

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

MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO MODELAMENTO ESPECTRAL DE
MEIOS PARTICIPANTES ATRAVÉS DA UTILIZAÇÃO DA FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE
ENERGIA DE CORPO NEGRO NAS LINHAS DE ABSORÇÃO

por

André Maurenre

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, agosto de 2007

MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO AO MODELAMENTO ESPECTRAL DE
MEIOS PARTICIPANTES ATRAVÉS DA UTILIZAÇÃO DA FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE
ENERGIA DE CORPO NEGRO NAS LINHAS DE ABSORÇÃO

por

André Maurente
Mestre em Engenharia

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Co-orientador: Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Helcio Rangel Barreto Orlande

Profa. Dra. Ligia Damasceno Ferreira Marczak

Profa. Dra. Liliane Basso Barrichelo

Prof. Dr. Flavio José Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 8 de agosto de 2007.

AGRADECIMENTOS

Ao Francis, pela excelência como orientador e pela minha formação, por tudo que aprendi nos anos de trabalho em comum.

À CAPES, pela bolsa fornecida, possibilitando que eu me dedicasse integralmente à realização da pesquisa.

RESUMO

Neste trabalho, o método de Monte Carlo é aplicado à função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (função distribuição ALB) para considerar o efeito espectral no cálculo da transferência de calor por radiação em meios participantes. A metodologia combina o robusto e flexível método de Monte Carlo com a função distribuição ALB, que incorpora simultaneamente o efeito de um grande número de linhas espectrais. A implementação proposta estabelece uma relação simples e direta entre a função distribuição ALB e a função distribuição cumulativa do método de Monte Carlo, o que facilita a implementação da técnica e proporciona eficiência computacional.

A verificação da metodologia foi realizada através da comparação de seus resultados com uma série de soluções apresentadas na literatura utilizando-se tanto o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais quanto a integração linha-por-linha, considerando meios participantes não-homogêneos e não-isotérmicos constituídos de vapor d'água, dióxido de carbono e espécies não-participantes.

O método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi utilizado na obtenção de vários resultados para avaliar as aproximações relativas ao modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas, de ampla aplicação em problemas de trocas radiantes em meios participantes. Foram consideradas cavidades unidimensionais e cilíndricas contendo meios isotérmicos e não-isotérmicos, homogêneos e não-homogêneos, constituídos de vapor d'água, dióxido de carbono e espécies não-participantes. Para a geometria cilíndrica, as distribuições de temperatura e concentrações das espécies químicas basearam-se em distribuições que podem ser encontradas no interior de câmaras de combustão. A análise mostrou que tanto as aproximações devido às concentrações das espécies químicas quanto aquelas devido ao modelamento do espectro de radiação podem levar a erros consideráveis, demonstrando a importância de se empregar modelos mais sofisticados. Para aumentar a eficiência do método de Monte Carlo, foi também desenvolvido o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, que considera que a energia dos pacotes é distribuída em diferentes comprimentos de onda. Este modelo proporcionou uma redução de quase 50% no tempo computacional para o caso teste proposto.

ABSTRACT

MONTE CARLO METHOD APPLIED TO THE SPECTRAL MODELING OF PARTICIPATING MEDIA USING THE ABSORPTION LINE BLACKBODY DISTRIBUTION FUNCTION

In this work, the Monte Carlo method is applied to the absorption-line-blackbody distribution function (ALB distribution function) to consider the effect of the spectrum in the calculation of radiation heat transfer in participating media. The methodology combines the flexible, robust Monte Carlo method with the ALB distribution function, which simultaneously incorporates a large number of the spectral lines. The proposed implementation establishes a simple, direct relation between the ALB distribution function and the Monte Carlo cumulative distribution function, which makes it easier to implement the technique and leads to computational efficiency.

The verification of the methodology was accomplished with the comparison of the obtained results with a set of solutions that are presented in the literature, as obtained with the weighted-sum-of-gray-gases based on the spectral lines and with the line-by-line integration, considering non-homogeneous and non-isothermal media composed of water vapor, carbon dioxide and non-participating species.

The Monte Carlo method applied to the ALB distribution function was employed to obtain various results to evaluate the approximations that arise from the weighted-sum-of-gray-gases, which is of large application in the radiation heat transfer in participating media. The solutions include both one-dimensional and cylindrical enclosures having isothermal and non-isothermal, homogeneous and non-homogeneous media, composed of water vapor, carbon dioxide and non-participating species. For the cylindrical geometry, the temperature and the concentration distributions were based on distributions that can be found in the interior of combustion chambers. The analysis showed that both the approximations due to the concentrations of the chemical species and due to the modeling of the radiation spectrum can lead to considerable errors, showing the importance of using more sophisticated models. To increase the efficiency of the Monte Carlo method, it was also developed the model of multi-spectral energy bundles, which considers that the energy of the bundles is distributed in the different wavelengths. This model reduced the computational time in 50 % for the proposed test case.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Motivação e Revisão Bibliográfica.....	1
1.2 Objetivos.....	5
1.3 Organização do Texto.....	7
2. TRANSFERÊNCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO EM MEIOS PARTICIPANTES	9
2.1 Fundamentos da Transferência da Calor por Radiação em Meios Participantes.....	9
2.1.1 Absorção da Radiação.....	9
2.1.2 Emissão da Radiação Por um Elemento de Volume de Meio	10
2.1.3 A Equação da Transferência Radiativa.....	12
2.1.4 Mecanismos Físicos Subjacentes aos Processos de Emissão e Absorção de Radiação ...	12
2.2 A Problemática da Transferência de Calor por Radiação em Meios Participantes.....	13
2.3 Modelos e Métodos.....	16
2.3.1 O Modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas.....	17
2.3.2 A Integração Linha-por-Linha (Line-by-Line integration – LBL).....	17
2.3.3 A Distribuição- K	18
2.3.4 O Método K -Correlacionado.....	18
2.3.5 O Método de Distribuição- K Correlacionado para Espectro Completo (FSK).....	19
2.3.6 O Modelo da Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas Baseado nas Linhas Espectrais.....	19
2.3.7 O Modelo do Número de Onda Cumulativo (CW).....	20
3. APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO À FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE ENERGIA DE CORPO NEGRO NAS LINHAS DE ABSORÇÃO.....	21
3.1 Função Distribuição de Energia de Corpo Negro nas Linhas de Absorção	22
3.2 Formulação do Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB.....	29
3.2.1 Processo de Cálculo para Meios Homogêneos e Isotérmicos.....	33
3.2.2 Processo de Cálculo para Meios Não-Homogêneos e Não-Isotérmicos.....	35
3.3 Algumas Vantagens e Desvantagens do Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB.....	39
4. MODELO DOS PACOTES DE ENERGIA MULTI-ESPECTRAIS.....	42
4.1 Emissão de Pacotes de Energia Multi-Espectrais.....	44
4.2 Absorção de Energia no Modelo dos Pacotes de Energia Multi-Espectrais.....	45
4.2.1 Processo de Absorção Contínuo.....	46
4.2.2 Processo de Absorção Discreto Randômico	47

4.3 O Modelo dos Pacotes de Energia Multi-Espectrais no Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB.....	48
5. RESULTADOS.....	50
5.1 Resultados para Validação e Análise do Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB.....	51
5.2 Avaliação de Discrepâncias Relativas às Aproximações Necessárias para a Utilização do Modelo WSGG.....	58
5.2.1 Análise do Efeito da Concentração das Espécies Químicas: Geometria Unidimensional	59
5.2.2 Análise do Efeito da Concentração das Espécies Químicas: Geometria Cilíndrica.....	67
5.2.3 Análise da Hipótese de Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas.....	77
5.2.4 Comparação entre o Modelo WSGG e o Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB.....	84
5.3 Análise do Modelo dos Pacotes de Energia Multi-Espectrais.....	93
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	99
6.1 Conclusões.....	99
6.1 Sugestões Para Futuros Trabalhos.....	104
BIBLIOGRAFIA.....	105
APÊNDICE A: Método de Monte Carlo.....	108
APÊNDICE B: Correlações para a Obtenção da Função Distribuição de Energia de Corpo negro nas Linhas de Absorção (Função distribuição ALB).....	122
APÊNDICE C: Correlações para as Distribuições de Temperatura e Concentrações em uma Cavidade Semelhante a uma Câmara de Combustão Típica.....	127

LISTA DE SÍMBOLOS

Caracteres Romanos

A	área de superfície
A_s	área de uma superfície S
a_λ	coeficiente de absorção espectral
E	energia de um pacote de energia
$E_{b,\eta}$	poder emissivo espectral de corpo negro
E_{dV}	energia de um pacote de energia emitido de um elemento de volume infinitesimal
$E_{P,S}$	energia de um sub-pacote transportado por um pacote de energia multi-espectral
$E_{P,S,j}$	energia do j -ésimo sub-pacote transportado por um pacote de energia multi-espectral
E_P	energia do pacote de energia multi-espectral
f	função frequência
F	função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção
F_A	uma fração da energia total do pacote de energia multi-espectral
$F_{A,S,j}$	fração de energia do j -ésimo sub-pacote em relação a energia total do pacote de energia multi-espectral
I	intensidade de radiação
I_λ	intensidade espectral de radiação
$I_{\lambda,b}$	intensidade espectral de radiação de corpo negro
$I_{\lambda,e}$	intensidade espectral de radiação na emissão
I_j	intensidade de radiação do j -ésimo gas cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas
$I_{j,l}$	intensidade de radiação referente aos j -ésimo e l -ésimo gases cinzas, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais, para meios constituídos por duas espécies participantes.
$I_{\lambda,o}$	intensidade espectral de radiação imediatamente antes de atravessar uma camada de meio participante
J	número de gases cinzas, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas
K	coeficiente de extinção ou coeficiente de absorção
K_j	coeficiente de absorção do j -ésimo gas cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas

$K_{j,l}$	coeficiente de absorção molar devido ao efeito conjunto do j -ésimo e do l -ésimo gás cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais, para meios constituídos por duas espécies participantes
$K_{l,\lambda}$	coeficiente de absorção espectral de um meio participante no caminho l
K_m	coeficiente de extinção molar
K_M	coeficiente de absorção médio de Planck.
K_{m, CO_2}	coeficiente de absorção molar relativo à espécie participante CO ₂ .
$K_{m, CO_2, l}$	coeficiente de absorção molar do l -ésimo gás cinza relativo à espécie participante CO ₂
$K_{m, CO_2, \eta}$	coeficiente de absorção espectral molar relativo à espécie participante CO ₂ .
K_{m, H_2O}	coeficiente de absorção molar relativo à espécie participante H ₂ O.
$K_{m, H_2O, j}$	coeficiente de absorção molar do j -ésimo gás cinza relativo à espécie participante H ₂ O
$K_{m, H_2O, \eta}$	coeficiente de absorção espectral molar relativo à espécie participante H ₂ O.
$K_{m,j}$	coeficiente de absorção molar do j -ésimo gás cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas
$K_{m,\eta}$	coeficiente de absorção espectral molar (em função do número de onda)
$K_{S,j}$	coeficiente de absorção relacionado ao comprimento de onda da radiação do j -ésimo sub-pacote.
K_λ	coeficiente de extinção espectral ou coeficiente de absorção espectral
$K_{\lambda,m}$	coeficiente de absorção espectral molar (em função do comprimento de onda)
l	comprimento de caminho percorrido por um pacote de energia em um meio participante
L	distância de separação entre placas planas infinitas
M	número de moles de moléculas por unidade de volume
M_{CO_2}	número de moles de moléculas de CO ₂ por unidade de volume
M_{H_2O}	número de moles de moléculas de H ₂ O por unidade de volume
M_S	número de moles de moléculas da espécie química participante s por unidade de volume
N_P	número de pacotes de energia emitidos por um volume finito
$N_{P,S}$	número de sub-pacotes contidos em um pacote de energia multi-espectral

