p. 416-438, 2002.

McClatchey, R.A.; Benedict, W.S.; Clough, S.A.; Burch, D.E.; Fox, K.; Rothman, L.S.; Garing, J.S. AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation, Technical Report No, AFCRL-TR-0096, 1973.

Menart, J. Radiative transport in a two-dimensional axisymmetric thermal plasma using the S-N discrete ordinates method on a line-by-line basis, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 67, p. 273-291, 2000.

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

Modest, M.F.; Zhang, H. The full-spectrum correlated-k distribution and its relationship to the weighted-sum-of-gray-gases method, Proceedings of 2000 IMECE, Pittsburgh, 2000.

Modest, M.F.; Zhang, H. The full-spectrum correlated-k distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures, **Journal of Heat Transfer**, v. 124, p. 30-38, 2002.

Modest, M.F. **Radiative Heat Transfer**, MC Graw-Hill, Nova York, 2003.

Modest, M.F. The treatment of nongray properties in radiative heat transfer: from past to present, **Journal of Heat Transfer**, v. 135, p. 061801-061812, 2013.

Mossi, A.; Galarça, M.M.; Brittes, R.; Vielmo, H.A.; França, F.H.R. Comparison of spectral models in the computation of radiative heat transfer in participating media composed of gases and soot, **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 34, p. 112-119, 2012.

Narayanan, P.; Trouvé, A. Radiation-driven flame weakening effects in sooting turbulent diffusion flames, Proceedings of the Combustion Institute, v. 32, p. 1481-1489, 2009.

Pal, G.; Modest, M.F. A narrow band-based multiscale multigroup full-spectrum k -distribution method for radiative transfer in nonhomogeneous gas-soot mixtures, **Journal of Heat Transfer**, v. 132, p. (023307)1-9, 2010.

Pearson, J.T.; Webb, B.W.; Solovjov, V.P.; Ma, J. Updated correlation of the absorption line blackbody distribution function for H₂O based on the HITEMP2010 database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 128, p. 10-17, 2013.

Pierrot, L.; Soufani, A.; Taine, J. Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in H₂O, CO₂, and H₂O – CO₂ mixtures at high temperature, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 62, p. 523-548, 1999a.

Pierrot, L.; Rivière, P.; Soufani, A.; Taine, J. A fictitious-gas-based absorption distribution function global model for radiative transfer in hot gases, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 62, p. 609-624, 1999b.

Porter, R.; Liu, F.; Pourkashanian, M.; Williams, A.; Smith, D. Evaluation of solution methods for radiative heat transfer in gaseous oxy-fuel combustion environments, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 2084-2094, 2010.

Rajhi, M.A.; Ben-Mansour, R.; Habib, M.A.; Nemitallah, M.A.; Andersson, K. Evaluation of gas radiation models in CFD modeling of oxy-combustion, **Energy Conversion and Management**, v. 81, p. 83-97, 2014.

Rothman, L.S.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Brown, L.R.; Toth, R.A.; Pickett, H.M.; Poynter, R.L.; Flaud, J.-M.; Camy-Peyret, C.; Barbe, A.; Husson, N.; Rinsland, C.P.; Smith, M.A.H. The HITRAN database: 1986 edition, **Journal of Applied Optics**, v. 26, p. 4058-4097, 1987.

Rothman, L.S.; Rinsland, C.P.; Goldman, A.; Massie, T.; Edwards, D.P.; Flaud, J.-M.; Perrin, A.; Camy-Peyret, C.; Dana, V.; Mandin, J.-Y.; Schroeder, J.; McCann, A.; Gamache, R.R.; Wattson, R.B.; Yoshino, K.; Chance, K.V.; Jucks, K.W.; Brown, L.R.; Nemtchinov, V.; Varanasi, P. The HITRAN molecular spectroscopic database and Hawks (HITRAN Atmospheric Workstation): 1996 edition, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 60, p. 665-710, 1998.

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

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

Rothman, L.S.; Gordon, I.E.; Babikov, Y.; Barde, A.; Chris Benner, D.; Bernath, P.F.; Birk, M.; Bizzocchi, L.; Boudon, V.; Brown, L.R.; Campargue, A.; Chance, K.; Cohen, E.A.; Coudert, L.H.; Devi, V.M.; Drouin, B.J.; Fayt, A.; Flaud, J.-M.; Gamache, R.R.; Harrison, J.J.; Hartmann, J.-M.; Hill, C.; Hodges, J.T.; Jacquemart, D.; Jolly, A.; Lamouroux, J.; Le Roy, R.J.; Li, G.; Long, D.A.; Lyulin, O.M.; Mackie, C.J.; Massie, S.T.; Mikhailenko, S.; Müller, H.S.P.; Naumenko, O.V.; Nikitin, A.V.; Orphal, J.; Perevalov, V.; Perrin, A.; Polovtseva, E.R.; Richard, C.; Smith, M.A.H.; Starikova, E.; Sung, K.; Tashkun, S.; Tennyson, J.; Toon, G.C.; Tyuterev, V.I.G.; Wagner, G. The HITRAN 2012 molecular spectroscopic database, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 130, p. 4-50, 2013.

Salinas, C.T. Fast approximate technique for the cumulative wavenumber model to modeling radiative transfer in a mixture of real gas media, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 109, p. 2078-2093, 2008.

Shiehnejadhesar, A.; Mehrabian, R.; Scharler, R.; Goldin, G.M.; Obernberger, I. Development of a gas phase combustion model suitable for low and high turbulence conditions, **Fuel**, v. 126, p. 177-187, 2014.

Silva, C.V.; França, F.H.R.; Vielmo, H.A. Analysis of the turbulent, non-premixed combustion of natural gas in cylindrical chamber with and without radiation, **Combustion Science and Technology**, v. 179, p. 1605-1630, 2007.

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.

Smith T.F; Al-Turki, A.M.; Byun, K.; Kim, T.K. Radiative and conductive transfer for a gas / soot mixture between diffuse parallel plates, **Journal of Thermophysics and Heat Transfer**, v. 1, p. 50-55, 1987.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. SLW modeling of radiative transfer in multicomponent gas mixtures, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 65, p. 655-672, 2000.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. An efficient method for modeling radiative transfer in multicomponent gas mixtures with soot, **Journal of Heat Transfer**, v. 123, p. 450-457, 2001.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. A local-spectrum correlated model for radiative transfer in non-uniform gas media, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 73, p. 361-373, 2002.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. The cumulative wavenumber method for modeling radiative transfer in gas mixtures with soot, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 93, p. 273-287, 2005.

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 & Radiative Transfer**, v. 109, p. 245-257, 2008.

Solovjov, V.P.; Webb B.W. Application of CW local correction approach to SLW modeling of radiative transfer in non-isothermal gaseous media, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 111, p. 318-324, 2010.

Solovjov, V.P.; Lemonnier, D.; Webb B.W. The SLW-1 model for efficient prediction of radiative transfer in high temperature gases, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 112, p. 1205-1212, 2011a.

Solovjov, V.P.; Lemonnier, D.; Webb B.W. The SLW-1 modeling of radiative heat transfer in nonisothermal nonhomogeneous gas mixtures with soot, **Journal of Heat Transfer**, v. 133, p. 102701-102709, 2011b.

Solovjov, V.P.; Lemonnier, D.; Webb B.W. Efficient cumulative wavenumber model of radiative transfer in gaseous media bounded by non-gray walls, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 128, p. 2-9, 2013.

Soufiani, A.; Djavdan, E. A comparison between weighted sum of gray gases and statistical narrow-band radiation models for combustion applications, **Combustion and Flame**, v. 97, p. 240-250, 1994.

Trivic, D.N. 3-D radiation modeling of nongray gases-particles mixture by two different numerical methods, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 70, p. 298-312, 2014.

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

Xue H.; Ho, J.C.; Cheng, Y.M. Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation, **Fire Safety Journal**, v. 36, p. 37-54, 2001.

Zhang, H.; Modest, M.F. A multi-scale full spectrum correlated-k distribution for heat transfer in inhomogeneous gas mixtures, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, v. 73, p. 349-360, 2002.

Zhang, H.; Modest, M.F. A multi-group full-spectrum *k*-distribution database for water vapor mixtures in radiative transfer calculations, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 46, p. 3593-3603, 2003.

Zhang, J.; Ito, T.; Ito, S.; Riechelmann, D.; Fujimori, T. Numerical investigation of oxy-coal combustion in a large-scale furnace: Non-gray effect of gas and role of particle radiation, **Fuel**, v. 139, p. 87-93, 2015.

APÊNDICE A – Geração do espectro de absorção para CO₂ e H₂O

Como parte deste trabalho, foram gerados espectros de absorção para vapor de água e dióxido de carbono. Como mencionado no Capítulo 2, a seção transversal de absorção é obtida através de bancos de dados espectrais. No banco de dados HITEMP 2010, para vapor de água existem dados para $0 < \eta < 30.000 \text{ cm}^{-1}$. Já para dióxido de carbono, o intervalo é menor $5 < \eta < 12.785 \text{ cm}^{-1}$. Neste trabalho, foi considerado $0 < \eta < 10.000 \text{ cm}^{-1}$ para todas as espécies químicas. Isso é consistente com a literatura [André e Vaillon, 2010, utilizaram $10 < \eta < 15.000 \text{ cm}^{-1}$; Chu *et al.*, 2011, $150 < \eta < 9.300 \text{ cm}^{-1}$]. Essa simplificação não afeta os resultados e reduz o tempo computacional.

No banco de dados HITEMP 2010, existem 111.377.377 linhas espectrais para o vapor de água e 11.167.618 para dióxido de carbono [Rothman *et al.*, 2010]. O espaçamento entre as linhas espectrais não é uniforme. Para fins computacionais, é necessário definir um espaçamento uniforme no intervalo espectral de interesse (no caso deste trabalho, $0 < \eta < 10.000 \text{ cm}^{-1}$). É para isso que se define o parâmetro número de pontos, N_p , que corresponde à quantidade de números de onda no intervalo $0 < \eta < 10.000 \text{ cm}^{-1}$. Outro parâmetro que deve ser definido é $\Delta\eta_{max}$ para o cálculo da seção transversal de absorção, C_η . Quando se emprega o perfil de Lorentz (Equação A.1) para o cálculo de C_η , teoricamente, deveria considerar-se o efeito de todas as linhas espectrais em cada ponto η . Isso não é necessário. Na prática, somente as linhas localizadas entre $\eta - \Delta\eta_{max}$ e $\eta + \Delta\eta_{max}$ devem ser consideradas. Os parâmetros N_p e $\Delta\eta_{max}$ foram avaliados através do cálculo da emitância total para as seguintes condições: $T = 1500 \text{ K}$, $p_i = 0,5 \text{ atm}$ e $p_i S = 3,0 \text{ atm.m}$, onde p_i é a pressão parcial da espécie química considerada [Dorigon *et al.*, 2013]. Todas as avaliações foram realizadas com pressão total de 1 atm.

$$C_\eta = \sum_i \frac{S_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{(\eta - \eta_i)^2 + \gamma_i^2} \quad (\text{A.1})$$

A Tabela A.1 – mostra a avaliação do parâmetro $\Delta\eta_{max}$. Os cálculos foram realizados com $N_p = 500 \times 10^3$. Para CO₂, verifica-se que reduzindo $\Delta\eta_{max}$ de 400 cm^{-1} para 600 cm^{-1} o erro relativo na emitância fica em 0,1 %. Para H₂O, a redução de $\Delta\eta_{max}$ de 40 cm^{-1} para 60

cm^{-1} representa um erro de 0,04 %. Portanto, $\Delta\eta_{max} = 400 \text{ cm}^{-1}$ e $\Delta\eta_{max} = 40 \text{ cm}^{-1}$ são adequados para CO_2 e H_2O , respectivamente. É interessante observar que, como o número de linhas espectrais para dióxido de carbono é aproximadamente 10 % do vapor de água, $\Delta\eta_{max}$ para H_2O é 10 % do $\Delta\eta_{max}$ para CO_2 . Nas avaliações de André e Vaillon, 2010, e Pearson *et al.*, 2013, para H_2O , foi empregado $\Delta\eta_{max} = 25 \text{ cm}^{-1}$ a fim de reduzir o tempo computacional.