$N_{\Delta A}$	número total de pacotes lançados do elemento de superfície finito ΔA
$N_{\Delta V}$	número de pacotes de energia emitidos de um volume finito ΔV
$N_{\Delta V, K_m}$	número de pacotes de energia emitidos de um elemento de volume finito ΔV no intervalo espectral relacionado à ΔK_m , no entorno de K_m
P	função densidade de probabilidade
P_T	pressão total
$q_{\Delta A, K_m}$	taxa de emissão de energia por um elemento de superfície ΔA no intervalo espectral relacionado à ΔK_m , no entorno de K_m
$q_{\Delta A, K_m}^{(b)}$	energia de um pacote emitido por um elemento de superfície finito ΔA , associado à radiação das regiões espectrais onde o coeficiente de absorção molar é K_m
$q_{\Delta V, K_m}$	taxa de emissão de energia por um elemento de volume finito ΔV no intervalo espectral relacionado à ΔK_m , no entorno de K_m
$q_{\Delta V, K_m}^{(b)}$	energia de um pacote emitido por um elemento de volume finito ΔV associado à radiação das regiões espectrais onde o coeficiente de absorção molar é K_m
R	função distribuição cumulativa ou número randômico
R_{CO_2}	número randômico para determinar o coeficiente de absorção molar referente à espécie participante CO_2 .
R_{H_2O}	número randômico para determinar o coeficiente de absorção molar referente à espécie participante H_2O .
R_l	número randômico para determinar o comprimento de caminho percorrido por um pacote de energia antes de ser absorvido pelo meio participante
$R_{l,m}$	número randômico associado a um valor do coeficiente de absorção molar K_m .
R_λ	número randômico para determinar o comprimento de onda.
$R_{l,\lambda}$	número randômico para determinar o comprimento de caminho percorrido por um pacote de energia associado ao comprimento de onda λ antes de ser absorvido pelo meio participante
S	comprimento de caminho de meio participante
T	temperatura
T_b	temperatura de corpo negro
T_g	temperatura do gás
T_m	temperatura do meio

$T_{\Delta A}$	temperatura de um elemento de superfície finito ΔA
$T_{\Delta V}$	temperatura de um elemento de volume finito ΔV
T_w	temperatura de uma superfície w
V	volume
x	coordenada de comprimento
Y_s	concentração molar da espécie química absorvedora s

Caracteres Gregos

σ	constante de Stefan-Boltzmann
σ_λ	coeficiente de espalhamento espectral
ε_g	emitância total de um gás
ε_w	emissividade de uma superfície cinza
λ	comprimento de onda
η	número de onda
ω	ângulo sólido
ω_j	peso do j -ésimo gás cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas
$\omega_{j,l}$	peso conjunto dos j -ésimo e l -ésimo gases cinzas, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais, para meios constituídos por duas espécies participantes

Subíndices

g	indica gás
i	indica o i -ésimo segmento espectral
j	j -ésimo gás cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas e no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais.
j	j -ésimo sub-pacote, no modelo dos pacotes de energia multi-espectrais
l	l -ésimo gás cinza, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais
loc	indica que as propriedades do meio participante são avaliadas nas condições locais
ref	indica que as propriedades do meio participante são avaliadas nas condições de referência
s	espécie química absorvedora s

<i>ZE</i>	zona de emissão
<i>ZL</i>	zona local
<i>w</i>	superfície <i>w</i>

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1 Atenuação da radiação ao longo de um caminho dS	9
2.2 Geometria para a dedução da emissão por um volume infinitesimal de meio participante.	11
2.3 Diagrama da energia potencial e transições para uma molécula diatômica [Figura adaptada de Siegel e Howell, 2002].....	14
2.4 Linha espectral alargada [Figura adaptada de Siegel e Howell, 2002].....	14
2.5 Elementos gasosos com volume infinitesimal.....	15
2.6 Coeficiente de absorção de uma mistura de 20% H ₂ O e 20% CO ₂ a 1500 K [Wang et al., 2007].....	16
3.1 Representação gráfica da fração da energia de um corpo negro na temperatura T_b nas regiões do espectro em que $K_{m,\eta}$ está abaixo do valor K_m , área hachurada.....	23
3.2 Função distribuição ALB para $T_b = 1000$ K, $P_T = 1$ atm e $Y_{H_2O} = 0,1$, para três diferentes valores de T_g : 500, 1000 e 2000 K.....	24
3.3 Região espectral delimitada por $K_{m,j}$ e $K_{m,j+1}$	25
3.4 Coeficiente de absorção espectral molar (a) de um meio com características ideais para a utilização da aproximação por escalonamento e (b) de um meio hipotético em que não poderia ser utilizada a aproximação por escalonamento.....	27
3.5 Representação gráfica das frações da energia de um corpo negro à temperatura T_b nas regiões do espectro em que $K_{m, H_2O, \eta}$ e $K_{m, CO_2, \eta}$ estão abaixo dos respectivos valores K_{m, H_2O} e K_{m, CO_2} (região hachurada).....	29
4.1 Trajetória possível para um pacote cinza qualquer.....	42
4.2 Trajetória possível para um pacote multi-espectral.....	44
5.1 Representação da geometria referente aos problemas solucionados.....	52
5.2 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes para um gás constituído de 20% de H ₂ O e 80% de ar, que está a 1500 K e pressão de 1 atm.....	53
5.3 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes Para um gás constituído de 10% de H ₂ O e 90% de ar, com perfil de temperatura parabólico.....	54
5.4 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para um gás constituído de 10% de H ₂ O e 90% de ar, que apresenta um perfil de temperaturas fornecido pela Equação (5.2).....	56

5.5 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para um gás cujas distribuições de concentrações de H ₂ O e CO ₂ e de temperaturas são fornecidas pelas Equações (5.3), (5.4) e (5.5).....	57
5.6 Divergentes do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes da cavidade para um meio homogêneo (20% H ₂ O e 10% CO ₂) e para um meio não-homogêneo: concentrações fornecidas pelas Equações (5.6) e (5.7).....	60
5.7 Divergentes do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes da cavidade para meios homogêneos: (20% H ₂ O e 10% CO ₂) e (15% H ₂ O e 7.5% CO ₂).	61
5.8. Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes da cavidade para dois meios homogêneos a 1780 K, tendo concentrações: (20% H ₂ O e 10% CO ₂) e (13,1% H ₂ O e 6,55% CO ₂).....	63
5.9 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes da cavidade para dois meios homogêneos a 1476 K, tendo concentrações: (20% H ₂ O e 10% CO ₂) e (10% H ₂ O e 5% CO ₂).....	64
5.10. Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes da cavidade para dois meios homogêneos com distribuição de temperatura fornecida pela Equação 5.8 e tendo concentrações: (20% H ₂ O e 10% CO ₂) e (10% H ₂ O e 5% CO ₂)	65
5.11 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes da cavidade para dois meios homogêneos a 2304 K, tendo concentrações: (10% H ₂ O e 10% CO ₂) e (14% H ₂ O e 12,5% CO ₂).....	66
5.12 Representação da câmara de combustão [Silva, 2005].....	68
5.13 Fluxos de calor por convecção, por radiação e total, na parede lateral cilíndrica da câmara de combustão [Silva, 2005].....	68
5.14 Campo de concentração do vapor d'água na câmara de combustão [Silva, 2005].....	69
5.15 Campo de concentração do dióxido de carbono na câmara de combustão [Silva, 2005].	69
5.16 Campo de concentração do metano na câmara de combustão [Silva, 2005].....	70
5.17 Campo de concentração do monóxido de carbono na câmara de combustão [Silva, 2005].....	70
5.18 Distribuição de temperatura na câmara de combustão [Silva, 2005].....	70
5.19 Distribuição de temperatura em uma câmara de combustão típica (obtida com a correlação C 1, apresentadas no Apêndice C).....	73

5.20 Distribuição de dióxido de carbono em uma câmara de combustão típica (obtida com as correlações C 3, apresentadas no Apêndice C).....	73
5.21 Distribuição de vapor de água em uma câmara de combustão típica (obtida com as correlações C 3, apresentadas no Apêndice C).....	73
5.22. Divergente do fluxo de calor no meio: (a) meio não-homogêneo, (b) meio homogêneo (10% CO ₂ , 10% H ₂ O).....	75
5.23 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica da cavidade.....	75
5.24 Emitância total em função da fração de CO ₂ e comprimento de caminho de meio.....	77
5.25 Emitância total em função da fração de H ₂ O e comprimento de caminho de meio.....	78
5.26 Emitância total em função da soma das frações de H ₂ O e CO ₂ e do comprimento de caminho de meio.....	79
5.27 Divergente do fluxo de calor, para o meio composto de 20 % de H ₂ O e 10% de CO ₂ , obtida com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Carlo aplicado ao modelo WSGG.....	80
5. 28 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica, para o meio constituído de 20 % de H ₂ O e 10% de CO ₂ , obtidos através dos método da zonas aplicado ao modelo WSGG, método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.....	81
5.29 Divergente do fluxo de calor, para o meio composto de 10 % de H ₂ O e 10% de CO ₂ , obtida com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Carlo aplicado ao modelo WSGG.....	82
5. 30 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica, para o meio constituído de 10 % de H ₂ O e 10% de CO ₂ , obtidos através dos método da zonas e modelo WSGG, método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.....	83
5.31 Divergente do fluxo de calor no meio obtido com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG...	85
5.32 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica obtidos através dos método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.....	86

5.33 Distribuição de temperatura na câmara de combustão cilíndrica: (a) trezentas zonas de volume de meio participante ($N_z = 30, N_r = 10$) e (b) setenta e cinco zonas de volume de meio participante $N_z = 15, N_r = 5$	87
5.34 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica para diferentes níveis de discretização do domínio.....	88
5.35 Divergente do fluxo de calor no meio obtido com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG.	89
5.36 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica obtidos através dos método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.....	90
5.37 Emitância total em função da soma das frações de H_2O e CO_2 e do comprimento de caminho de meio.....	91
5.38 Resultados para o fluxo de calor na parede lateral cilíndrica obtidos utilizando-se quantidades diferentes de sub-pacotes para compor o pacote de energia multi-espectral	95
5.39 Relação tempo de processamento versos número de sub-pacotes utilizados.....	96
5.40 Relação número de pacotes multi-espectrais versos número de sub-pacotes.....	96
5.41 Resultados para o fluxo de calor na parede lateral cilíndrica obtidos utilizando-se quantidades diferentes de sub-pacotes para compor o pacote de energia multi-espectral	97
A1 Alvo do arqueiro.....	108
A2 Histograma da distribuição de flechas em cada região do alvo.....	109
A3 Superfície do Exemplo A2.....	112
A4 Configuração geométrica para o exemplo A3 [Siegel e Howell, 2002].....	117
A5 Fluxograma para a resolução do problema do exemplo 3.2 [Siegel e Howell, 2002].....	121

ÍNDICE DE TABELAS

A1 Resultados do exemplo e simulações 1 e 2.....	111
A2 Distribuição de emissão pacotes de energia ao longo das regiões da superfície S_1 obtidos através da equação 3.6 e através de simulações em Monte Carlo.....	116
B.1 Coeficiente a_{lmn} que aparece na relação B1b.....	123
B.2 Coeficiente b_{lmn} que aparece na relação B2b.....	124
B3 – Coeficiente d_{lmn} que aparece na relação B3.....	126
C1 Coeficientes para a distribuição de temperatura em uma câmara de combustão cilíndrica Típica.....	128
C2 Coeficientes para a distribuição de temperatura em uma câmara de combustão cilíndrica Típica.....	129
C3 Coeficientes para a distribuição de vapor de água em uma câmara de combustão Cilíndrica típica.....	130

1. INTRODUÇÃO

1.1 Motivação e Revisão Bibliográfica

O estudo dos processos de transferência de calor por radiação é bastante importante em diversas aplicações científicas e industriais. Na Astrofísica, características de corpos celestes podem ser inferidas a partir do conhecimento da radiação proveniente dos mesmos. Na meteorologia, as trocas radiantes devem ser consideradas no modelamento dos processos atmosféricos. Em problemas de combustão, como os que ocorrem em fornalhas de caldeiras para a geração de energia elétrica e motores de combustão interna, os gases gerados a temperaturas elevadas emitem grande quantidade de radiação térmica, fazendo das trocas radiantes geralmente o principal mecanismo de transferência de energia. Dessa forma, o modelamento preciso da transferência de calor por radiação é necessário para otimizar o projeto e a operação de sistemas de combustão, possibilitando a redução do consumo de combustíveis e, conseqüentemente, a redução da emissão de gases que poluem o meio ambiente.

Apesar de sua participação significativa nos processos de transferência de calor em problemas de combustão, as trocas radiantes constituem apenas uma parte do fenômeno como um todo. O cálculo dos fluxos radiantes envolve muitos fatores que podem torná-lo bastante complexo. Sendo assim, muitas metodologias para abordá-lo têm sido propostas.

Inicialmente foi proposto o modelo de gás cinza, o mais simples de todos. Esse modelo é similar ao de superfície cinza. É estabelecida a hipótese de que todo o meio participante é constituído por um único gás cinza, que absorve a mesma fração de radiação independentemente do comprimento de onda. A única variável é a temperatura: a quantidade de energia emitida varia de acordo com a função de Planck.

O modelo de gás cinza não é capaz de fornecer resultados precisos, visto que, diferentemente de corpos opacos, os gases apresentam propriedades que variam de forma bastante acentuada em relação ao intervalo espectral considerado.

Conforme Hottel e Sarofim, 1967, desde 1927 até 1958, foram obtidas as primeiras medidas experimentais a respeito do comportamento radiante de gases importantes nos processos de transferência de calor em fornalha, especialmente vapor d'água e dióxido de carbono.

Buscando contornar os problemas referentes às propriedades espectrais dos gases, verificados através dos resultados experimentais, Hottel e Sarofim, 1967, apresentaram o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (*weighted-sum-of-gray-gases*, WSGG, *model*), dentro do contexto do método das zonas desenvolvido por Hottel e Cohen, 1958, conforme Modest, 1993.

Nesse modelo, o comportamento do gás real é simulado através da utilização de um conjunto de gases cinzas (em geral, três). Cada um dos gases é considerado cinza dentro de uma determinada região espectral. O peso de cada gás, para o fluxo radiante total, é determinado conforme a fração da energia radiante em cada intervalo dentro dos quais cada gás é considerado cinza.

Fleske e Tien, 1975, e Saido e Giedt, 1977, apresentaram correlações que possibilitam corrigir a emitância de gases constituídos por vapor d'água e dióxido de carbono, através da inclusão de uma quantidade adicional de emissão devido a efeitos da sobreposição espectral da radiação emitida pelas moléculas desses gases. Em seguida, surgiram trabalhos em que foram revisados dados úteis, para a utilização do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas, a respeito do comportamento espectral do vapor d'água e do dióxido de carbono. Conforme Modest, 1993, alguns desses trabalhos foram realizados por Boynton e Ludwig, 1971; Lencker, 1972; Ludwig et. al., 1973; Sarofim et. al., 1978, e Farag, 1982. Foi verificado que os dados originais, embora precisos para muitas condições, apresentavam grandes erros para outras. Ainda nessa linha, Skocypec e Bulckius, 1984, analisaram o efeito de parâmetros de espalhamento na emitância total hemisférica dos vapor d'água e dióxido de carbono.

O modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas é um método que não necessita de dados espectrais detalhados, por isso, é classificado como um método global. Os coeficientes de extinção dos gases cinzas e as correlações de ponderação são ajustadas a partir de dados tabelados, que podem ser obtidos de resultados experimentais ou calculados utilizando-se modelos espectrais mais completos. Smith et al., 1982, obtiveram coeficientes de absorção de gases cinzas e correlações de ponderação para misturas de gases constituídas de vapor de água, dióxido de carbono e ar. Os dados base utilizados para ajustar as correlações foram obtidos através do modelo exponencial de banda larga. As correlações de Smith et al., 1982, são ainda hoje bastante utilizadas no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas. Embora o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas em conjunto com as correlações de Smith et al, 1982, seja computacionalmente da soma-ponderada-de-gases-cinzas, conforme demonstrado por Maurente et al. (2006a, 2006b e 2007a, 2007b), devido a aproximações necessárias para sua utilização, pode levar a resultados bastante discrepantes em relação a resultados obtidos por método espectrais mais sofisticados.

A necessidade de se estabelecer relações experimentais nos estudos iniciais a respeito de meios participantes foi decorrente do fato de as propriedades espectrais variarem de maneira complexa com as temperatura, pressão e concentração parcial das espécies químicas que constituem o meio. Porém, atualmente, existem bancos de dados a respeito de características de

emissão e absorção de radiação por moléculas, como os HITRAN e HITEMP, que podem ser utilizados para se obter propriedades espectrais de gases de maneira detalhada.

Problemas de troca radiante podem ser solucionados de maneira bastante completa e precisa, a partir dos bancos de dados mencionados, através de processos chamados de integração linha-por-linha, que são executados considerando-se individualmente cada uma das linhas espectrais passíveis de serem emitidas ou absorvidas, conforme os estados quânticos de energia permitidos para as moléculas que constituem o meio participante.

Contudo, processos de integração linha-por-linha são difíceis de serem executados e consomem muito tempo computacional. Devido a isso, são utilizados somente em casos restritos, geralmente para se obter soluções *benchmark*. Ao passo que os modelos globais, como o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas, têm sido utilizados na solução de problemas extensos, como os que ocorrem em fornalhas industriais, que envolvem, além da radiação, outros mecanismos de transferência de calor.

A fim de contornar os problemas referentes ao processo de integração linha-por-linha, surgiram os modelos de banda. Existem duas classificações para os modelos de banda: banda estreita e banda larga. Os modelos de banda larga representam da mesma maneira a estrutura de linhas espectrais ao longo de um intervalo que compreende uma banda de vibração-rotação inteira. Os modelos de banda estreita representam da mesma maneira a estrutura de algumas das linhas espectrais de uma banda de vibração-rotação. Alguns desses modelos foram desenvolvidos em épocas em que os bancos de dados a respeito de características de emissão e absorção de radiação por moléculas eram inexistentes ou muito restritos. Assim, são modelos bastante aproximados, de forma que os resultados obtidos podem conter erros significativos.

O método de Distribuição- K permite simplificações expressivas em cálculos nos quais são consideradas as propriedades espectrais. Esse método é baseado no fato de que, em geral, a intensidade espectral de corpo negro não varia significativamente dentro de uma mesma banda e, portanto, pode ser aproximada como sendo constante. Entretanto, quando as propriedades do meio participante variam com a localização, devido a variações na temperatura e concentração das espécies químicas, os resultados obtidos aplicando-se a Distribuição- K podem perder a consistência. No intuito de contornar esse problema, Goody e Yung, 1989 (conforme Siegel e Howell, 2002) e Goody et al., 1989, propuseram o método K -Correlacionado. Esse método correlaciona os coeficientes de extinção do meio em diferentes níveis de temperatura e concentração das espécies químicas, o que permite obter o coeficiente de extinção para um volume de gás que se encontra em um determinado estado a partir de um coeficiente de extinção conhecido, em outro estado. Modest e Zhang, 2002, estenderam o método de Distribuição- K , em

conjunto com o método *K*-Correlacionado, para todo o espectro, definindo uma Distribuição-*K* cumulativa da função de Planck. Esse método foi denominado método de Distribuição-*K* Correlacionado para Espectro Completo (*Full Spectrum Correlated-K Distribution Method*).

O modelo WSGG, como apresentado por Hottel e Sarofim, 1967, é um método global, conforme discutido em parágrafos anteriores. Entretanto, Modest, 1991, incorporou o modelo da soma ponderada na equação da transferência radiativa e demonstrou que pode ser utilizado com qualquer técnica de solução para esta equação. Isso possibilitou o surgimento de novos modelos espectralmente detalhados. Assim, Denison e Webb, 1993a, apresentaram o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais (*spectral-line-weighted sum-of-gray-gases, SLW, model*), que possibilita obter os pesos e coeficientes de extinção do gás a partir do espectro linha-por-linha, obtido dos bancos de dados. Denison e Webb, 1993b, aplicaram a função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (*absorption-line blackbody distribution, ALB, function*) ao método. Eles também apresentaram correlações matemáticas para essa função, que facilitam a implementação computacional do método, para o caso de um meio constituído por vapor d'água e gases inertes à radiação [Denison e Webb, 1993b] e para o caso de um meio constituído por dióxido de carbono e gases inertes [Denison e Webb, 1995b]. O método foi proposto para meios homogêneos e isotérmicos que se encontram no nível de pressão de uma atmosfera. Para aplicá-lo em situações nas quais o meio não é uniforme, é necessário utilizar um artifício em que as propriedades são obtidas a partir dos valores médios da temperatura e concentração das espécies químicas. Esse artifício possibilita a obtenção de resultados satisfatórios para alguns casos, mas quando o meio apresenta grandes diferenças de temperatura e concentrações, não pode ser utilizado. Assim, Denison e Webb, 1995a, utilizando a aproximação de *K*-Correlacionado, estenderam o método a casos em que o meio é não-homogêneo e não-isotérmico.

Finalmente, para possibilitar a utilização do método na solução de problemas em que o meio, além de não uniforme, contém as duas espécies absorvedoras consideradas nos trabalhos anteriores (H_2O e CO_2), Denison e Webb, 1995c, definiram a função distribuição ALB para o caso de haver duas espécies químicas absorvedoras e apresentaram uma aproximação para obter essa função a partir de duas funções distribuição ALB's distintas obtidas para cada uma das espécies químicas.

Com as técnicas apresentadas nesses trabalhos a respeito do modelo SLW, pode-se utilizar o método na solução de qualquer problema de transferência de calor por radiação em que o meio seja constituído por vapor d'água, dióxido de carbono e espécies químicas inertes à radiação.

Mais recentemente, Solovjov e Webb, 2000, apresentaram modelos para melhorar a eficiência do SLW em misturas de gases compostas por várias espécies absorvedoras. Solovjov e Webb (2002, 2005) propuseram o modelo do número de onda cumulativa que permite a hipótese de correlação espectral local e aplicaram o modelo a uma mistura de gases contendo fuligem. Wang e Modest, 2005 e Modest e Singh, 2005, apresentaram dados base obtidos dos HITEMP e CDS-1000 que simplificam a implementação dos métodos SLW e FSK.

1.2 Objetivos

Apesar do progresso dos modelos espectrais nos últimos trinta anos, tornando-se muito precisos para algumas aplicações, há ainda uma grande necessidade de pesquisa a respeito de métodos que permitam sua aplicação na solução de processos que envolvam configurações geométricas complexas e paredes com reflexão especular, entre outros efeitos, para os quais o método de Monte Carlo é uma técnica de solução bastante poderosa.

O Monte Carlo é um método estatístico que pode ser utilizado na simulação de uma grande variedade de fenômenos e processos. Para tanto, obtém-se a função distribuição frequência de ocorrência de um determinado evento, que pode ser um fenômeno físico, como a emissão de energia radiativa. A partir da função frequência, obtém-se as funções distribuição de probabilidade e a distribuição cumulativa, através da qual o evento (ou fenômeno físico) pode ser simulado probabilisticamente gerando-se números randômicos. Na simulação da transferência de calor por radiação, emitem-se pacotes de energia, cujas características, como localização de emissão, ângulos de emissão e comprimento de onda, são determinadas probabilisticamente através da geração de números randômicos. As trocas de energia radiativa são obtidas contabilizando-se a emissão e a absorção da energia nas localizações onde os pacotes são emitidos e absorvidos.