Tabela A.1 – Avaliação do parâmetro $\Delta\eta_{max}$ no cálculo da emitância total com a integração LBL ($N_P = 500 \times 10^3$).

CO_2		H_2O	
$\Delta\eta_{max} (\text{cm}^{-1})$	ε	$\Delta\eta_{max} (\text{cm}^{-1})$	ε
200	0,2182	20	0,5542
400	0,2191	40	0,5547
600	0,2194	60	0,5549
800	0,2196	80	0,5550
1000	0,2197	100	0,5550
1200	0,2198	120	0,5551

A Tabela A.2 mostra a avaliação do parâmetro N_P . Os cálculos foram realizados com os valores obtidos para $\Delta\eta_{max}$ ($\Delta\eta_{max} = 400 \text{ cm}^{-1}$ e $\Delta\eta_{max} = 40 \text{ cm}^{-1}$ para CO_2 e H_2O , respectivamente). Verifica-se que $N_P = 150 \times 10^3$ é apropriado para CO_2 e H_2O , pois o aumento no valor de N_P para 200×10^3 produz um erro relativo na emitância inferior a 0,2 %.

Tabela A.2 – Avaliação do parâmetro N_P no cálculo da emitância total com a integração LBL.

CO_2		H_2O	
$\Delta\eta_{max} = 400 \text{ cm}^{-1}$		$\Delta\eta_{max} = 40 \text{ cm}^{-1}$	
N_P	ε	N_P	ε
150×10^3	0,2196	150×10^3	0,5562
200×10^3	0,2195	200×10^3	0,5555
250×10^3	0,2193	250×10^3	0,5552
300×10^3	0,2192	300×10^3	0,5550
350×10^3	0,2192	350×10^3	0,5549
400×10^3	0,2191	400×10^3	0,5548

Os espectros foram gerados para temperaturas entre 400 K e 2500 K, com passo de $\Delta T_p = 100$ K, resultando em 22 temperaturas na faixa adotada. Quando a temperatura está entre algum desses valores, aplica-se uma interpolação linear. Isso também é consistente com o que é empregado na literatura [André e Vaillon, 2010, $300 < T < 2900$ K, com passo de $\Delta T_p = 200$ K]. A Figura A.1 mostra o efeito da variação de ΔT_p no cálculo LBL do termo fonte radiativo. Reduzindo-se ΔT_p de 200 K para 100 K os erros máximo e médio em Q_R são de, respectivamente, 0,4 % e 0,1 % (os testes foram realizados com H_2O , mas pode-se chegar à mesma conclusão utilizando-se CO_2). O termo fonte radiativo foi calculado considerando-se um meio unidimensional não isotérmico e homogêneo com $Y_w = 0,2$. O perfil de temperatura é dado pela equação a seguir:

$$T(x) = 400 + 1400 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (\text{A.2})$$

onde duas placas negras estão separadas por uma distância $L = 1$ m.

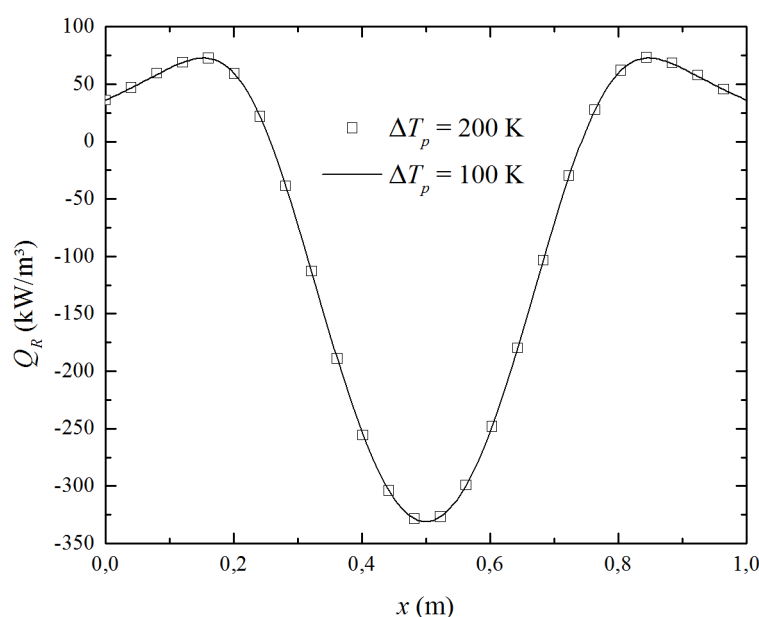


Figura A.1 – Avaliação do passo de temperatura ΔT_p (Equação A.2, $Y_w = 0,2$).

Para dióxido de carbono, assume-se que o espectro varia linearmente com a fração molar. Isso permite que o espectro, para qualquer valor da fração molar de CO_2 , seja obtido a partir de $Y_c = 1$. Essa aproximação é muito útil em problemas não homogêneos, pois elimina a necessidade de calcular-se o espectro para cada valor assumido pela concentração. Para H_2O ,

o efeito do autoalargamento espectral deve ser considerado. Isso implica que, pelo menos teoricamente, o espectro deveria ser gerado para cada valor assumido pela concentração de H_2O . Na prática, gera-se o espectro para alguns valores de Y_w e aplica-se interpolação linear. Neste trabalho, o espectro foi gerado para $Y_w = 0,01, 0,1, 0,2, 0,4, 0,6$ e $1,0$. Toda vez que a fração molar está entre algum desses valores, é aplicada uma interpolação linear. Os valores de Y_w utilizados neste trabalho são os mesmos empregados por André e Vaillon, 2010.

A Figura A.2 compara duas soluções para 10 % dióxido de carbono. A solução em linha cheia foi obtida com espectro gerado diretamente para $Y_c = 0,1$. Na outra solução (linha pontilhada), a concentração de 10 % foi obtida multiplicando-se o espectro de $Y_c = 1$ por 0,1 (Espectros representados na Figura A.4). Constata-se que a aproximação linear é adequada para o dióxido de carbono, pois os erros máximo e médio entre as duas soluções para o termo fonte radiativo são, respectivamente, 0,3 % e 0,1 %.

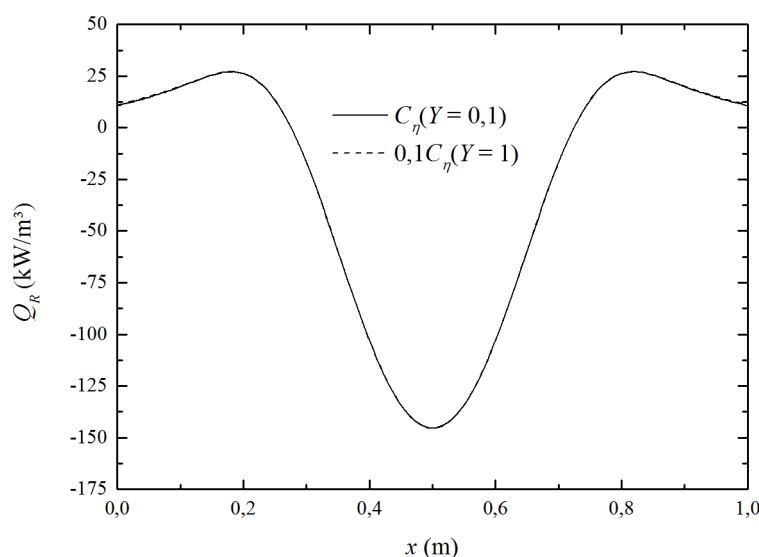


Figura A.2 – Efeito do autoalargamento espectral para CO_2 .

Na Figura A.3, as soluções foram obtidas para 20 % de vapor de água. A solução em linha cheia foi alcançada com espectro gerado diretamente para $Y_w = 0,2$. Na outra solução (linha pontilhada), a concentração de 20 % foi obtida multiplicando-se o espectro de $Y_w = 1$ por 0,2 (Espectros representados na Figura A.5). A partir da Figura A.3, constata-se que aproximação linear não é adequada para a seção transversal de absorção de vapor de água, pois provoca erros máximo e médio no termo fonte radiativo de 5,3 % e 4 %, respectivamente. Esse comportamento ocorre devido ao forte autoalargamento espectral

acarretado pelo momento de dipolo permanente da molécula de água [Denison e Webb, 1995b].

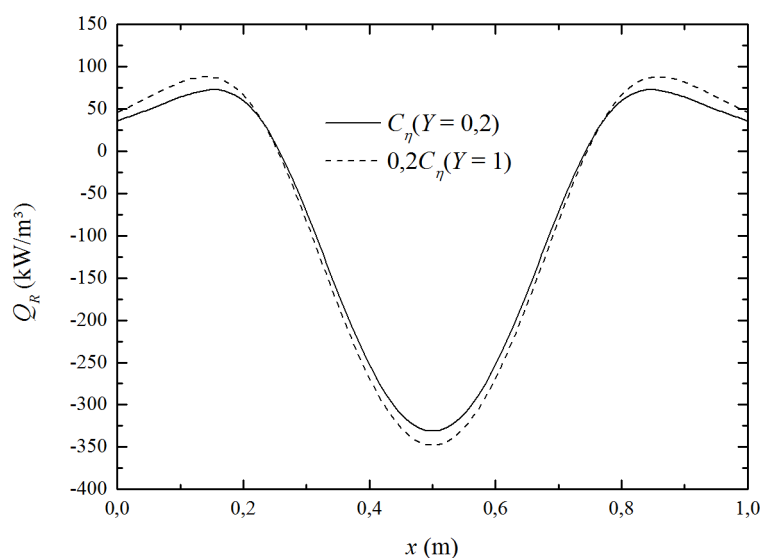


Figura A.3 – Efeito do autoalargamento espectral para H₂O.

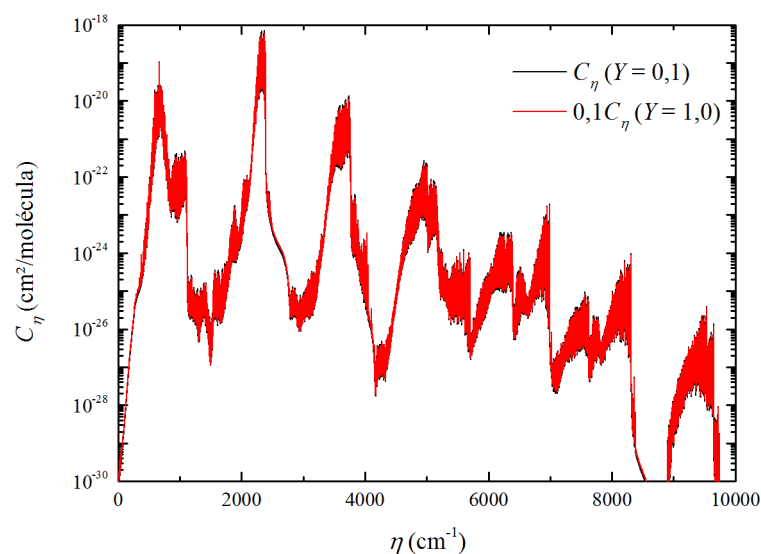


Figura A.4 – Comparação entre dois espectros para CO₂.

Se a solução LBL for executada com $N_p = 150 \times 10^3$, as matrizes ficam muito grandes, pois para uma das 22 temperaturas ($400 \text{ K} < T < 2500 \text{ K}$, $\Delta T_p = 100 \text{ K}$) tem-se 150×10^3 valores de C_η . Isso é ainda mais crítico em problemas que envolvem vapor de água, pois, nesse caso, C_η é obtido em cada uma das 22 temperaturas para 6 valores de Y_w ($Y_w = 0,01, 0,1, 0,2, 0,4, 0,6$ e $1,0$). Para evitar *overflow* nas matrizes, outra aproximação é necessária. Define-se um valor médio para a seção transversal de absorção \bar{C}_η dentro de um intervalo

$\Delta\eta_p$. Neste trabalho, o valor médio foi calculado através do Teorema do Valor Médio para integrais.

$$\bar{C}_\eta = \frac{1}{\Delta\eta_p} \int_{\eta_1}^{\eta_2} C_\eta(T) d\eta, \quad \Delta\eta_p = \eta_2 - \eta_1 \quad (\text{A.3})$$

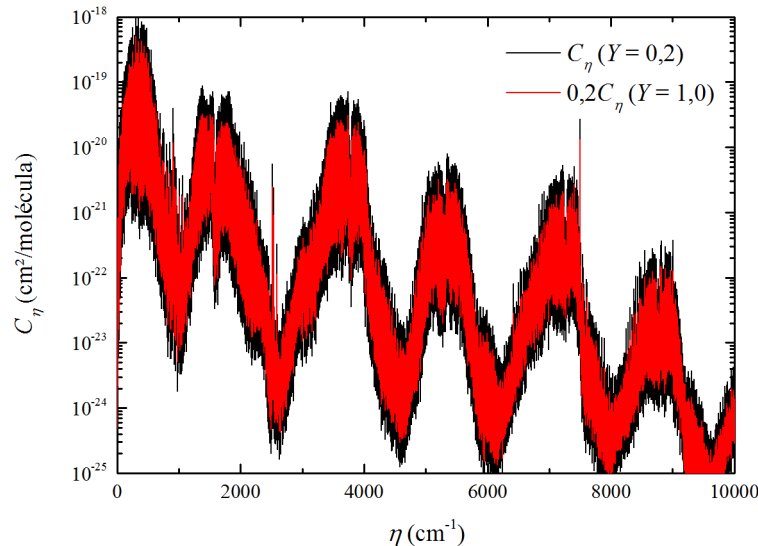


Figura A.5 – Comparação entre dois espectros para H₂O.

Na avaliação do parâmetro $\Delta\eta_p$ (apresentado na Equação A.3), considerou-se um gás confinado entre duas paredes negras separadas por uma distância $L = 1$ m. A região entre as placas é preenchida com 20 % de vapor de água e 80 % de ar (ou outro gás inerte, tal como nitrogênio). A pressão total é 1,0 atm. O termo fonte radiativo foi calculado considerando-se um meio não isotérmico (Equação A.2) e homogêneo com $Y_w = 0,2$. A Figura A.6 mostra soluções para diversos valores de $\Delta\eta_p$ (1,00, 0,50, 0,33, 0,25, 0,20 cm^{-1}). O erro máximo entre as soluções com $\Delta\eta_p = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ e $0,20 \text{ cm}^{-1}$ é de 1,2 %, com erro médio de 0,6 %. Portanto, neste trabalho, será utilizado $\Delta\eta_p = 0,25 \text{ cm}^{-1}$. Pode-se chegar à mesma conclusão se os cálculos forem executados para CO₂.

A Figura A.7 compara a solução SLW obtida através do espectro gerado neste trabalho com outra que utilizou as correlações propostas por Pearson *et al.*, 2013, para vapor de água (Seção 3.3.2). Foi considerado um meio não isotérmico (Equação A.2) e homogêneo ($Y_w = 0,2$). O erro máximo entre as duas soluções SLW para o termo fonte radiativo é de 1,8 %, enquanto que o erro médio é de 1 %. Esse resultado demonstra boa concordância entre os dados espectrais obtidos neste trabalho com as correlações propostas por Pearson *et al.*, 2013.

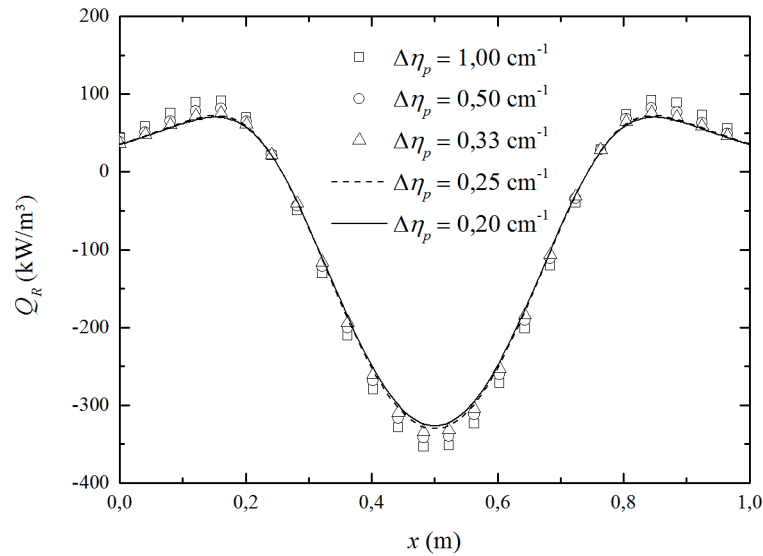


Figura A.6 – Avaliação do parâmetro $\Delta\eta_p$ (Equação A.2, $Y_w = 0,2$).

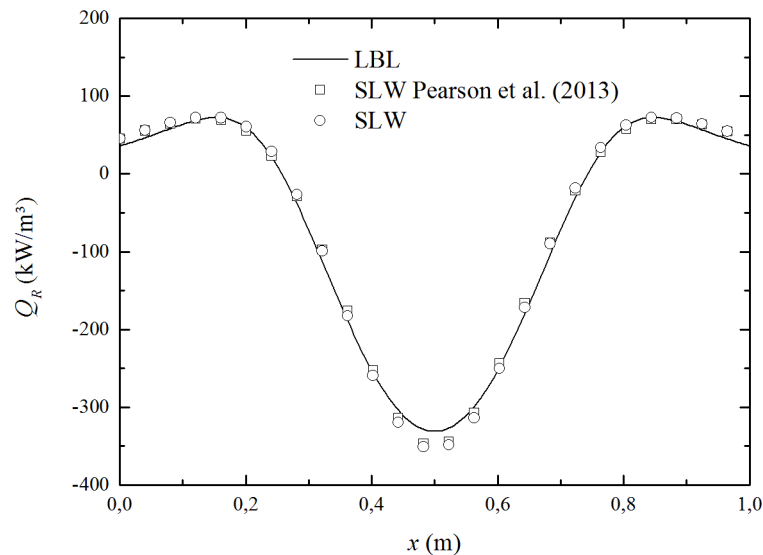


Figura A.7 – Termo fonte radiativo (Equação A.2 com $Y_w = 0,2$).

O resultado a seguir (Figura A.8), foi obtido por Solovjov e Webb, 2010, para um problema no qual um meio unidimensional, preenchido com CO_2 ($Y_c = 0,3$) está sujeito ao seguinte perfil de temperatura:

$$T(x) = 1250 + 500 \cos(5\pi x) \quad (\text{A.4})$$

onde as paredes negras estão separadas por uma distância $L = 0,2$ m. A Figura A.8 mostra que, para esse perfil de temperatura, a solução SLW de Solovjov e Webb, 2010, apresenta

grande desvio em relação ao método LBL. A Figura A.9 mostra o resultado obtido neste trabalho para o caso estudado por Solovjov e Webb, 2010. As duas soluções são muito semelhantes, diferem apenas na magnitude do termo fonte radiativo, pois Solovjov e Webb, 2010, utilizaram uma versão mais antiga do banco de dados HITEMP (HITEMP 1995). Como relatado na literatura [Mauren *et al.*, 2008; Mossi *et al.*, 2012], quando os espectros são construídos a partir de versões diferentes dos bancos de dados, os resultados sempre diferem.

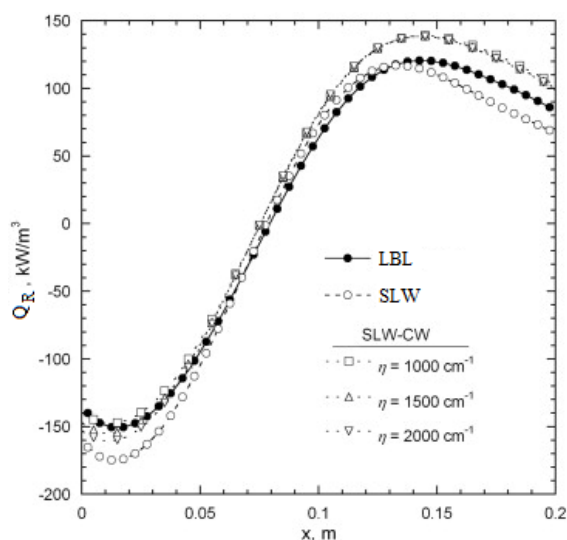


Figura A.8 – Termo fonte radiativo (Equação A.4 com $Y_c = 0,3$) [adaptada de Solovjov e Webb, 2010, HITEMP 1995].

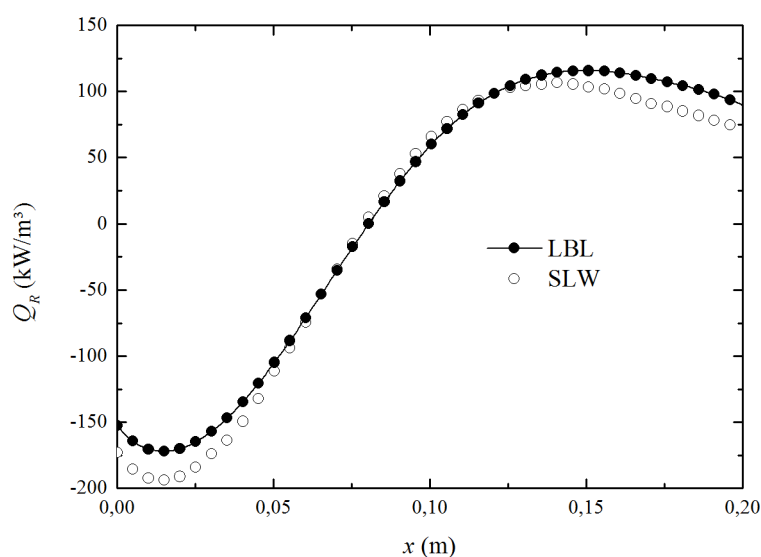


Figura A.9 – Termo fonte radiativo (Equação A.4 com $Y_c = 0,3$, HITEMP 2010).