A primeira aplicação do método de Monte Carlo em problemas de transferência de calor por radiação em engenharia foi para um caso em que havia meio participante: Howell e Perlmutter, 1964a, (conforme Howell, 1998) que utilizaram o método para obter a distribuição de temperatura em um meio participante contido entre duas placas paralelas infinitas. Nesse trabalho, foram fundamentadas as bases da aplicação do método em problemas de transferência de calor nos quais ocorre troca radiante. Desde então, o método tem sido utilizado na solução de diversos problemas de troca radiante. Conforme pode ser verificado nos trabalhos apresentados por Howell, 1998, e Farmer e Howell, 1998, o método pode ser utilizado na solução de problemas geometricamente complexos em que são consideradas propriedades direcionais e

espectrais. Em função do elevado grau de complexidade de certos problemas, pode ser a técnica mais viável para a obtenção da solução. O método de Monte Carlo foi primeiro aplicado no modelamento espectral de meios participantes por Modest, 1992, mas considerando apenas meios homogêneos com temperatura uniforme. A fim de considerar não uniformidades no meio, o método foi aplicado em conjunto com modelos espectrais: WSGG (Snegirev, 2004), modelo *K*-correlacionado de banda estreita (Tessé et al., 2002, 2004), método FSK (Wang et al., 2007).

No presente estudo, o comportamento espectral de meios participantes não-homogêneos, em que não há espalhamento da radiação, é considerado através da aplicação do método de Monte Carlo à função distribuição ALB [Maurense et al, 2007a]. A implementação apresenta a vantagem de que não é necessário considerar a contribuição de cada linha espectral individualmente, pois a função distribuição ALB incorpora o efeito de todas as linhas relacionadas ao mesmo coeficiente de absorção espectral molar, simplificando a abordagem do efeito espectral consideravelmente. Além disso, o método de Monte Carlo não requer a especificação arbitrária dos gases cinzas, necessário quando o SLW é utilizado em conjunto com a função distribuição ALB. Este estudo demonstra que a função distribuição ALB pode ser convenientemente acoplada ao método de Monte Carlo. A metodologia apresentou-se bem sucedida, quando utilizada para reproduzir uma série de resultados obtidos por Denison e Webb (1993b, 1995a, 1995b e 1995c), através do modelo SLW e da integração linha-por-linha, para problemas de troca radiante unidimensionais. Como passo adicional, desenvolve-se uma técnica que torna a utilização do método de Monte Carlo em problemas espectrais mais eficiente, o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais.

A radiação em meios participantes é geralmente o modo de transferência de calor dominante em sistemas como fornalhas e motores de combustão interna. Entretanto, não é o único modo de troca de energia. A solução da transferência de calor nesses sistemas envolve processos interativos de reações químicas de combustão, transporte turbulento de fluidos, convecção e radiação de calor. Assim, a aplicação de métodos sofisticados de modelamento espectral é ainda inviável. Devido a sua simplicidade, o modelo convencional WSGG em conjunto com as correlações apresentadas por Smith et al., 1982, é provavelmente o mais utilizado. O ônus é que o WSGG é incapaz de incorporar meios não-homogêneos e o espectro todo é modelado por apenas alguns gases cinzas. Além disso, o efeito da temperatura é limitado às funções de ponderação da contribuição de cada gás para a transferência de calor total, enquanto os coeficientes de absorção são assumidos como independentes da temperatura e invariáveis.

Com o objetivo de investigar a magnitude de erros que podem ocorrer devido às aproximações relacionadas ao modelo WSGG, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB é utilizado na solução de uma série de problemas. Analisa-se em separado possíveis discrepâncias devido à aproximação de meio uniforme. Problemas em meios uniformes são também abordados para avaliar apenas os erros relacionados à hipótese de coeficientes de absorção invariáveis e utilização das funções de ponderação obtidas por Smith et al., 1982. Tanto cavidades unidimensionais como cilíndricas, semelhantes a câmaras de combustão típicas, são consideradas.

Por fim, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB é utilizado na obtenção de resultados para as trocas radiantes em uma cavidade cilíndrica com distribuição de temperatura e concentrações de vapor de água e dióxido de carbono tipicamente encontradas em câmaras de combustão. Os perfis de temperatura e concentrações são baseados nos resultados obtidos por Silva et al., 2005. O mesmo problema foi solucionado através do modelo WSGG, adotando-se as hipóteses simplificativas necessárias.

Através de comparações entre os resultados objetiva-se verificar se a utilização do largamente empregado modelo WSGG pode levar a erros consideráveis, demonstrando se há ou não a necessidade de se utilizar modelos espectrais mais completos.

1.3 Organização do Texto

No Capítulo 2, trata-se do fenômeno de transferência de calor por radiação em meios participantes de modo geral. Inicialmente, apresentam-se alguns dos conceitos fundamentais. A seguir, na Seção 2.1, são feitos comentários a respeito da problemática relativa a trocas radiantes em meios participantes. Na última Seção, 2.2, são descritos, de maneira sucinta, métodos empregados na solução do problema.

No Capítulo 3, o método de Monte Carlo é aplicado à função distribuição ALB. Como muito dos conceitos e formulações apresentados por Denison e Weeb, 1993b, 1995a, 1995b, 1995c, no desenvolvimento do modelo SLW, foram utilizados no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, a primeira seção do capítulo é dedicada à apresentação desses conceitos e formulações, que serão utilizados na seção seguinte, 3.2, onde é demonstrado que o método de Monte Carlo pode ser aplicado de um modo conveniente à função distribuição ALB.

No Capítulo 4, é apresentado o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, desenvolvido para melhorar a eficiência computacional de qualquer método em que o Monte

Carlo é utilizado no modelamento espectral de meios participantes. Nas seções 4.1 e 4.2 são apresentados, respectivamente, o equacionamento necessário para a emissão e a absorção de pacotes de energia multi-espectrais. Na última seção do capítulo, o equacionamento é especificado para a utilização do modelo em conjunto com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Os resultados obtidos através da aplicação da metodologia proposta são apresentados no Capítulo 5, que é dividido em três seções. Na Seção 5.1 são apresentados resultados para a validação e análise do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Na Seção 5.2 o método é utilizado na solução de problemas para avaliar discrepâncias relacionados a aproximações necessárias para a aplicação do modelo WSGG, menos preciso, porém bastante utilizado. Na Seção 5.3 resultados em que o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais é utilizado são apresentados e comparados com outros em que o modelo não é utilizado. Comentários a respeito da relação entre incerteza estatística e número de pacotes são apresentados no decorrer do texto deste capítulo.

O último capítulo traz às conclusões. São apresentadas ponderações a respeito do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e colocações a respeito de benefícios em eficiência computacional em função da utilização do modelo dos pacotes multi-espectrais, proposto. Nesta seção é também fornecida uma visão geral da análise realizada no Capítulo 5, relativa a erros que podem ocorrer devido à utilização do modelo WSGG, muito freqüente em problemas de troca radiante devido a sua simplicidade e eficiência computacional. Com base nas conclusões, são feitas proposições para futuras pesquisas.

2. TRANSFERÊNCIA DE CALOR POR RADIAÇÃO EM MEIOS PARTICIPANTES

Nas duas primeiras seções deste capítulo, 2.1 e 2.2, são apresentados, respectivamente, os conceitos fundamentais e as dificuldades relativas aos processos de transferência de calor por radiação em meios participantes. Na última seção, 2.3, são mencionados alguns dos principais métodos desenvolvidos no intuito de contornar essas dificuldades.

2.1 Fundamentos de Transferência de Calor por Radiação em Meios Participantes

2.1.1 Absorção da Radiação

Quando um feixe de radiação atravessa uma camada de matéria (ou meio), o meio atenua a energia radiante de modo a provocar uma diminuição na intensidade do feixe. A variação na intensidade do feixe ocorre de acordo com a equação abaixo.

$$dI_{\lambda} = -K_{\lambda} I_{\lambda,0} dS \quad (2.1)$$

onde $I_{\lambda,0}$ é a intensidade da radiação de comprimento de onda λ antes do feixe atravessar a camada de matéria cuja espessura é dS . O coeficiente de proporcionalidade K_{λ} é denominado de *coeficiente de extinção espectral*. Esse coeficiente é característico do meio e relativo ao comprimento de onda da radiação que o atravessa, ou seja, um mesmo meio pode atuar de forma diferente sobre feixes de radiação com comprimentos de onda distintos.

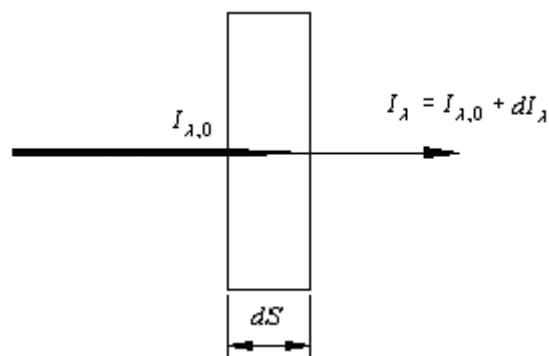


Figura 2.1 Atenuação da radiação ao longo de um caminho dS .

O coeficiente de extinção espectral é composto por um coeficiente de absorção, referente à parcela da radiação absorvida e por um coeficiente de espalhamento, referente à parcela da radiação espalhada em outras direções que não a do feixe que atravessa a camada de meio. O coeficiente de extinção pode, então, ser escrito como

$$K_{\lambda} = a_{\lambda} + \sigma_{\lambda} \quad (2.2)$$

onde a_{λ} é o coeficiente de absorção espectral e σ_{λ} é o coeficiente de espalhamento espectral.

O meio pode emitir e espalhar radiação de outras direções na direção do feixe que percorre o caminho dS . Entretanto, alguns meios como gases compostos por H_2O , CO_2 e ar não espalham radiação de maneira significativa. Nesses meios, o coeficiente de extinção é igual ao de absorção. Neste trabalho, serão tratados apenas meios em que não ocorre espalhamento; portanto, exceto neste capítulo, em que é apresentado o equacionamento referente aos processos de transferência de calor por radiação, o coeficiente de extinção será chamado de coeficiente de absorção.

2.2.1 Emissão da Radiação por um Elemento de Volume de Meio

Considere-se um volume elementar de meio, dV , localizado no centro de uma grande esfera cujas paredes são negras e que está na temperatura T , conforme mostrado na Figura 2.2. Na região entre o elemento dV e as paredes da esfera não há meio participante. O coeficiente de extinção, K_{λ} , é considerado uniforme em todo elemento infinitesimal de volume. A intensidade incidente em um elemento de área, dA_s , localizada nos limites de dV proveniente de um elemento de área dA na superfície da esfera é $I_{\lambda} = I_{\lambda,b}$, levando-se em conta o fato de que na ausência de meio participante a intensidade da radiação permanece constante ao longo de seu percurso¹. A parcela dessa radiação que é absorvida em dV é

$$dI_{\lambda} = K_{\lambda} I_{\lambda} dS \quad (2.3)$$

onde dS é o comprimento infinitesimal de caminho percorrido no interior do elemento de meio. A energia absorvida pelo subvolume diferencial $dSdA_s$ é $K_{\lambda}I_{\lambda,b}dSdA_s d\lambda d\omega$. A energia emitida por

¹ A dedução dessa afirmação de que na ausência de meio participante a intensidade da radiação permanece constante ao longo de seu percurso pode ser obtida em Siegel e Howell, 2002, Capítulo 11, Seção 11-2.

dA e absorvida por dV é obtida através da integração sobre todos os elementos $dSdA_s$; obtendo-se, $K_\lambda I_{\lambda,b} dV d\lambda d\omega$, onde $d\omega = dA/S^2$ é o ângulo sólido subtendido por dA do ponto de vista em dV . Para encontrar a energia incidente sobre dV proveniente de toda cavidade esférica deve ser realizada uma integração sobre todos os ângulos sólidos, obtendo-se $4\pi K_\lambda I_{\lambda,b} dV d\lambda$.

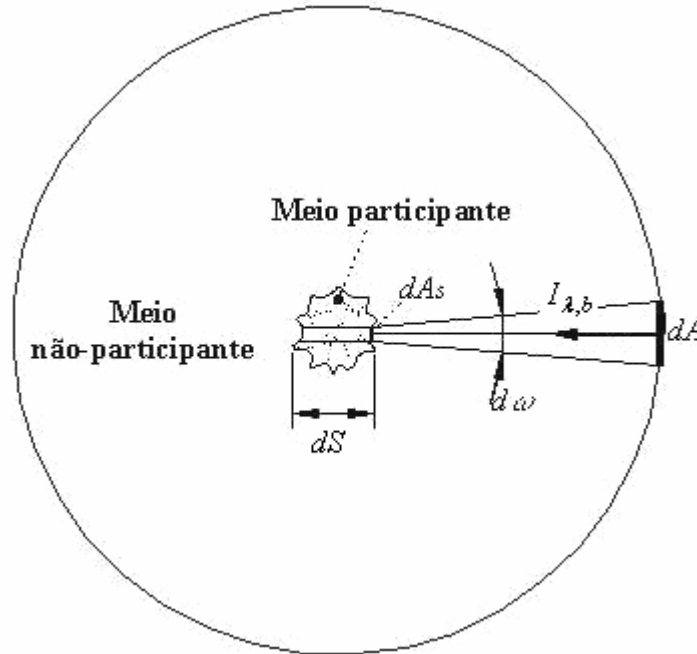


Figura 2.2 Geometria para a dedução da emissão por um volume infinitesimal de meio participante.

Para que seja mantido o equilíbrio térmico na cavidade, o elemento de volume deve emitir a mesma quantidade de energia que absorve, ou seja, $4\pi K_\lambda I_{\lambda,b} dV d\lambda$. Finalmente, toda energia emitida por dV por unidade de tempo, pode ser encontrada através da integração sobre todos os comprimentos de onda,

$$E_{dV} = 4\pi dV \int_{\lambda=0}^{\infty} K_\lambda I_{\lambda,b} d\lambda = 4\pi K dV I_b \quad (2.4)$$

Conforme a lei de Stefan-Boltzmann a equação acima pode ser escrita como

$$E_{dV} = 4K dV \sigma T^4 \quad (2.5)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann e T é a temperatura absoluta do volume de gás.

A forma de dV pode ser arbitrária, mas para que as Equações 2.4 e 2.5 sejam válidas, deve ser pequeno o suficiente para que toda energia emitida em seu interior escape antes de ser reabsorvida.

Foi considerado que dV é isotrópico, de forma que a emissão é uniforme em todas as direções. Assim, dividindo-se a energia total emitida por $4\pi d\lambda$, obtém-se a intensidade da radiação emitida pelo elemento de volume em uma dada direção e em um dado comprimento de onda,

$$dI_{\lambda,e} = K_{\lambda} I_{\lambda,b} dS \quad (2.6)$$

2.1.3 A Equação da Transferência Radiativa

A partir das Equações 2.1 e 2.6 é possível concluir que a variação na intensidade da radiação que atravessa uma determinada camada de meio participante com espessura dS é obtida através da seguinte equação: $dI_{\lambda} = (K_{\lambda} I_{\lambda,b} - K_{\lambda} I_{\lambda,o})dS$, que pode ser convenientemente escrita como

$$\frac{dI_{\lambda}}{dS} = K_{\lambda} I_{\lambda,b} - K_{\lambda} I_{\lambda,o} \quad (2.7)$$

A Equação 2.7 é conhecida como *equação da transferência radiativa* (RTE – *Radiative Transfer Equation*)

2.1.4 Mecanismos Físicos Subjacentes aos Processos de Emissão e Absorção de Radiação

Embora a formulação da teoria de transferência de calor por radiação em meios participantes tenha caráter geral, gases moleculares são os meios mais importante em aplicações de engenharia.

Um gás radiante pode ser composto por moléculas, átomos, íons e elétrons livres. Essas partículas estão em determinados níveis de energia. Uma molécula, por exemplo, pode vibrar (com seus átomos se aproximando e se afastando), transladar e rotar. De acordo com os preceitos da quantização da energia, essa molécula pode ocupar apenas determinados níveis de energia, sendo assim, pode absorver e emitir apenas fótons com níveis de energia específicos,

que as possibilitem saltar de um determinado estado quântico permitido para outro, conforme a Figura 2.3. A cada um desses fótons existe um comprimento de onda, λ (ou número de onda, $\eta = 1/\lambda$), associado. Dessa forma, as moléculas que constituem um gás poderiam emitir e absorver somente em determinadas localizações espectrais específicas – as chamadas linhas espectrais. Entretanto, devido a um fenômeno conhecido como alargamento de linha, a absorção e a emissão ocorrem em regiões contínuas ao longo do espectro.

Alguns dos fenômenos de alargamento de linha mais importantes são os alargamentos natural, Doppler, por colisões e *Stark*. O mais importante deles em situações comuns no interior de câmaras de combustão é o alargamento por colisões. As colisões entre as moléculas de um gás podem perturbar o estado de energia das mesmas, provocando um alargamento nas linhas espectrais, conforme representado na Figura 2.4. O alargamento por colisões é o responsável pela dependência do coeficiente de extinção do gás em relação à pressão, pois quando a pressão aumenta, a taxa de colisões entre as moléculas cresce. Além disso, o alargamento por colisões torna a dependência do coeficiente de extinção em relação à temperatura e à concentração das espécies químicas mais complexa. Uma variação na temperatura, além de provocar variação no nível de energia das moléculas, muda a taxa de colisões. Quando a concentração varia, além de se modificar as moléculas que emitem e absorvem, modifica-se a maneira como as próprias moléculas emitem e absorvem, visto que, por exemplo, o alargamento provocado nas linhas de uma molécula de água devido à colisão com outra molécula de água é diferente do provocado pela colisão com uma molécula de dióxido de carbono.

Os níveis de energia rotacionais são próximos quando comparados aos vibracionais, ver Figura 2.3, então, podem ocorrer transições entre níveis rotacionais dentro de um mesmo nível vibracional. Devido aos fenômenos de alargamento, as linhas relativas às transições rotacionais de um mesmo estado vibracional podem se sobrepor formando uma banda de vibração-rotação.

No método de integração linha-por-linha, que será apresentado mais adiante, as propriedades dos gases são determinadas a partir de cada linha espectral que pode ser emitida e absorvida pelas moléculas que constituem o gás.

2.2 A Problemática da Transferência de Calor por Radiação em Meios Participantes

Nos cálculos de fluxos radiantes em que há presença de meio participante, as principais dificuldades que surgem são referentes às propriedades radiantes do meio. O coeficiente de absorção depende de um grande número de variáveis tais como temperatura, pressão e concentração das espécies químicas que compõem o meio. A combinação dessas

variáveis faz que o coeficiente de extinção varie de maneira bastante irregular e possa assumir uma grande gama de valores, o que torna difícil sua determinação. Outro problema é devido ao fato de que, dentro de cada pequeno intervalo espectral do campo radiante envolvido, o coeficiente de extinção atua de maneira diferente; isso faz que os cálculos de fluxos radiantes se tornem bastante extensos.

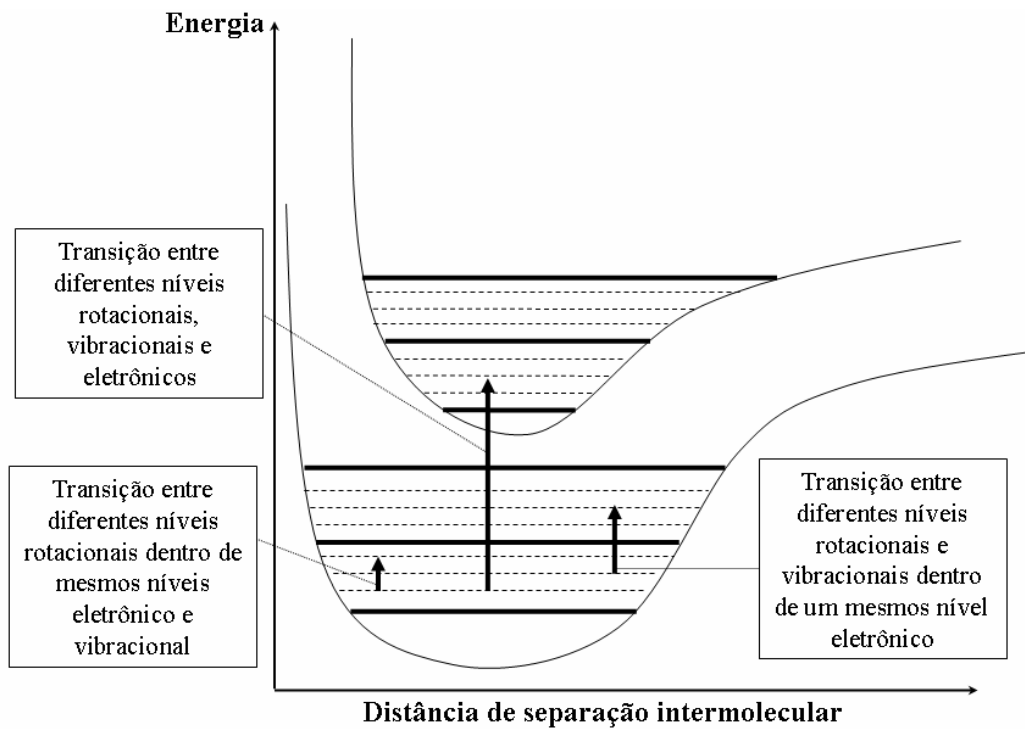


Figura 2.3 Diagrama da energia potencial e transições para uma molécula diatômica [Figura adaptada de Siegel e Howell, 2002].

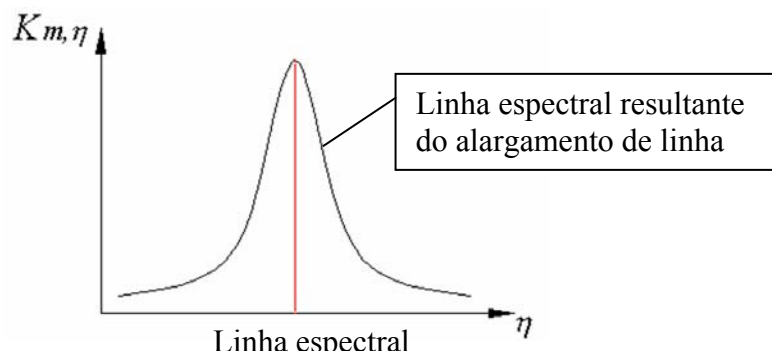


Figura 2.4 Linha espectral alargada [Figura adaptada de Siegel e Howell, 2002].

Para uma visão mais clara a respeito das dificuldades mencionadas acima, a seguinte análise qualitativa fornece um bom indicativo.

Sejam dois elementos gasosos, dV_1 e dV_2 , conforme a Figura 2.5. O elemento dV_1 está a uma temperatura T_1 , a uma pressão P_1 e possui uma determinada concentração de espécies químicas. O elemento dV_2 está a uma temperatura T_2 , a uma pressão P_2 , diferentes de T_1 e P_1 , e é composto pelas mesmas espécies químicas que dV_1 , mas com concentrações diferentes. Nas condições em que se encontra, o elemento dV_1 possui um determinado coeficiente de extinção espectral $K_{1,\lambda}$, que poderia variar ao longo do espectro conforme a Figura 2.6.