APÊNDICE B – Coeficientes do modelo NCC-WSGG – CO₂

Tabela B.1 – Coeficientes de emissão para CO₂ na condição de referência ($T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$ – aplicados na Equação 3.81).

j	$\kappa_{p,j,e,ref}$ (atm.m) ⁻¹
1	0,0011
2	0,0042
3	0,0174
4	0,0684
5	0,2805
6	1,0593
7	4,9253
8	15,2740
9	71,6648
10	298,7222

Tabela B.2 – Coeficientes $a_{s,j,k}$ para a fração de energia de corpo negro (aplicados para CO₂ na Equação 3.80 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

k	$j = 1$	2	3	4	5
0	$-0,4395 \times 10^{-1}$	$0,4067 \times 10^{-1}$	$-0,5526 \times 10^{-1}$	$0,7956 \times 10^{-1}$	$0,2520 \times 10^0$
1	$0,4760 \times 10^{-3}$	$-0,7972 \times 10^{-4}$	$0,4256 \times 10^{-3}$	$-0,3130 \times 10^{-3}$	$-0,1555 \times 10^{-3}$
2	$-0,3220 \times 10^{-6}$	$0,3475 \times 10^{-6}$	$-0,3010 \times 10^{-6}$	$0,6649 \times 10^{-6}$	$-0,2335 \times 10^{-6}$
3	$0,9006 \times 10^{-10}$	$-0,2932 \times 10^{-9}$	$0,2603 \times 10^{-10}$	$-0,5053 \times 10^{-9}$	$0,3538 \times 10^{-9}$
4	$-0,1005 \times 10^{-13}$	$0,1003 \times 10^{-12}$	$0,3217 \times 10^{-13}$	$0,1656 \times 10^{-12}$	$-0,1608 \times 10^{-12}$
5	$0,3107 \times 10^{-19}$	$-0,1270 \times 10^{-16}$	$-0,7563 \times 10^{-17}$	$-0,2013 \times 10^{-16}$	$0,2441 \times 10^{-16}$
k	$j = 6$	7	8	9	10
0	$0,1803 \times 10^0$	$0,2424 \times 10^0$	$0,2803 \times 10^0$	$0,3621 \times 10^{-1}$	$-0,6794 \times 10^{-1}$
1	$-0,1995 \times 10^{-3}$	$-0,8394 \times 10^{-3}$	$-0,7551 \times 10^{-3}$	$-0,3463 \times 10^{-4}$	$0,3057 \times 10^{-3}$
2	$0,6501 \times 10^{-7}$	$0,1384 \times 10^{-5}$	$0,9479 \times 10^{-6}$	$0,6223 \times 10^{-7}$	$-0,2558 \times 10^{-6}$
3	$0,2831 \times 10^{-10}$	$-0,1019 \times 10^{-8}$	$-0,6014 \times 10^{-9}$	$-0,6744 \times 10^{-10}$	$0,5227 \times 10^{-10}$
4	$-0,2408 \times 10^{-13}$	$0,3429 \times 10^{-12}$	$0,1864 \times 10^{-12}$	$0,2972 \times 10^{-13}$	$0,1466 \times 10^{-13}$
5	$0,4353 \times 10^{-17}$	$-0,4334 \times 10^{-16}$	$-0,2246 \times 10^{-16}$	$-0,4523 \times 10^{-17}$	$-0,4887 \times 10^{-17}$

Tabela B.3 – Coeficientes $b_{s,j,k}$ para o coeficiente de emissão (aplicados para CO₂ na Equação

3.81 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

k	$j = 1$	2	3	4	5
0	$0,1074 \times 10^1$	$0,9251 \times 10^0$	$0,9738 \times 10^0$	$0,9349 \times 10^0$	$0,1023 \times 10^1$
1	$0,1069 \times 10^1$	$0,4555 \times 10^0$	$0,1417 \times 10^1$	$0,1363 \times 10^1$	$0,1118 \times 10^1$
2	$-0,1048 \times 10^1$	$0,4584 \times 10^1$	$0,2799 \times 10^1$	$0,3717 \times 10^1$	$0,1066 \times 10^1$
3	$0,2266 \times 10^1$	$-0,8098 \times 10^1$	$-0,3834 \times 10^1$	$-0,6567 \times 10^1$	$0,5988 \times 10^0$
4	$0,4360 \times 10^1$	$-0,5619 \times 10^1$	$-0,3016 \times 10^1$	$-0,5208 \times 10^1$	$-0,1633 \times 10^1$
5	$-0,8156 \times 10^1$	$0,1092 \times 10^2$	$0,4638 \times 10^1$	$0,9359 \times 10^1$	$-0,4969 \times 10^0$
k	$j = 6$	7	8	9	10
0	$0,1014 \times 10^1$	$0,1016 \times 10^1$	$0,1003 \times 10^1$	$0,1085 \times 10^1$	$0,1056 \times 10^1$
1	$0,2883 \times 10^1$	$0,2655 \times 10^0$	$0,6484 \times 10^0$	$0,7451 \times 10^0$	$-0,1595 \times 10^1$
2	$0,3310 \times 10^1$	$-0,1157 \times 10^0$	$0,1358 \times 10^1$	$-0,3313 \times 10^1$	$-0,5411 \times 10^0$
3	$-0,5013 \times 10^0$	$0,1011 \times 10^1$	$-0,3169 \times 10^1$	$0,2701 \times 10^1$	$0,2576 \times 10^1$
4	$-0,2641 \times 10^1$	$-0,8176 \times 10^0$	$0,1047 \times 10^1$	$0,1056 \times 10^2$	$0,5296 \times 10^1$
5	$0,4740 \times 10^{-1}$	$-0,5800 \times 10^0$	$0,3857 \times 10^0$	$-0,1317 \times 10^2$	$-0,8112 \times 10^1$

Tabela B.4 – Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para CO₂ na

Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
$j = 1$	0	$0,9872 \times 10^0$	$0,4615 \times 10^{-1}$	$-0,2757 \times 10^0$	$0,6382 \times 10^0$	$-0,7447 \times 10^0$	$0,5118 \times 10^0$
	1	$0,2132 \times 10^0$	$0,2379 \times 10^0$	$0,3263 \times 10^1$	$-0,9222 \times 10^1$	$0,5321 \times 10^1$	$0,1954 \times 10^1$
	2	$0,1460 \times 10^0$	$0,3575 \times 10^1$	$-0,3220 \times 10^1$	$-0,1918 \times 10^2$	$0,3612 \times 10^2$	$-0,1151 \times 10^2$
	3	$-0,1478 \times 10^1$	$-0,9228 \times 10^1$	$-0,2195 \times 10^2$	$0,1053 \times 10^3$	$-0,8362 \times 10^2$	$0,1763 \times 10^2$
	4	$-0,1671 \times 10^0$	$-0,7478 \times 10^1$	$0,2862 \times 10^2$	$-0,5101 \times 10^1$	$-0,2439 \times 10^2$	$0,1138 \times 10^2$
	5	$0,1891 \times 10^1$	$0,1783 \times 10^2$	$0,5946 \times 10^1$	$-0,9370 \times 10^2$	$0,9335 \times 10^2$	$-0,2432 \times 10^2$
$j = 2$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9856 \times 10^0$	$0,5250 \times 10^0$	$-0,1575 \times 10^1$	$0,1667 \times 10^1$	$-0,6700 \times 10^0$	$-0,1594 \times 10^{-1}$
	1	$0,1805 \times 10^0$	$-0,4031 \times 10^1$	$0,9752 \times 10^1$	$-0,9972 \times 10^1$	$0,5262 \times 10^1$	$-0,1298 \times 10^1$
	2	$0,2975 \times 10^0$	$-0,2021 \times 10^2$	$0,3569 \times 10^2$	$-0,2051 \times 10^2$	$0,3458 \times 10^1$	$-0,1401 \times 10^1$
	3	$-0,1480 \times 10^1$	$0,4582 \times 10^2$	$-0,8227 \times 10^2$	$0,6652 \times 10^2$	$-0,3163 \times 10^2$	$0,2837 \times 10^1$
	4	$-0,6267 \times 10^0$	$0,6472 \times 10^2$	$-0,1288 \times 10^3$	$0,8306 \times 10^2$	$-0,2747 \times 10^2$	$0,2560 \times 10^1$
5	$0,2251 \times 10^1$	$-0,1104 \times 10^3$	$0,2051 \times 10^3$	$-0,1681 \times 10^3$	$0,5734 \times 10^2$	$-0,5147 \times 10^1$	

Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para CO₂ na Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
$j = 3$	0	$0,9947 \times 10^0$	$0,5846 \times 10^0$	$-0,1139 \times 10^1$	$0,1105 \times 10^1$	$-0,2585 \times 10^0$	$-0,2519 \times 10^0$
	1	$0,2072 \times 10^{-1}$	$-0,2876 \times 10^1$	$0,6361 \times 10^1$	$-0,5439 \times 10^1$	$0,3984 \times 10^1$	$-0,3315 \times 10^1$
	2	$0,1081 \times 10^0$	$-0,1524 \times 10^2$	$0,2599 \times 10^2$	$-0,1344 \times 10^2$	$-0,6060 \times 10^1$	$0,4147 \times 10^0$
	3	$-0,2412 \times 10^0$	$0,3494 \times 10^2$	$-0,5517 \times 10^2$	$0,3027 \times 10^2$	$-0,2216 \times 10^2$	$0,7088 \times 10^1$
	4	$-0,2277 \times 10^0$	$0,4753 \times 10^2$	$-0,9615 \times 10^2$	$0,6179 \times 10^2$	$-0,1629 \times 10^2$	$0,1647 \times 10^1$
	5	$0,4294 \times 10^0$	$-0,8354 \times 10^2$	$0,1416 \times 10^3$	$-0,1097 \times 10^3$	$0,4652 \times 10^2$	$-0,9645 \times 10^1$
$j = 4$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9725 \times 10^0$	$0,2858 \times 10^1$	$-0,7632 \times 10^1$	$0,8755 \times 10^1$	$-0,4555 \times 10^1$	$0,8810 \times 10^0$
	1	$0,1810 \times 10^0$	$-0,1864 \times 10^2$	$0,4929 \times 10^2$	$-0,5495 \times 10^2$	$0,3096 \times 10^2$	$-0,9031 \times 10^1$
	2	$0,5520 \times 10^0$	$-0,6982 \times 10^2$	$0,1853 \times 10^3$	$-0,1980 \times 10^3$	$0,8862 \times 10^2$	$-0,2022 \times 10^2$
	3	$-0,1690 \times 10^1$	$0,1930 \times 10^3$	$-0,4948 \times 10^3$	$0,5328 \times 10^3$	$-0,2941 \times 10^3$	$0,6033 \times 10^2$
	4	$-0,1229 \times 10^1$	$0,1872 \times 10^3$	$-0,5161 \times 10^3$	$0,5521 \times 10^3$	$-0,2785 \times 10^3$	$0,5608 \times 10^2$
5	$0,2865 \times 10^1$	$-0,3819 \times 10^3$	$0,9897 \times 10^3$	$-0,1105 \times 10^4$	$0,5802 \times 10^3$	$-0,1151 \times 10^3$	
$j = 5$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9963 \times 10^0$	$-0,4525 \times 10^0$	$0,2609 \times 10^1$	$-0,2834 \times 10^1$	$0,1113 \times 10^1$	$-0,6220 \times 10^{-1}$
	1	$-0,3790 \times 10^{-1}$	$0,6139 \times 10^0$	$-0,1399 \times 10^2$	$0,1881 \times 10^2$	$-0,7455 \times 10^1$	$-0,1395 \times 10^1$
	2	$0,6272 \times 10^{-1}$	$0,3658 \times 10^0$	$-0,5185 \times 10^2$	$0,7863 \times 10^2$	$-0,5204 \times 10^2$	$0,5092 \times 10^1$
	3	$0,2303 \times 10^0$	$-0,1423 \times 10^1$	$0,1510 \times 10^3$	$-0,2129 \times 10^3$	$0,8619 \times 10^2$	$-0,1510 \times 10^2$
	4	$-0,1271 \times 10^0$	$0,6128 \times 10^1$	$0,1312 \times 10^3$	$-0,2237 \times 10^3$	$0,1200 \times 10^3$	$-0,2084 \times 10^2$
5	$-0,2655 \times 10^0$	$-0,9839 \times 10^1$	$-0,3024 \times 10^3$	$0,4030 \times 10^3$	$-0,2037 \times 10^3$	$0,3847 \times 10^2$	
$j = 6$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9946 \times 10^0$	$0,1480 \times 10^0$	$0,1526 \times 10^0$	$-0,3557 \times 10^0$	$0,5492 \times 10^0$	$-0,4719 \times 10^0$
	1	$-0,1108 \times 10^{-1}$	$0,5208 \times 10^{-1}$	$-0,2236 \times 10^1$	$0,5807 \times 10^1$	$-0,3089 \times 10^1$	$-0,2029 \times 10^1$
	2	$0,1044 \times 10^0$	$-0,6572 \times 10^1$	$0,1961 \times 10^1$	$0,1340 \times 10^2$	$-0,2312 \times 10^2$	$0,4245 \times 10^1$
	3	$-0,1160 \times 10^{-1}$	$0,1108 \times 10^2$	$0,1625 \times 10^2$	$-0,6199 \times 10^2$	$0,2849 \times 10^2$	$-0,2704 \times 10^1$
	4	$-0,2209 \times 10^0$	$0,1512 \times 10^2$	$-0,1390 \times 10^2$	$-0,3123 \times 10^2$	$0,3505 \times 10^2$	$-0,8918 \times 10^1$
5	$0,1179 \times 10^0$	$-0,2674 \times 10^2$	$-0,1904 \times 10^2$	$0,7951 \times 10^2$	$-0,5404 \times 10^2$	$0,1028 \times 10^2$	
$j = 7$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9732 \times 10^0$	$-0,2530 \times 10^0$	$0,5026 \times 10^1$	$-0,8330 \times 10^1$	$0,5408 \times 10^1$	$-0,1384 \times 10^1$
	1	$0,1853 \times 10^0$	$0,1555 \times 10^1$	$-0,2785 \times 10^2$	$0,4710 \times 10^2$	$-0,3388 \times 10^2$	$0,9931 \times 10^1$
	2	$0,5361 \times 10^0$	$0,9059 \times 10^1$	$-0,1298 \times 10^3$	$0,2018 \times 10^3$	$-0,1221 \times 10^3$	$0,3120 \times 10^2$
3	$-0,1706 \times 10^1$	$-0,2698 \times 10^2$	$0,3117 \times 10^3$	$-0,5035 \times 10^3$	$0,3305 \times 10^3$	$-0,7111 \times 10^2$	

Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para CO₂ na Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
$j = 7$	4	$-0,1156 \times 10^1$	$-0,1274 \times 10^2$	$0,3623 \times 10^3$	$-0,6007 \times 10^3$	$0,3979 \times 10^3$	$-0,9261 \times 10^2$
	5	$0,2816 \times 10^1$	$0,3902 \times 10^2$	$-0,6571 \times 10^3$	$0,1117 \times 10^4$	$-0,7185 \times 10^3$	$0,1600 \times 10^3$
$j = 8$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9963 \times 10^0$	$-0,3503 \times 10^0$	$0,5456 \times 10^0$	$-0,7987 \times 10^{-1}$	$-0,5240 \times 10^0$	$0,3462 \times 10^0$
	1	$-0,7434 \times 10^{-1}$	$0,5423 \times 10^0$	$-0,1860 \times 10^1$	$0,2523 \times 10^1$	$0,1257 \times 10^1$	$-0,3533 \times 10^1$
	2	$0,4973 \times 10^{-1}$	$-0,4652 \times 10^0$	$0,3983 \times 10^1$	$0,4059 \times 10^0$	$-0,1074 \times 10^2$	$-0,2004 \times 10^1$
	3	$0,4739 \times 10^0$	$0,2928 \times 10^1$	$0,6497 \times 10^1$	$-0,2502 \times 10^2$	$-0,1110 \times 10^2$	$0,7664 \times 10^1$
	4	$-0,8195 \times 10^{-1}$	$-0,8957 \times 10^0$	$-0,1293 \times 10^2$	$-0,9764 \times 10^1$	$0,8678 \times 10^1$	$0,1099 \times 10^1$
	5	$-0,6115 \times 10^0$	$-0,5833 \times 10^1$	$-0,1396 \times 10^2$	$0,1766 \times 10^2$	$0,7244 \times 10^1$	$-0,6487 \times 10^1$
$j = 9$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9995 \times 10^0$	$0,1826 \times 10^0$	$-0,3431 \times 10^0$	$0,4222 \times 10^0$	$-0,2865 \times 10^0$	$0,3768 \times 10^{-1}$
	1	$-0,3735 \times 10^{-1}$	$-0,4762 \times 10^0$	$0,4656 \times 10^0$	$0,1177 \times 10^1$	$-0,2500 \times 10^1$	$0,9939 \times 10^0$
	2	$0,2872 \times 10^{-1}$	$-0,4912 \times 10^1$	$0,1282 \times 10^2$	$-0,1692 \times 10^2$	$0,8849 \times 10^1$	$-0,1140 \times 10^1$
	3	$0,1983 \times 10^0$	$0,1254 \times 10^2$	$-0,2655 \times 10^2$	$0,1981 \times 10^2$	$-0,2353 \times 10^1$	$-0,1051 \times 10^1$
	4	$-0,5461 \times 10^{-1}$	$0,2314 \times 10^1$	$-0,1215 \times 10^2$	$0,2005 \times 10^2$	$-0,1118 \times 10^2$	$0,1870 \times 10^1$
	5	$-0,2309 \times 10^0$	$-0,1313 \times 10^2$	$0,3160 \times 10^2$	$-0,2801 \times 10^2$	$0,8186 \times 10^1$	$-0,9646 \times 10^{-1}$
$j = 10$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9993 \times 10^0$	$0,8359 \times 10^{-1}$	$-0,1569 \times 10^0$	$0,6349 \times 10^{-1}$	$-0,5728 \times 10^0$	$0,7275 \times 10^0$
	1	$0,6531 \times 10^{-1}$	$-0,2172 \times 10^0$	$0,1059 \times 10^1$	$-0,4231 \times 10^1$	$0,2895 \times 10^1$	$0,2242 \times 10^1$
	2	$-0,6129 \times 10^{-2}$	$-0,8825 \times 10^0$	$0,1149 \times 10^1$	$-0,7578 \times 10^1$	$0,1846 \times 10^2$	$-0,3214 \times 10^1$
	3	$-0,4157 \times 10^0$	$0,2706 \times 10^0$	$-0,1568 \times 10^2$	$0,4730 \times 10^2$	$-0,2006 \times 10^2$	$0,2212 \times 10^1$
	4	$0,2554 \times 10^{-1}$	$0,4127 \times 10^0$	$0,8276 \times 10^1$	$0,1300 \times 10^2$	$-0,1663 \times 10^2$	$0,4437 \times 10^1$
	5	$0,5213 \times 10^0$	$0,2756 \times 10^1$	$0,2176 \times 10^2$	$-0,4618 \times 10^2$	$0,2898 \times 10^2$	$-0,5623 \times 10^1$

APÊNDICE C – Coeficientes do modelo NCC-WSGG – H₂O

Tabela C.1 – Coeficientes de emissão para H₂O na condição de referência ($T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$ – aplicados na Equação 3.81).

j	$\kappa_{p,j,e,ref}$ (atm.m) ⁻¹
1	0,0013
2	0,0053
3	0,0185
4	0,0743
5	0,2811
6	1,1196
7	4,1601
8	15,6752
9	49,4246
10	240,5829

Tabela C.2 – Coeficientes $a_{s,j,k}$ para a fração de energia de corpo negro (aplicados para H₂O na Equação 3.80 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

k	$j = 1$	2	3	4	5
0	$-0,7436 \times 10^{-2}$	$-0,6581 \times 10^{-2}$	$-0,4015 \times 10^{-2}$	$-0,1809 \times 10^{-1}$	$-0,4581 \times 10^{-1}$
1	$0,4543 \times 10^{-4}$	$0,5437 \times 10^{-4}$	$-0,9462 \times 10^{-4}$	$-0,1473 \times 10^{-4}$	$0,6984 \times 10^{-3}$
2	$-0,9216 \times 10^{-7}$	$-0,1609 \times 10^{-6}$	$0,4514 \times 10^{-6}$	$0,4915 \times 10^{-6}$	$-0,7038 \times 10^{-6}$
3	$0,7491 \times 10^{-10}$	$0,2068 \times 10^{-9}$	$-0,3603 \times 10^{-9}$	$-0,4857 \times 10^{-9}$	$0,3599 \times 10^{-9}$
4	$-0,2230 \times 10^{-13}$	$-0,8937 \times 10^{-13}$	$0,1193 \times 10^{-12}$	$0,1814 \times 10^{-12}$	$-0,9682 \times 10^{-13}$
5	$0,2164 \times 10^{-17}$	$0,1271 \times 10^{-16}$	$-0,1487 \times 10^{-16}$	$-0,2429 \times 10^{-16}$	$0,1056 \times 10^{-16}$
k	$j = 6$	7	8	9	10
0	$-0,2539 \times 10^{-2}$	$0,1688 \times 10^0$	$0,5207 \times 10^0$	$0,2882 \times 10^0$	$0,1033 \times 10^0$
1	$0,1032 \times 10^{-2}$	$0,6948 \times 10^{-3}$	$-0,1129 \times 10^{-2}$	$-0,9055 \times 10^{-3}$	$-0,3569 \times 10^{-3}$
2	$-0,1565 \times 10^{-5}$	$-0,1442 \times 10^{-5}$	$0,1248 \times 10^{-5}$	$0,1203 \times 10^{-5}$	$0,4911 \times 10^{-6}$
3	$0,1078 \times 10^{-8}$	$0,1102 \times 10^{-8}$	$-0,7458 \times 10^{-9}$	$-0,7913 \times 10^{-9}$	$-0,3282 \times 10^{-9}$
4	$-0,3593 \times 10^{-12}$	$-0,3820 \times 10^{-12}$	$0,2252 \times 10^{-12}$	$0,2529 \times 10^{-12}$	$0,1059 \times 10^{-12}$
5	$0,4625 \times 10^{-16}$	$0,4989 \times 10^{-16}$	$-0,2687 \times 10^{-16}$	$-0,3132 \times 10^{-16}$	$-0,1318 \times 10^{-16}$

Tabela C.3 – Coeficientes $b_{s,j,k}$ para o coeficiente de emissão (aplicados para H₂O na Equação