De acordo com a Equação 2.4, a energia radiante emitida por unidade de tempo por dV_1 é $4\pi K_{1,\lambda} I_{1,\lambda,b} dV_1$, sendo distribuída ao longo do espectro de maneira proporcional às distribuições de $K_{1,\lambda}$ e $I_{1,\lambda,b}$.

A energia emitida por dV_1 percorre o caminho S_{12} até chegar em dV_2 . Supondo que não exista meio participante ao longo de S_{12} , a energia absorvida por dV_2 será distribuída no espectro de maneira proporcional ao produto de $K_{1,\lambda}$, $I_{1,\lambda,b}$ e $K_{2,\lambda}$, conforme as Equações 2.1 e 2.6 ou a Equação 2.7. Observe-se que, para esse caso, o $I_{\lambda,o}$ que aparece na Equação 2.7 é equivalente ao $I_{\lambda,e}$ da Equação 2.6, calculado para o elemento dV_1 .

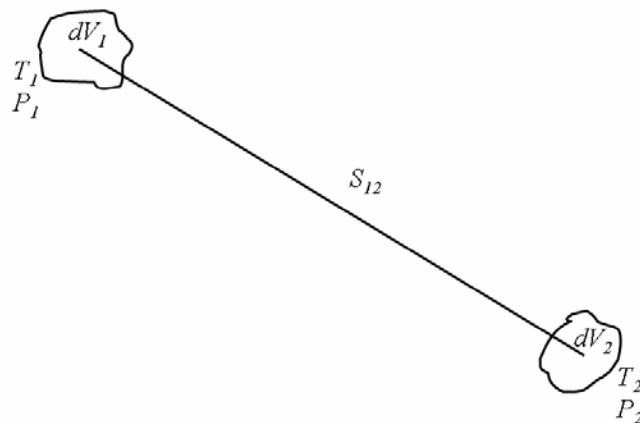


Figura 2.5 Elementos gasosos com volume infinitesimal

Considere-se, agora, que os volumes elementares dV_1 e dV_2 estejam no interior de uma cavidade que contém gás com temperatura e concentração das espécies químicas não uniformes, como ocorre em fornalhas industriais. Nesse caso, a intensidade da radiação que chega em dV_2 na direção de S_{12} não é mais $I_{\lambda,e,1}$, obtido através da equação 2.6, mas sim uma intensidade $I_{\lambda,o}$ (Equação 2.7), que depende dos processos de absorção e emissão ao longo de todos os pontos na direção de S_{12} em que ocorre emissão e absorção. Além disso, esses processos de absorção e emissão dependem das distribuições de temperatura, pressão e concentração ao longo de S_{12} , que são freqüentemente incógnitas do problema.

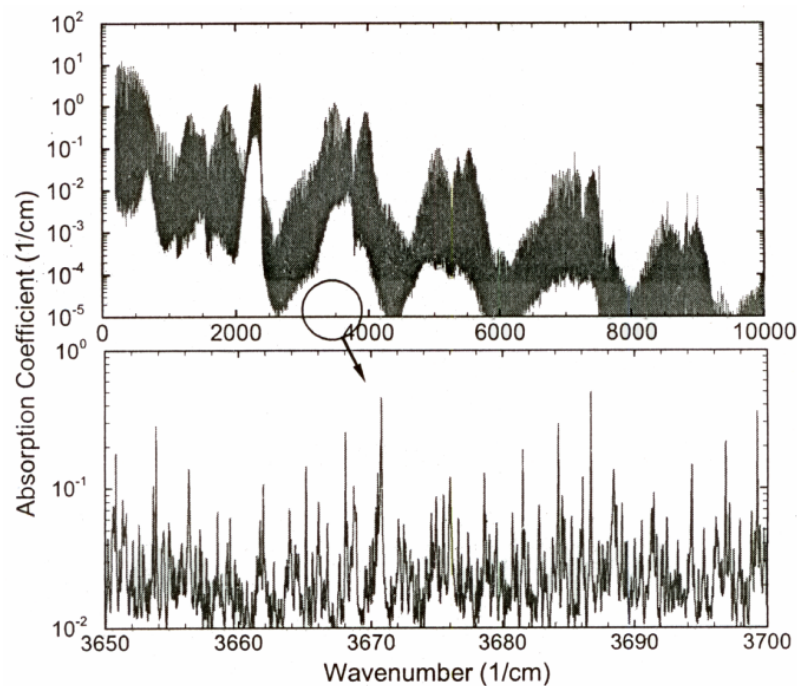


Figura 2.6 Coeficiente de absorção de uma mistura de 20% H₂O e 20% CO₂ a 1500 K. [Wang et al., 2007].

Considerando que a radiação compreende apenas uma parte dos processos de transferência de calor em muitas situações em engenharia, o cálculo das trocas radiantes em meios participantes é trabalhoso e computacionalmente pesado. Além disso, a própria determinação do coeficiente de extinção não é simples, podendo nem mesmo existir dados disponíveis. Entretanto, nos últimos tempos, novos dados vem sendo incorporados aos bancos de dados, como os HITRAN e HITEMP, que permitem determinar de maneira precisa, através de procedimentos de integração linha-por-linha, propriedades radiantes de algumas espécies químicas. Por outro lado, tornam os cálculos de troca radiante ainda mais extensos.

Sendo assim, modelos e métodos de solução têm sido propostos para contornar as dificuldades mencionadas acima.

2.3 Modelos e Métodos

Inicialmente, formulou-se para o meio participante a hipótese de gás cinza que, como a superfície cinza, apresenta propriedades radiantes uniformes ao longo do espectro, ou seja, seu coeficiente de extinção independe do comprimento de onda da radiação. Entretanto, o gás real apresenta forte dependência do coeficiente de extinção em relação ao espectro. Dessa forma, a

adoção da hipótese de gás cinza não conduz a resultados satisfatórios para fluxos de calor. Assim, Hottel e Sarofim, 1967, apresentaram o primeiro modelo que visa simular o comportamento de gases reais a partir de gases cinzas, o chamado modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (*weighted-sum-of-gray-gases, WSGG, model*).

2.3.1 O Modelo da Soma-ponderada-de-gases-cinzas

O modelo WSGG busca simular as propriedades de um gás real a partir do somatório de alguns gases cinzas. Nesse modelo, o espectro é dividido em J gases cinzas. A fração de energia correspondente a cada gás cinza é equivalente à fração da energia emitida por um corpo negro na temperatura do gás que está na região espectral ocupada pelo gás cinza. Hottel e Sarofim, 1967, propuseram que a emitância de um gás isotérmico pode ser expressa por

$$\varepsilon_g = \sum_{j=1}^J \omega_j (1 - \exp(-K_j S)) \quad (2.8)$$

onde ω_j e K_j são, respectivamente, o peso e o coeficiente de extinção do j -ésimo gás cinza. Smith et al., 1982, obtiveram coeficientes de absorção para gases cinzas e correlações para a obtenção dos pesos relacionados a esses coeficientes de absorção. Essa correlações são bastante utilizadas e se aplicam a mistura de gases contendo vapor de água e dióxido de carbono.

Modest, 1991, incorporou o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas na equação da transferência radiante,

$$\frac{dI_j}{dS} = \omega_j \left(K_j \frac{\sigma T^4(S)}{\pi} - I_j(S) \right), \quad (2.9)$$

e demonstrou que esta equação pode ser utilizado com qualquer técnica de solução da equação da transferência radiante.

2.3.2 A Integração Linha-por-Linha (Line-By-Line integration – LBL)

Caso fossem disponíveis dados espectrais totalmente completos, permitindo descrição real das linhas espectrais, a integração linha-por-linha seria um método exato.

Através da utilização de dados espectrais e parâmetros apresentados em bancos de dados, tais como os HITRAN, HITEMP e CDSD-1000, é possível reproduzir, de maneira bastante precisa, o comportamento espectral de algumas moléculas, dentre elas H₂O e CO₂, sob diversas condições. A partir dos bancos de dados, obtém-se o *coeficiente de extinção espectral molar*, $K_{\lambda,m}$.

O coeficiente de extinção espectral molar é equivalente ao coeficiente de extinção, mas ao invés de ser relativo à absorção ou emissão espectral ao longo de uma camada de meio, é relativo à absorção ou emissão espectral de uma molécula (sua unidade é m²/mol). Assim, o coeficiente de extinção pode ser obtido através da equação abaixo.

$$K_{\lambda} = K_{\lambda,m} M \quad (2.10)$$

onde M é o número de moles da molécula em questão por unidade de volume do meio (densidade molar da espécie da molécula) e pode ser obtido através de uma equação de estado.

2.3.3 A Distribuição- K

A fim de encontrar soluções para a transferência radiante, a equação da transferência radiativa (RTE) pode ser solucionada em vários intervalos espectrais e, em seguida, pode ser realizada uma integração sobre todo espectro para a obtenção da solução final. Visto que K_{λ} geralmente varia de uma maneira acentuada em relação a λ , a integração requer a solução da RTE para muitos intervalos espectrais. O método da distribuição- K consiste numa modificação que reduz a extensão dos cálculos. O modelo faz uso da hipótese de que a intensidade espectral de corpo negro não varia significativamente dentro de uma mesma banda e, por isso, pode ser considerada constante dentro do intervalo espectral da banda. Assim, a intensidade espectral dentro de cada banda deixa de ser dependente da distribuição da intensidade espectral de corpo negro, passando a ser apenas uma função da distribuição do coeficiente de extinção espectral, K_{λ} , de onde advém o nome do método.

2.3.4 O Método K -Correlacionado

Se as propriedades variam com a posição, o método K -correlacionado pode ser utilizado. Nesse método, é assumido que todos os números de onda que possuem um coeficiente de absorção K em um estado, apresentam um coeficiente de absorção K^* correlacionado ao

anterior em outro estado. Isso implica que para um coeficiente de absorção correlacionado a taxa K^*/K é uma função arbitrária de K , mas não do número de onda. No Capítulo 3, Seção 3.1, é demonstrado como o método foi aplicado ao modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais (*spectral-line-based weighted-sum-of-gray gases*, SLW model) e na Figura 3.4 (a) do Capítulo 3, aparece uma representação de como a taxa K^*/K independe do número de onda.

O método K -correlacionado é muito bem sucedido na área da meteorologia, na qual as temperaturas são baixas e variam suavemente. Em contraste, fortes variações na temperatura e concentração ocorrem em câmaras de combustão. Rivieré et al.(1992, 1995), segundo Modest e Zhang, 2002, e Solovjov, 2000, demonstraram que a precisão da correlação do coeficiente de absorção diminui na presença de fortes gradientes de temperatura, pois quando as temperaturas são muito diferentes, as linhas espectrais que dominam os processos de emissão e absorção da radiação também são diferentes. Similarmente, em uma mistura em que ocorrem fortes variações de concentração, devido à ocorrência de diferentes linhas espectrais, a correlação do coeficiente de absorção pode se tornar menos precisa.

2.3.5 O Método de Distribuição- K Correlacionado para Espectro Completo (FSK)

Modest e Zhang, 2002, estenderam o método de Distribuição- K , em conjunto com o método K -Correlacionado, para todo o espectro, definindo uma Distribuição- K cumulativa da função de Planck e, assim, criando o método de Distribuição- K Correlacionado para Espectro Completo (*full spectrum correlated- K distribution*, FSK, *method*).