3.81 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

k	$j = 1$	2	3	4	5
0	$0,6310 \times 10^1$	$0,2017 \times 10^1$	$0,1591 \times 10^1$	$0,1091 \times 10^1$	$0,1017 \times 10^1$
1	$-0,2419 \times 10^2$	$-0,3824 \times 10^1$	$-0,1153 \times 10^1$	$0,1431 \times 10^1$	$0,9484 \times 10^0$
2	$-0,1362 \times 10^3$	$-0,2039 \times 10^2$	$-0,1162 \times 10^2$	$-0,1775 \times 10^1$	$-0,9200 \times 10^0$
3	$0,3143 \times 10^3$	$0,6902 \times 10^2$	$0,3908 \times 10^2$	$0,4779 \times 10^1$	$0,3932 \times 10^0$
4	$0,4021 \times 10^3$	$0,5787 \times 10^2$	$0,3326 \times 10^2$	$0,5348 \times 10^1$	$0,1802 \times 10^1$
5	$-0,7031 \times 10^3$	$-0,1284 \times 10^3$	$-0,7392 \times 10^2$	$-0,1099 \times 10^2$	$-0,2305 \times 10^1$
k	$j = 6$	7	8	9	10
0	$0,1013 \times 10^1$	$0,1014 \times 10^1$	$0,1025 \times 10^1$	$0,1049 \times 10^1$	$0,1007 \times 10^1$
1	$0,3013 \times 10^0$	$-0,4293 \times 10^0$	$-0,1277 \times 10^1$	$-0,1723 \times 10^1$	$-0,1517 \times 10^1$
2	$-0,8869 \times 10^0$	$-0,6038 \times 10^0$	$-0,1091 \times 10^0$	$-0,3555 \times 10^0$	$0,5978 \times 10^0$
3	$0,8945 \times 10^{-1}$	$0,7718 \times 10^0$	$0,1806 \times 10^1$	$0,3214 \times 10^1$	$0,8457 \times 10^0$
4	$0,2524 \times 10^1$	$0,1699 \times 10^1$	$0,1165 \times 10^1$	$0,2724 \times 10^1$	$-0,4921 \times 10^0$
5	$-0,2574 \times 10^1$	$-0,2320 \times 10^1$	$-0,2979 \times 10^1$	$-0,5991 \times 10^1$	$-0,3749 \times 10^0$

Tabela C.4 – Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para H₂O na

Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
$j = 1$	0	$0,8817 \times 10^0$	$0,9067 \times 10^0$	$-0,3978 \times 10^0$	$-0,6350 \times 10^0$	$-0,9734 \times 10^0$	$0,1313 \times 10^1$
	1	$-0,2139 \times 10^0$	$0,6653 \times 10^1$	$-0,2660 \times 10^2$	$0,3048 \times 10^2$	$-0,1008 \times 10^2$	$-0,5310 \times 10^0$
	2	$0,3464 \times 10^1$	$-0,5101 \times 10^2$	$0,1189 \times 10^3$	$-0,1223 \times 10^3$	$0,3105 \times 10^2$	$0,2052 \times 10^2$
	3	$-0,3572 \times 10^1$	$0,4409 \times 10^2$	$-0,8984 \times 10^2$	$0,1815 \times 10^2$	$0,6052 \times 10^2$	$0,9020 \times 10^1$
	4	$-0,5740 \times 10^1$	$0,7942 \times 10^2$	$-0,1879 \times 10^3$	$0,2422 \times 10^3$	$-0,1555 \times 10^2$	$-0,2648 \times 10^2$
	5	$0,6860 \times 10^1$	$-0,8644 \times 10^2$	$0,2340 \times 10^3$	$-0,7709 \times 10^2$	$-0,2703 \times 10^2$	$0,2912 \times 10^1$
	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
$j = 2$	0	$0,9534 \times 10^0$	$0,2248 \times 10^1$	$-0,1213 \times 10^2$	$0,2251 \times 10^2$	$-0,1807 \times 10^2$	$0,5653 \times 10^1$
	1	$0,1070 \times 10^1$	$-0,2507 \times 10^2$	$0,1086 \times 10^3$	$-0,1831 \times 10^3$	$0,1237 \times 10^3$	$-0,2304 \times 10^2$
	2	$0,9995 \times 10^{-1}$	$-0,3753 \times 10^2$	$0,2291 \times 10^3$	$-0,4881 \times 10^3$	$0,4307 \times 10^3$	$-0,1191 \times 10^3$
	3	$-0,6787 \times 10^1$	$0,2024 \times 10^3$	$-0,1024 \times 10^4$	$0,1871 \times 10^4$	$-0,1365 \times 10^4$	$0,3576 \times 10^3$
	4	$0,1234 \times 10^1$	$0,2101 \times 10^2$	$-0,2006 \times 10^3$	$0,5622 \times 10^3$	$-0,5073 \times 10^3$	$0,1550 \times 10^3$
	5	$0,7049 \times 10^1$	$-0,2273 \times 10^3$	$0,1278 \times 10^4$	$-0,2372 \times 10^4$	$0,1821 \times 10^4$	$-0,4919 \times 10^3$

Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para H₂O na Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

$j = 3$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9312 \times 10^0$	$0,2596 \times 10^1$	$-0,1433 \times 10^2$	$0,2667 \times 10^2$	$-0,2052 \times 10^2$	$0,5526 \times 10^1$
	1	$0,1203 \times 10^1$	$-0,2979 \times 10^2$	$0,1306 \times 10^3$	$-0,2211 \times 10^3$	$0,1562 \times 10^3$	$-0,3778 \times 10^2$
	2	$0,4932 \times 10^0$	$-0,4014 \times 10^2$	$0,2614 \times 10^3$	$-0,5290 \times 10^3$	$0,4405 \times 10^3$	$-0,1267 \times 10^3$
	3	$-0,8128 \times 10^1$	$0,2385 \times 10^3$	$-0,1190 \times 10^4$	$0,2146 \times 10^4$	$-0,1617 \times 10^4$	$0,4317 \times 10^3$
	4	$0,8887 \times 10^0$	$0,1833 \times 10^2$	$-0,2351 \times 10^3$	$0,5617 \times 10^3$	$-0,5063 \times 10^3$	$0,1553 \times 10^3$
	5	$0,8624 \times 10^1$	$-0,2711 \times 10^3$	$0,1460 \times 10^4$	$-0,2715 \times 10^4$	$0,2102 \times 10^4$	$-0,5746 \times 10^3$
$j = 4$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9648 \times 10^0$	$-0,4696 \times 10^{-1}$	$-0,2693 \times 10^1$	$0,4087 \times 10^1$	$-0,2455 \times 10^1$	$0,3106 \times 10^0$
	1	$0,9928 \times 10^{-1}$	$-0,6640 \times 10^1$	$0,2378 \times 10^2$	$-0,3408 \times 10^2$	$0,2879 \times 10^2$	$-0,1353 \times 10^2$
	2	$0,5031 \times 10^0$	$0,6943 \times 10^1$	$0,5572 \times 10^2$	$-0,5382 \times 10^2$	$0,2741 \times 10^2$	$-0,2946 \times 10^2$
	3	$-0,8050 \times 10^0$	$0,4649 \times 10^2$	$-0,1801 \times 10^3$	$0,3154 \times 10^3$	$-0,3171 \times 10^3$	$0,5899 \times 10^2$
	4	$-0,5990 \times 10^0$	$-0,3289 \times 10^2$	$-0,6121 \times 10^2$	$-0,8574 \times 10^2$	$-0,5708 \times 10^2$	$0,1331 \times 10^2$
	5	$0,7849 \times 10^0$	$-0,4691 \times 10^2$	$0,1189 \times 10^3$	$-0,4384 \times 10^3$	$0,2960 \times 10^3$	$-0,7560 \times 10^2$
$j = 5$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,1003 \times 10^1$	$-0,9461 \times 10^{-1}$	$-0,1534 \times 10^0$	$-0,4380 \times 10^{-1}$	$0,1676 \times 10^0$	$-0,7368 \times 10^{-2}$
	1	$-0,3251 \times 10^{-1}$	$-0,1035 \times 10^1$	$0,4191 \times 10^0$	$0,3227 \times 10^0$	$0,1934 \times 10^1$	$-0,1868 \times 10^1$
	2	$-0,5681 \times 10^{-1}$	$0,2395 \times 10^1$	$0,6173 \times 10^1$	$0,3931 \times 10^1$	$-0,7438 \times 10^1$	$-0,1905 \times 10^1$
	3	$0,2646 \times 10^0$	$-0,3632 \times 10^0$	$0,6982 \times 10^0$	$-0,5800 \times 10^1$	$-0,5160 \times 10^1$	$-0,4584 \times 10^1$
	4	$0,9901 \times 10^{-1}$	$-0,2090 \times 10^1$	$-0,2079 \times 10^2$	$-0,6039 \times 10^0$	$-0,1337 \times 10^2$	$0,1765 \times 10^1$
	5	$-0,3781 \times 10^0$	$-0,4994 \times 10^0$	$0,3172 \times 10^1$	$-0,2751 \times 10^2$	$0,4371 \times 10^1$	$0,2406 \times 10^1$
$j = 6$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9991 \times 10^0$	$-0,7593 \times 10^{-2}$	$-0,7493 \times 10^{-1}$	$-0,3739 \times 10^{-1}$	$0,5630 \times 10^{-1}$	$0,2624 \times 10^{-1}$
	1	$-0,9238 \times 10^{-2}$	$-0,1056 \times 10^1$	$0,3555 \times 10^0$	$0,1048 \times 10^0$	$0,1123 \times 10^1$	$-0,1038 \times 10^1$
	2	$0,1651 \times 10^{-1}$	$0,5491 \times 10^{-1}$	$0,2605 \times 10^1$	$0,4032 \times 10^1$	$-0,5646 \times 10^1$	$-0,6840 \times 10^0$
	3	$0,6190 \times 10^{-1}$	$0,2519 \times 10^1$	$0,4891 \times 10^1$	$-0,1112 \times 10^2$	$0,1056 \times 10^0$	$-0,2571 \times 10^1$
	4	$-0,3393 \times 10^{-1}$	$0,5524 \times 10^1$	$-0,2067 \times 10^2$	$0,2931 \times 10^1$	$-0,5866 \times 10^1$	$0,5322 \times 10^0$
	5	$-0,7596 \times 10^{-1}$	$-0,1028 \times 10^2$	$0,6099 \times 10^1$	$-0,1085 \times 10^2$	$-0,2827 \times 10^0$	$0,1804 \times 10^1$
$j = 7$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9976 \times 10^0$	$-0,9355 \times 10^{-1}$	$0,1944 \times 10^{-1}$	$0,2957 \times 10^{-1}$	$0,1479 \times 10^0$	$-0,1861 \times 10^0$
	1	$-0,2120 \times 10^{-3}$	$-0,5569 \times 10^0$	$0,4525 \times 10^0$	$0,5213 \times 10^0$	$-0,3393 \times 10^{-1}$	$-0,1048 \times 10^1$
	2	$0,3765 \times 10^{-1}$	$0,1695 \times 10^1$	$-0,3534 \times 10^0$	$0,3114 \times 10^1$	$-0,5389 \times 10^1$	$-0,1073 \times 10^1$
	3	$-0,1276 \times 10^{-1}$	$-0,8308 \times 10^0$	$0,6650 \times 10^1$	$-0,1167 \times 10^2$	$-0,2972 \times 10^1$	$-0,7164 \times 10^0$

Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados para H₂O na Equação 3.83 – $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