2.3.6 O Modelo da Soma-ponderada-de-gases-cinzas Baseado nas Linhas Espectrais (SLW)

O modelo SLW, apresentado por Denison e Webb, 1993, é um método aproximado que possibilita obter os pesos e coeficientes de extinção do gás, no modelo WSGG, a partir do espectro linha-por-linha. A função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (*absorption-line blackbody distribution*, ALB, *function*) foi definida para utilização no modelo SLW. Essa função é calculada para o meio participante desejado a partir de bancos de dados espectrais, como o HITRAN. Solovjov e Webb, 2000, apresentaram modelos para melhorar a eficiência do SLW em misturas de gases compostas por várias espécies absorvedoras.

A função distribuição ALB e demais definições e metodologias apresentados por Denison e Webb (1993a, 1993b, 1995a, 1995b, 1995c) referentes ao modelo SLW serão

explicadas e utilizadas no Capítulo 3, onde será demonstrado como o método de Monte Carlo pode ser aplicado à função distribuição ALB.

2.3.7 O Modelo do Número de Onda Cumulativo (CW)

O número de onda cumulativo (*cumulative wavenumber*, CW, *model*) é dependente de valores específicos do coeficiente de extinção molar e do número de onda, $w = w(C, \eta)$. Da maneira como é definido, o número de onda cumulativo cresce linearmente com o valor do número de onda, η , sempre que o coeficiente de extinção espectral molar, $K_{m, \eta}$, for menor que o valor do coeficiente de extinção molar, K_m , e se mantém constante quando $K_{m, \eta} > K_m$.

Segundo Solovjov e Webb, 2002, que desenvolveram o modelo, a formulação do número de onda cumulativo permite substituir a integração em relação à variável independente η sobre a região do espectro molecular definida através do espectro de absorção molecular pela integração em relação ao número de onda cumulativo. Solovjov e Webb, 2005, demonstraram a relação entre a função distribuição cumulativa do número de onda e outras funções de distribuição e estenderam o modelo a aplicações em que o meio participante é uma mistura de gases não-homogênea e não-isotérmica contendo partículas suspensas não-cinzas.

3. APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO À FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO DE ENERGIA DE CORPO NEGRO NAS LINHAS DE ABSORÇÃO

A função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (função distribuição ALB), à qual se aplica aqui o método de Monte Carlo, foi proposta por Denison e Webb, 1993b, no contexto do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado-nas-linhas-espectrais (modelo SLW). Inicialmente, esse modelo foi aplicado apenas a problemas em que o meio era um gás uniforme constituído por vapor d'água e ar. Em trabalhos subseqüentes [Denison e Webb, 1995a, 1995b, 1995c], o modelo foi estendido para meios participantes não-isotérmico constituído por duas espécies químicas que emitem e absorvem radiação (dióxido de carbono e vapor d'água) e uma mistura de gases inertes à radiação térmica, como o O_2 e N_2 , doravante referida como ar, considerada apenas para se determinar o alargamento das linhas espectrais das moléculas das espécies emissoras e absorvedoras.

Muito dos conceitos e formulações apresentados por Denison e Webb (1993b, 1995a, 1995b, 1995c) no desenvolvimento do modelo SLW foram utilizados no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Esses conceitos e formulações são apresentados na Seção 3.1. A Seção 3.2 é inteiramente dedicada à aplicação do método de Monte Carlo à função distribuição ALB e, nesse âmbito, é demonstrado como as relações apresentadas na Seção 3.1 podem ser utilizadas.

O equacionamento em Monte Carlo é restrito à sua aplicação à função distribuição ALB. Conceitos fundamentais a respeito da utilização do método podem ser encontrados em literatura especializada em radiação térmica (Siegel e Howell, 2002, e Modest, 2003). Entretanto, no apêndice A, os conceitos fundamentais do método são apresentados através de dois exemplos. O primeiro foi obtido de Siegel e Howell, 2002, e tem caráter geral, não sendo restrito à radiação. O segundo considera a emissão de energia por uma superfície com temperatura não uniforme.

Na Seção 3.3, a última do capítulo, são ponderadas algumas das vantagens e desvantagens da aplicação do método de Monte Carlo à função distribuição ALB.

3.1 Função Distribuição de Energia de Corpo Negro nas Linhas de Absorção (função distribuição ALB)

O modelo SLW, apresentado por Denison e Webb, 1993a, é um método aproximado para se obter os pesos e coeficientes de extinção dos gases cinzas, no modelo da soma

ponderada, a partir do espectro linha-por-linha. Denison e Webb, 1993b, propuseram a aplicação da função distribuição ALB ao modelo e apresentaram correlações matemáticas para essa função para o caso de um gás constituído por H₂O (espécie absorvedora) e ar (para estimar o alargamento de linha).

Em cálculos linha-por-linha as propriedades espectrais são obtidas através da integração de muitas linhas espectrais. A função distribuição ALB permite que sejam consideradas simultaneamente todas as regiões espectrais em que o coeficiente de absorção espectral molar, do qual se obtém o coeficiente de absorção espectral, apresenta o mesmo valor, o que possibilita grande economia de tempo computacional.

A função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (no original *Absorption-Line Blackbody distribution function*, referida aqui como função distribuição ALB) é definida como a fração da energia de corpo negro nas porções do espectro onde o coeficiente de absorção espectral molar é menor que um certo valor, K_m (coeficiente de absorção molar). Para o caso de uma única espécie absorvedora, a função distribuição ALB é dada pela equação abaixo:

$$F(K_m, T_b, T_g, P_T, Y_s) = \frac{1}{\sigma T_b^4} \sum_i \int_{\Delta\eta_i} E_{b,\eta}(\eta, T_b) d\eta \quad (3.1)$$

onde Y_s é a concentração molar da espécie química absorvedora, designada por s ; P_T é a pressão total do gás; K_m é o coeficiente de absorção molar da espécie química absorvedora s ; η é o número de onda (sendo que, $\eta = 1/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda); σ é a constante de Stefan-Boltzmann; o subscrito i é referente ao i -ésimo segmento espectral, T_b é a temperatura de corpo negro e T_g é a temperatura do gás. Na temperatura T_g , são determinadas as propriedades de emissão e absorção da espécie química s , ou seja, dessa temperatura depende o coeficiente de absorção espectral molar, $K_{m,\eta}$, representado pelo gráfico que aparece na parte superior da Figura 3.1. Na temperatura T_b , é determinada, através da função de Planck, o poder emissivo espectral de corpo negro, $E_{b,\eta}$, apresentado no gráfico inferior da Figura 3.1.

Para um melhor entendimento dos conceitos relacionados a essa função, a análise das Figuras 3.1 e 3.2 fornece um auxílio. Na parte superior da Figura 3.1, aparece uma representação hipotética da distribuição do coeficiente de absorção espectral molar, $K_{m,\eta}$, de um gás ao longo dos números de onda, η . Na mesma figura, aparece também uma reta que representa um certo valor K_m do coeficiente de absorção molar. Nos pontos em que a reta intercepta a curva de $K_{m,\eta}$, os valores do coeficiente de absorção espectral molar são idênticos ao valor K_m . A fração da energia de um corpo negro à temperatura T_b , obtida através da função de Planck, que está nas

mesmas regiões espectrais de todos os valores de $K_{m,\eta}$ abaixo da reta K_m , é mostrada no gráfico inferior da Figura 3.1 (região hachurada).

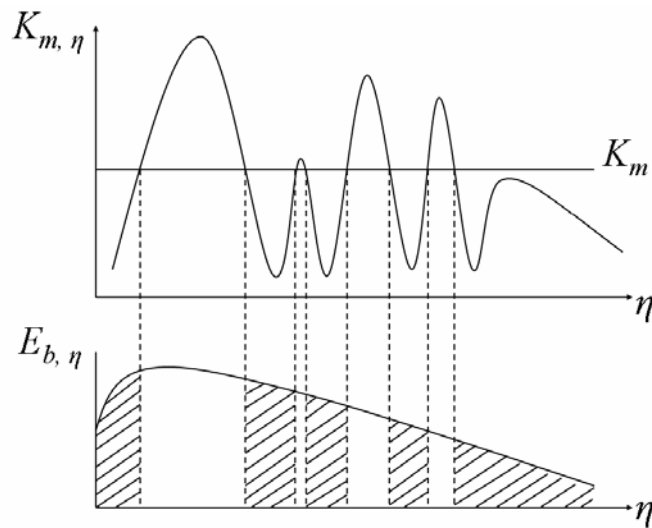


Figura. 3.1 Representação gráfica da fração da energia de um corpo negro na temperatura T_b nas regiões do espectro em que $K_{m,\eta}$ está abaixo do valor K_m , área hachurada.

Fazendo-se K_m variar desde zero até o maior valor do coeficiente de absorção espectral molar, ou seja, até seu valor no pico mais alto da curva $K_{m,\eta}$, obtém-se a função distribuição ALB, $F(K_m)$.

Através de uma breve inspeção da Equação 3.1, torna-se claro que a função distribuição ALB varia de zero a um, pois, quando K_m é igual ao valor máximo do coeficiente de absorção espectral molar, toda a curva $K_{m,\eta}$ está abaixo de K_m , abrangendo todo o espectro; quando K_m é igual a zero, toda a curva $K_{m,\eta}$ está acima dele, visto que não existem valores negativos para o coeficiente de absorção espectral molar. Isso pode ser observado na Figura 3.2, onde aparecem, em escala logarítmica, curvas que representam a função distribuição ALB obtidas a partir das correlações apresentadas por Denison e Webb, (1993b, 1995b)² para diferentes temperaturas de gás, T_g , e para valores específicos de Y_s , concentração molar da espécie química absorvedora; P_T , pressão total do gás e T_b , temperatura de corpo negro.

Denison e Webb, 1993b, utilizaram a função distribuição ALB em seu modelo SLW, tanto na obtenção dos pesos quanto dos coeficientes de extinção de cada gás cinza envolvido no somatório.

² As referidas correlações são apresentadas no apêndice B, deste trabalho.

A função distribuição ALB pode ser utilizada para dividir o campo radiante referente a um gás, que se encontra num estado específico de temperatura, pressão e concentração da espécie química absorvedora, em regiões espectrais delimitadas por valores específicos do coeficiente de absorção molar, $K_{m,j}$ e $K_{m,j+1}$, conforme representado na Figura 3.3. A fração da energia de corpo negro nesse intervalo espectral pode ser calculada, utilizando-se a função distribuição ALB, através da relação abaixo:

$$\omega_j = F(K_{m,j+1}, T_b, T_g, Y_s) - F(K_{m,j}, T_b, T_g, Y_s) \quad (3.2)$$

onde j indica o j -ésimo gás cinza.

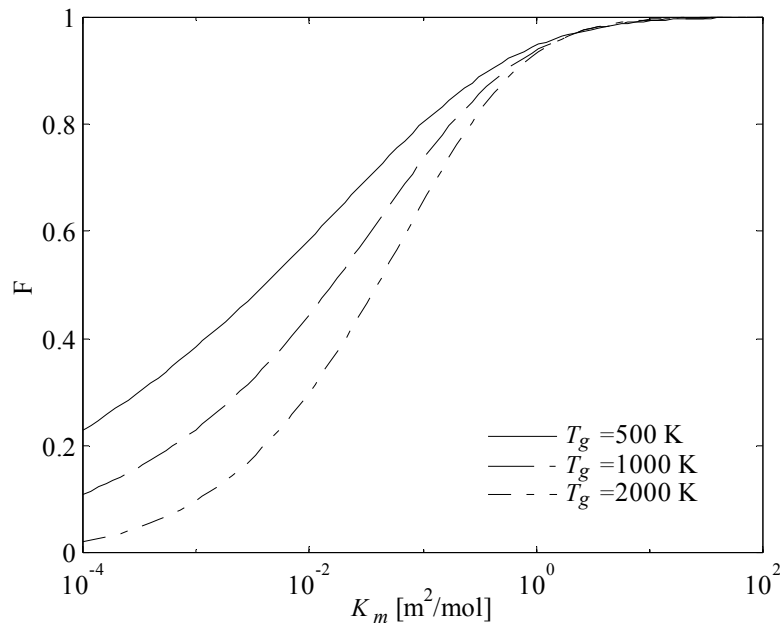


Figura. 3.2 Função distribuição ALB para $T_b = 1000$ K, $P_T = 1$ atm e $Y_{H_2O} = 0,1$, para três diferentes valores de T_g : 500, 1000 e 2000 K.