$j = 7$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	4	$-0,6910 \times 10^{-1}$	$0,1353 \times 10^1$	$-0,8413 \times 10^1$	$-0,8582 \times 10^1$	$0,1028 \times 10^1$	$0,1555 \times 10^0$
	5	$0,3092 \times 10^{-1}$	$-0,3779 \times 10^1$	$-0,8536 \times 10^1$	$0,3996 \times 10^1$	$-0,2068 \times 10^1$	$0,1177 \times 10^1$
$j = 8$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9987 \times 10^0$	$-0,5052 \times 10^{-1}$	$0,1067 \times 10^0$	$-0,1061 \times 10^0$	$0,1224 \times 10^0$	$-0,8635 \times 10^{-1}$
	1	$0,2530 \times 10^{-1}$	$-0,2032 \times 10^0$	$0,1529 \times 10^0$	$-0,2327 \times 10^0$	$0,2792 \times 10^0$	$-0,2172 \times 10^0$
	2	$0,2418 \times 10^{-1}$	$0,2496 \times 10^1$	$-0,4860 \times 10^1$	$0,4397 \times 10^1$	$-0,1612 \times 10^1$	$-0,9791 \times 10^{-1}$
	3	$-0,1969 \times 10^0$	$-0,5129 \times 10^1$	$0,7925 \times 10^1$	$-0,4008 \times 10^1$	$-0,8796 \times 10^0$	$0,6271 \times 10^0$
	4	$-0,4345 \times 10^{-1}$	$-0,2140 \times 10^1$	$0,1034 \times 10^2$	$-0,1366 \times 10^2$	$0,7118 \times 10^1$	$-0,1161 \times 10^1$
	5	$0,2786 \times 10^0$	$0,6632 \times 10^1$	$-0,1638 \times 10^2$	$0,1614 \times 10^2$	$-0,6187 \times 10^1$	$0,7738 \times 10^0$
$j = 9$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9994 \times 10^0$	$-0,1685 \times 10^0$	$0,1699 \times 10^0$	$-0,1224 \times 10^0$	$-0,3969 \times 10^{-1}$	$0,1013 \times 10^0$
	1	$0,3798 \times 10^{-1}$	$-0,1038 \times 10^0$	$0,7264 \times 10^0$	$-0,1593 \times 10^1$	$0,1476 \times 10^0$	$0,1305 \times 10^1$
	2	$0,8388 \times 10^{-2}$	$0,2405 \times 10^1$	$-0,3207 \times 10^1$	$-0,2451 \times 10^1$	$0,7922 \times 10^1$	$-0,5879 \times 10^0$
	3	$-0,2646 \times 10^0$	$-0,4130 \times 10^1$	$-0,4270 \times 10^1$	$0,1889 \times 10^2$	$-0,5066 \times 10^1$	$0,7768 \times 10^0$
	4	$-0,1132 \times 10^{-1}$	$-0,5198 \times 10^1$	$0,1517 \times 10^2$	$-0,2160 \times 10^1$	$-0,1645 \times 10^1$	$0,3864 \times 10^0$
	5	$0,3521 \times 10^0$	$0,1006 \times 10^2$	$-0,2031 \times 10^1$	$-0,6389 \times 10^1$	$0,4753 \times 10^1$	$-0,1228 \times 10^1$
$j = 10$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9994 \times 10^0$	$-0,9850 \times 10^{-2}$	$-0,1849 \times 10^{-2}$	$0,2069 \times 10^{-1}$	$-0,1776 \times 10^{-1}$	$0,5409 \times 10^{-2}$
	1	$0,1009 \times 10^{-1}$	$0,2005 \times 10^{-1}$	$0,1368 \times 10^0$	$-0,2454 \times 10^0$	$-0,6881 \times 10^{-1}$	$0,2302 \times 10^0$
	2	$0,8680 \times 10^{-2}$	$0,2562 \times 10^0$	$-0,1955 \times 10^0$	$-0,1241 \times 10^1$	$0,2006 \times 10^1$	$-0,4360 \times 10^0$
	3	$-0,7371 \times 10^{-1}$	$0,1165 \times 10^0$	$-0,2423 \times 10^1$	$0,5761 \times 10^1$	$-0,3220 \times 10^1$	$0,6194 \times 10^0$
	4	$-0,1451 \times 10^{-1}$	$-0,2489 \times 10^1$	$0,5602 \times 10^1$	$-0,3591 \times 10^1$	$0,6153 \times 10^0$	$0,9201 \times 10^{-1}$
	5	$0,1008 \times 10^0$	$0,2559 \times 10^1$	$-0,2583 \times 10^1$	$-0,5246 \times 10^0$	$0,1663 \times 10^1$	$-0,5297 \times 10^0$

APÊNDICE D – Coeficientes do modelo NCC-WSGG – mistura de CO₂ e H₂O

Tabela D.1 – Coeficientes de emissão na condição de referência ($p_w/p_c = 2$, $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$ – aplicados na Equação 3.81).

j	$\kappa_{p,j,e,ref}$ (atm.m) ⁻¹
1	0,0014
2	0,0052
3	0,0183
4	0,0737
5	0,2843
6	1,1124
7	4,1984
8	15,8791
9	80,1511
10	162,8259

Tabela D.2 – Coeficientes $a_{s,j,k}$ para a fração de energia de corpo negro (aplicados na Equação 3.80 – $p_w/p_c = 2$, $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

k	$j = 1$	2	3	4	5
0	$-0,9341 \times 10^{-2}$	$-0,5089 \times 10^{-2}$	$-0,5962 \times 10^{-2}$	$0,1861 \times 10^{-1}$	$0,3582 \times 10^{-1}$
1	$0,5917 \times 10^{-4}$	$0,4647 \times 10^{-4}$	$-0,1213 \times 10^{-3}$	$-0,2552 \times 10^{-3}$	$0,4646 \times 10^{-3}$
2	$-0,1263 \times 10^{-6}$	$-0,1521 \times 10^{-6}$	$0,5983 \times 10^{-6}$	$0,8259 \times 10^{-6}$	$-0,6694 \times 10^{-6}$
3	$0,1101 \times 10^{-9}$	$0,2155 \times 10^{-9}$	$-0,5204 \times 10^{-9}$	$-0,6733 \times 10^{-9}$	$0,5111 \times 10^{-9}$
4	$-0,3633 \times 10^{-13}$	$-0,9685 \times 10^{-13}$	$0,1844 \times 10^{-12}$	$0,2287 \times 10^{-12}$	$-0,1907 \times 10^{-12}$
5	$0,4091 \times 10^{-17}$	$0,1409 \times 10^{-16}$	$-0,2405 \times 10^{-16}$	$-0,2873 \times 10^{-16}$	$0,2666 \times 10^{-16}$
k	$j = 6$	7	8	9	10
0	$-0,1335 \times 10^0$	$0,2531 \times 10^0$	$0,6105 \times 10^0$	$0,1900 \times 10^0$	$0,4660 \times 10^{-1}$
1	$0,1773 \times 10^{-2}$	$0,2444 \times 10^{-3}$	$-0,1508 \times 10^{-2}$	$-0,5486 \times 10^{-3}$	$-0,1493 \times 10^{-3}$
2	$-0,2841 \times 10^{-5}$	$-0,6396 \times 10^{-6}$	$0,1836 \times 10^{-5}$	$0,8783 \times 10^{-6}$	$0,2436 \times 10^{-6}$
3	$0,2007 \times 10^{-8}$	$0,4804 \times 10^{-9}$	$-0,1169 \times 10^{-8}$	$-0,6853 \times 10^{-9}$	$-0,1893 \times 10^{-9}$
4	$-0,6691 \times 10^{-12}$	$-0,1628 \times 10^{-12}$	$0,3685 \times 10^{-12}$	$0,2478 \times 10^{-12}$	$0,6803 \times 10^{-13}$
5	$0,8526 \times 10^{-16}$	$0,2100 \times 10^{-16}$	$-0,4529 \times 10^{-16}$	$-0,3348 \times 10^{-16}$	$-0,9144 \times 10^{-17}$

Tabela D.3 – Coeficientes $b_{s,j,k}$ para o coeficiente de emissão (aplicados na Equação 3.81 – $p_w/p_c = 2, T_{ref} = 1400 \text{ K}, n_g = 10$).

k	$j = 1$	2	3	4	5
0	$0,6142 \times 10^1$	$0,2963 \times 10^1$	$0,1622 \times 10^1$	$0,1658 \times 10^1$	$0,1005 \times 10^1$
1	$-0,2414 \times 10^2$	$-0,1060 \times 10^2$	$-0,1784 \times 10^1$	$-0,2760 \times 10^1$	$0,8164 \times 10^0$
2	$-0,1305 \times 10^3$	$-0,4380 \times 10^2$	$-0,1293 \times 10^2$	$-0,1539 \times 10^2$	$-0,4104 \times 10^0$
3	$0,3082 \times 10^3$	$0,1307 \times 10^3$	$0,3993 \times 10^2$	$0,4289 \times 10^2$	$-0,6355 \times 10^0$
4	$0,3764 \times 10^3$	$0,1204 \times 10^3$	$0,3785 \times 10^2$	$0,4061 \times 10^2$	$0,1489 \times 10^1$
5	$-0,6722 \times 10^3$	$-0,2522 \times 10^3$	$-0,7917 \times 10^2$	$-0,8399 \times 10^2$	$-0,1163 \times 10^1$
k	$j = 6$	7	8	9	10
0	$0,1016 \times 10^1$	$0,1030 \times 10^1$	$0,1016 \times 10^1$	$0,1025 \times 10^1$	$0,9141 \times 10^0$
1	$0,4946 \times 10^0$	$-0,4678 \times 10^0$	$-0,6978 \times 10^0$	$-0,1071 \times 10^1$	$-0,1803 \times 10^1$
2	$-0,6373 \times 10^0$	$-0,4613 \times 10^0$	$0,1256 \times 10^{-1}$	$-0,5190 \times 10^0$	$0,5324 \times 10^1$
3	$-0,3154 \times 10^{-1}$	$0,1348 \times 10^1$	$0,3633 \times 10^0$	$0,1893 \times 10^1$	$-0,7131 \times 10^1$
4	$0,2621 \times 10^1$	$0,2165 \times 10^1$	$0,1528 \times 10^1$	$0,1587 \times 10^1$	$-0,6391 \times 10^1$
5	$-0,2902 \times 10^1$	$-0,3755 \times 10^1$	$-0,2178 \times 10^1$	$-0,3271 \times 10^1$	$0,1153 \times 10^2$

Tabela D.4 – Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados na Equação 3.83 – $p_w/p_c = 2, T_{ref} = 1400 \text{ K}, n_g = 10$).

	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
$j = 1$	0	$0,8526 \times 10^0$	$0,1800 \times 10^1$	$-0,4580 \times 10^1$	$0,5120 \times 10^1$	$-0,3485 \times 10^1$	$0,1410 \times 10^1$
	1	$0,3431 \times 10^0$	$-0,8515 \times 10^0$	$-0,9682 \times 10^1$	$0,2944 \times 10^2$	$-0,3592 \times 10^2$	$0,1808 \times 10^2$
	2	$0,3572 \times 10^1$	$-0,6306 \times 10^2$	$0,2067 \times 10^3$	$-0,3213 \times 10^3$	$0,2181 \times 10^3$	$-0,3480 \times 10^2$
	3	$-0,6940 \times 10^1$	$0,9961 \times 10^2$	$-0,3132 \times 10^3$	$0,3487 \times 10^3$	$-0,9347 \times 10^2$	$0,1303 \times 10^2$
	4	$-0,5719 \times 10^1$	$0,9473 \times 10^2$	$-0,3128 \times 10^3$	$0,5588 \times 10^3$	$-0,3227 \times 10^3$	$0,6926 \times 10^2$
	5	$0,1094 \times 10^2$	$-0,1559 \times 10^3$	$0,5590 \times 10^3$	$-0,6203 \times 10^3$	$0,3095 \times 10^3$	$-0,5690 \times 10^2$
$j = 2$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9931 \times 10^0$	$0,3993 \times 10^0$	$-0,1585 \times 10^1$	$0,2815 \times 10^1$	$-0,3120 \times 10^1$	$0,1695 \times 10^1$
	1	$0,3547 \times 10^0$	$-0,3997 \times 10^1$	$0,1592 \times 10^2$	$-0,3032 \times 10^2$	$0,1863 \times 10^2$	$0,1793 \times 10^1$
	2	$-0,3678 \times 10^{-1}$	$-0,1374 \times 10^2$	$0,3978 \times 10^2$	$-0,8949 \times 10^2$	$0,9721 \times 10^2$	$-0,2053 \times 10^2$
	3	$-0,2279 \times 10^1$	$0,4180 \times 10^2$	$-0,1914 \times 10^3$	$0,3542 \times 10^3$	$-0,2159 \times 10^3$	$0,5569 \times 10^2$
	4	$0,3736 \times 10^0$	$0,7709 \times 10^1$	$0,1890 \times 10^1$	$0,9508 \times 10^2$	$-0,8319 \times 10^2$	$0,2564 \times 10^2$
5	$0,2581 \times 10^1$	$-0,3805 \times 10^2$	$0,2313 \times 10^3$	$-0,3872 \times 10^3$	$0,2853 \times 10^3$	$-0,7643 \times 10^2$	

Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados na Equação 3.83 – $p_w/p_c = 2$,
 $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

$j = 3$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9852 \times 10^0$	$0,2289 \times 10^0$	$-0,1478 \times 10^1$	$0,2870 \times 10^1$	$-0,2083 \times 10^1$	$0,4612 \times 10^0$
	1	$0,2871 \times 10^0$	$-0,4111 \times 10^1$	$0,1499 \times 10^2$	$-0,2395 \times 10^2$	$0,1365 \times 10^2$	$-0,1221 \times 10^1$
	2	$0,1095 \times 10^0$	$-0,4338 \times 10^1$	$0,2437 \times 10^2$	$-0,6113 \times 10^2$	$0,5986 \times 10^2$	$-0,1712 \times 10^2$
	3	$-0,1911 \times 10^1$	$0,3088 \times 10^2$	$-0,1368 \times 10^3$	$0,2540 \times 10^3$	$-0,1826 \times 10^3$	$0,4526 \times 10^2$
	4	$0,7509 \times 10^{-1}$	$-0,6933 \times 10^1$	$0,1033 \times 10^2$	$0,3069 \times 10^2$	$-0,4835 \times 10^2$	$0,1804 \times 10^2$
$j = 4$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9785 \times 10^0$	$0,5495 \times 10^0$	$-0,3663 \times 10^1$	$0,6525 \times 10^1$	$-0,3628 \times 10^1$	$-0,9949 \times 10^{-1}$
	1	$0,2525 \times 10^0$	$-0,8567 \times 10^1$	$0,2937 \times 10^2$	$-0,3787 \times 10^2$	$0,1959 \times 10^2$	$-0,5808 \times 10^1$
	2	$0,1482 \times 10^0$	$-0,4765 \times 10^1$	$0,7343 \times 10^2$	$-0,1445 \times 10^3$	$0,1095 \times 10^3$	$-0,3874 \times 10^2$
	3	$-0,1533 \times 10^1$	$0,6459 \times 10^2$	$-0,2730 \times 10^3$	$0,4597 \times 10^3$	$-0,3610 \times 10^3$	$0,8353 \times 10^2$
	4	$0,6991 \times 10^{-1}$	$-0,1245 \times 10^2$	$-0,6873 \times 10^2$	$0,1116 \times 10^3$	$-0,1449 \times 10^3$	$0,4564 \times 10^2$
$j = 5$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,1001 \times 10^1$	$0,4911 \times 10^{-1}$	$-0,1369 \times 10^0$	$0,9380 \times 10^{-1}$	$-0,3268 \times 10^0$	$0,3730 \times 10^0$
	1	$0,6444 \times 10^{-2}$	$-0,1369 \times 10^1$	$0,1524 \times 10^1$	$-0,2378 \times 10^1$	$0,2424 \times 10^1$	$-0,1782 \times 10^0$
	2	$-0,1819 \times 10^{-1}$	$-0,4809 \times 10^1$	$0,1121 \times 10^2$	$-0,1007 \times 10^2$	$0,4636 \times 10^1$	$0,6262 \times 10^0$
	3	$-0,4396 \times 10^{-1}$	$0,8651 \times 10^1$	$-0,2129 \times 10^2$	$0,1703 \times 10^2$	$-0,4381 \times 10^0$	$0,6653 \times 10^0$
	4	$0,3435 \times 10^{-1}$	$0,1684 \times 10^2$	$-0,4410 \times 10^2$	$0,6047 \times 10^2$	$-0,2489 \times 10^2$	$0,4305 \times 10^1$
$j = 6$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9978 \times 10^0$	$-0,5437 \times 10^{-1}$	$0,7895 \times 10^{-1}$	$-0,1308 \times 10^0$	$0,8554 \times 10^{-1}$	$-0,1165 \times 10^{-1}$
	1	$-0,1612 \times 10^{-1}$	$-0,8438 \times 10^0$	$-0,5349 \times 10^0$	$0,1658 \times 10^1$	$0,1085 \times 10^0$	$-0,1219 \times 10^1$
	2	$0,3706 \times 10^{-1}$	$0,6027 \times 10^{-1}$	$0,1217 \times 10^1$	$0,6697 \times 10^1$	$-0,1053 \times 10^2$	$0,7974 \times 10^0$
	3	$0,1014 \times 10^0$	$0,2372 \times 10^1$	$0,1137 \times 10^2$	$-0,2783 \times 10^2$	$0,8279 \times 10^1$	$-0,2512 \times 10^1$
	4	$-0,7036 \times 10^{-1}$	$0,3744 \times 10^1$	$-0,1737 \times 10^2$	$-0,4200 \times 10^1$	$0,3651 \times 10^1$	$-0,1416 \times 10^1$
$j = 7$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9971 \times 10^0$	$-0,1159 \times 10^0$	$0,1028 \times 10^0$	$0,1892 \times 10^{-1}$	$0,1909 \times 10^0$	$-0,2678 \times 10^0$
	1	$0,2088 \times 10^{-2}$	$-0,1990 \times 10^0$	$0,1219 \times 10^0$	$0,1123 \times 10^1$	$-0,7899 \times 10^0$	$-0,1014 \times 10^1$
	2	$0,4309 \times 10^{-1}$	$0,2454 \times 10^1$	$-0,2008 \times 10^1$	$0,2388 \times 10^1$	$-0,5545 \times 10^1$	$-0,6885 \times 10^0$
	3	$-0,3405 \times 10^{-1}$	$-0,2700 \times 10^1$	$0,7590 \times 10^1$	$-0,1335 \times 10^2$	$-0,2796 \times 10^1$	$0,8714 \times 10^0$

Coeficientes $d_{s,j,k,l}$ para o coeficiente de absorção (aplicados na Equação 3.83 – $p_w/p_c = 2$,
 $T_{ref} = 1400$ K, $n_g = 10$).

$j = 7$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	4	$-0,7484 \times 10^{-1}$	$-0,2969 \times 10^1$	$0,1329 \times 10^1$	$-0,1419 \times 10^2$	$0,6741 \times 10^1$	$-0,4898 \times 10^0$
	5	$0,5923 \times 10^{-1}$	$0,2639 \times 10^1$	$-0,1811 \times 10^2$	$0,1657 \times 10^2$	$-0,4014 \times 10^1$	$0,4040 \times 10^0$
$j = 8$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9991 \times 10^0$	$-0,5093 \times 10^{-1}$	$0,6287 \times 10^{-1}$	$0,2353 \times 10^{-1}$	$0,6036 \times 10^{-1}$	$-0,1242 \times 10^0$
	1	$0,1819 \times 10^{-2}$	$-0,2607 \times 10^0$	$0,2780 \times 10^{-1}$	$0,6608 \times 10^0$	$-0,3605 \times 10^0$	$-0,6282 \times 10^0$
	2	$0,1474 \times 10^{-1}$	$0,1592 \times 10^1$	$-0,1892 \times 10^1$	$0,2147 \times 10^1$	$-0,3724 \times 10^1$	$0,1297 \times 10^0$
	3	$-0,2482 \times 10^{-1}$	$-0,1921 \times 10^1$	$0,5310 \times 10^1$	$-0,9629 \times 10^1$	$0,8004 \times 10^0$	$0,7497 \times 10^0$
	4	$-0,2574 \times 10^{-1}$	$-0,2066 \times 10^1$	$0,2632 \times 10^1$	$-0,7623 \times 10^1$	$0,5526 \times 10^1$	$-0,7307 \times 10^0$
	5	$0,4136 \times 10^{-1}$	$0,2734 \times 10^1$	$-0,1107 \times 10^2$	$0,1379 \times 10^2$	$-0,4466 \times 10^1$	$0,2378 \times 10^0$
$j = 9$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9992 \times 10^0$	$0,6211 \times 10^{-3}$	$-0,1226 \times 10^0$	$0,3592 \times 10^0$	$-0,2125 \times 10^0$	$-0,7731 \times 10^{-1}$
	1	$0,2294 \times 10^{-1}$	$-0,3234 \times 10^0$	$0,1486 \times 10^1$	$-0,1604 \times 10^1$	$-0,3998 \times 10^0$	$0,5547 \times 10^0$
	2	$0,1169 \times 10^{-1}$	$0,1572 \times 10^1$	$-0,1820 \times 10^1$	$-0,2973 \times 10^1$	$0,4206 \times 10^1$	$-0,6977 \times 10^0$
	3	$-0,1629 \times 10^0$	$-0,1208 \times 10^1$	$-0,5323 \times 10^1$	$0,1201 \times 10^2$	$-0,5545 \times 10^1$	$0,8864 \times 10^0$
	4	$-0,2015 \times 10^{-1}$	$-0,2706 \times 10^1$	$0,7654 \times 10^1$	$-0,3240 \times 10^1$	$-0,3982 \times 10^0$	$0,3334 \times 10^0$
	5	$0,2212 \times 10^0$	$0,3028 \times 10^1$	$-0,2456 \times 10^0$	$-0,5100 \times 10^1$	$0,4321 \times 10^1$	$-0,1012 \times 10^1$
$j = 10$	l	$k = 0$	1	2	3	4	5
	0	$0,9931 \times 10^0$	$0,1992 \times 10^0$	$-0,2183 \times 10^0$	$-0,1272 \times 10^0$	$0,2890 \times 10^0$	$-0,6116 \times 10^{-1}$
	1	$0,8399 \times 10^{-1}$	$-0,1015 \times 10^1$	$0,8333 \times 10^0$	$-0,8341 \times 10^{-1}$	$-0,1440 \times 10^0$	$0,4551 \times 10^0$
	2	$0,1252 \times 10^0$	$-0,5671 \times 10^1$	$0,6848 \times 10^1$	$-0,3054 \times 10^1$	$0,1798 \times 10^1$	$-0,7610 \times 10^{-1}$
	3	$-0,6668 \times 10^0$	$0,1141 \times 10^2$	$-0,1342 \times 10^2$	$0,9402 \times 10^1$	$-0,1520 \times 10^1$	$-0,3597 \times 10^0$
	4	$-0,2478 \times 10^0$	$0,1830 \times 10^2$	$-0,2157 \times 10^2$	$0,1114 \times 10^2$	$-0,1480 \times 10^1$	$-0,3646 \times 10^0$
	5	$0,9835 \times 10^0$	$-0,2852 \times 10^2$	$0,3657 \times 10^2$	$-0,1954 \times 10^2$	$0,2554 \times 10^1$	$0,7394 \times 10^0$