Essa fração de energia é proporcional à contribuição da região espectral delimitada por $K_{m,j}$ e $K_{m,j+1}$ para o campo radiante total.

No modelo SLW, o espectro é dividido em J regiões, como a que aparece na Figura 3.3. Para cada gás cinza envolvido no somatório, o coeficiente de absorção molar é considerado como sendo o coeficiente de absorção molar médio dentro de cada intervalo. Denison e Weeb, 1993b, propuseram a seguinte relação para calcular o coeficiente de absorção molar médio

dentro da região delimitada por $K_{m,j}$ e $K_{m,j+1}$, que é o coeficiente de absorção molar do j -ésimo gás:

$$K_{m,j} = \exp\left[\frac{\ln(K_{m,j}) + \ln(K_{m,j+1})}{2}\right] \quad (3.3)$$

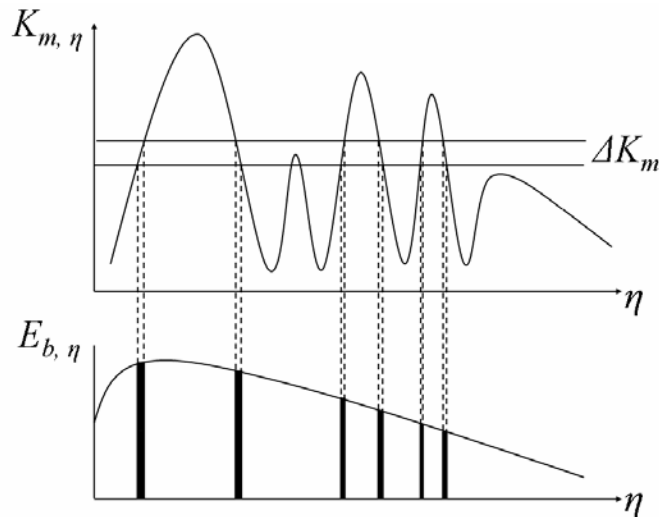


Figura. 3.3 Região espectral delimitada por $K_{m,j}$ e $K_{m,j+1}$.

A fração de energia de corpo negro em cada uma das regiões espectrais, j , é proporcional à contribuição da respectiva região para o campo radiante total. Logo, a Equação 3.2 pode ser utilizada para fornecer os pesos correspondentes aos gases cinzas definidos através da Equação 3.3.

Os pesos e coeficientes de extinção molares calculados através das equações acima podem ser utilizados no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (modelo WSGG) como originalmente apresentado por Hottel e Sarofim, 1967, para o cálculo da emitância total do gás ou na equação da transferência radiante, como proposto por Modest, 1991:

$$\frac{dI_j}{dS} = M_S K_{m,j} \left(\omega_j \frac{\sigma T_b^4}{\pi} - I_j \right) \quad (3.4)$$

onde M_S é a concentração molar da espécie química absorvedora.

Denison e Webb, 1995a, aplicaram ao modelo SLW a aproximação por escalonamento, que é uma hipótese de K -correlacionado, a fim de estender o método a meios com temperatura e concentração não uniformes.

Goody e Yung, 1989, mostraram que a aproximação por escalonamento é exata se o coeficiente de absorção espectral molar, $K_{m,\eta}$, puder ser expresso como um produto de duas funções:

$$K_{m,\eta}(\eta, T_g, P_T, Y_S) = \phi(T_g, P_T, Y_S) \psi(\eta) \quad (3.5)$$

A Figura 3.4 (a) mostra o coeficiente de absorção espectral molar de um meio que pode ser descrito pela Equação 3.5 e a Figura 3.4 (b) mostra o coeficiente de absorção espectral molar de um meio hipotético que não poderia ser descrito pela Equação 3.5.

Como pode ser observado na figura, no meio que pode ser descrito pela Equação 3.5, existe um coeficiente de absorção molar, $K_{m,2}$, referente ao estado 2 ($T_{g,2}, P_{T,2}, Y_{S,2}$), relacionado a outro coeficiente de absorção molar, $K_{m,1}$, referente ao estado 1 ($T_{g,1}, P_{T,1}, Y_{S,1}$), de forma que ambos compreendam os mesmos intervalos espectrais. Entretanto, para o meio hipotético cujo coeficiente de absorção espectral molar está representado na Figura 3.4 (b), não existe um $K_{m,2}$, no estado 2, que corresponda ao coeficiente de absorção molar $K_{m,1}$, do estado 1.

Conforme discutido em Denison e Webb, 1995a, seguem da aproximação por escalonamento as seguintes relações:

$$F\left[K'_{m,j}; T_b = T_{ref}; T_g = T_{loc}; Y_s = Y_{s,loc}; P_T = P_{T,loc}\right] = F\left[K_{m,j,ref}; T_b = T_{ref}; T_g = T_{ref}; Y_s = Y_{s,ref}; P_T = P_{T,ref}\right] \quad (3.6)$$

e

$$\omega_j = F\left[\bar{K}_{m,j+1}; T_b = T_{loc}; T_g = T_{ref}; Y_s = Y_{s,ref}; P_T = P_{T,ref}\right] - F\left[\bar{K}_{m,j}; T_b = T_{loc}; T_g = T_{ref}; Y_s = Y_{s,ref}; P_T = P_{T,ref}\right] \quad (3.7)$$

Nas Equações 3.6 e 3.7, os subscritos *loc* e *ref* são referentes, respectivamente, às características locais e do estado de referência, determinado para os valores médios dos campos

de temperatura, concentração e pressão. Na Equação 3.6, a barra acima do coeficiente de absorção indica que ele foi obtido no estado de referência.

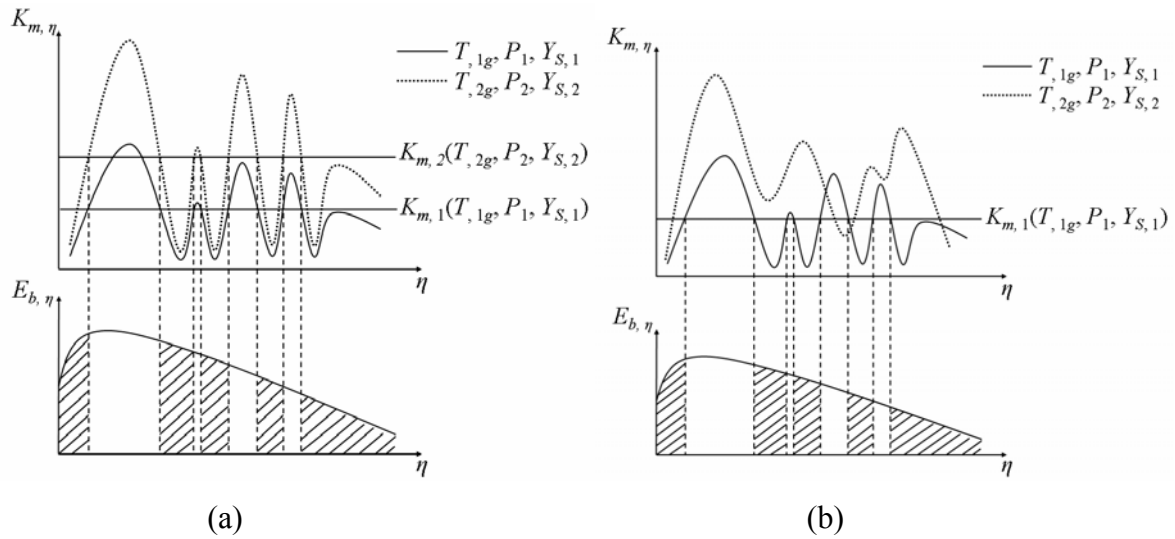


Figura. 3.4 Coeficiente de absorção espectral molar (a) de um meio com características ideais para a utilização da aproximação por escalonamento e (b) de um meio hipotético em que não poderia ser utilizada a aproximação por escalonamento.

Denison e Webb, 1995b, apresentaram correlações para a função distribuição ALB para uma mistura de CO_2 (espécie absorvedora) e ar, semelhantes às apresentadas para H_2O e ar.

Denison e Webb, 1995c, demonstraram como o modelo SLW pode ser utilizado quando duas espécies absorvedoras (H_2O e CO_2) estão presentes no gás. Nesse caso, um índice adicional l deve ser incluído na equação da transferência radiante do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas para contabilizar a segunda espécie:

$$\frac{dI_{j,l}}{dS} = K_{j,l} \left(\omega_{j,l} \frac{\sigma T_b^4}{\pi} - I_{j,l} \right) \quad (3.8)$$

O peso conjunto, $\omega_{j,l}$, é a fração da energia de corpo negro nas regiões onde ocorre sobreposição dos segmentos nos quais o coeficiente de absorção molar para o H_2O e o CO_2 são, respectivamente, $K_{m, \text{H}_2\text{O}, j}$ e $K_{m, \text{CO}_2, l}$. Os subscritos j e l denotam os j -ésimo e l -ésimo gases do somatório para H_2O e CO_2 , respectivamente.

O coeficiente de absorção para a mistura é

$$K_{j,l} = M_{H_2O} K_{m,H_2O,j} + M_{CO_2} K_{m,CO_2,l} \quad (3.9)$$

A intensidade total do campo radiante em uma dada localização é

$$I = \sum_j \sum_l I_{j,l} \quad (3.10)$$

A função distribuição ALB para uma mistura de duas espécies absorvedoras (H₂O e CO₂) e ar é

$$F_{H_2O, CO_2} \left(K_{m,H_2O}, K_{m,CO_2}, T_b, T_g, P_T, Y_{H_2O}, Y_{CO_2} \right) = \frac{1}{\sigma T_b^4} \sum_i \int_{\Delta\eta_i} E_{b,\eta}(\eta, T_b) d\eta \quad (3.11)$$

A Figura 3.5 mostra as regiões em que a energia de um corpo negro, à temperatura T_b , gerada através da função de Planck está abaixo de ambos os coeficientes de extinção molares, K_{m,H_2O} e K_{m,CO_2} .

Denison e Webb, 1995c, demonstraram que a seguinte aproximação pode ser utilizada:

$$F_{H_2O, CO_2} \left(K_{m,H_2O}, K_{m,CO_2} \right) \cong F_{H_2O} \left(K_{m,H_2O} \right) F_{CO_2} \left(K_{m,CO_2} \right) \quad (3.12)$$

Os pesos $\omega_{j,l}$ são obtidos através da equação abaixo:

$$\begin{aligned} \omega_{j,l} = & F_{H_2O, CO_2} \left(\bar{K}_{m,H_2O,j+1}, \bar{K}_{m,CO_2,l+1} \right) - F_{H_2O, CO_2} \left(\bar{K}_{m,H_2O,j+1}, \bar{K}_{m,CO_2,l} \right) \\ & - F_{H_2O, CO_2} \left(\bar{K}_{m,H_2O,j}, \bar{K}_{m,CO_2,l+1} \right) + F_{H_2O, CO_2} \left(\bar{K}_{m,H_2O,j}, \bar{K}_{m,CO_2,l} \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

que, através da Equação 3.12, podem ser aproximados por

$$\omega_{j,l} \cong \left[F_{H_2O} \left(\bar{K}_{m,H_2O,j+1} \right) - F_{H_2O} \left(\bar{K}_{m,H_2O,j} \right) \right] \cdot \left[F_{CO_2} \left(\bar{K}_{m,CO_2,l+1} \right) + F_{CO_2} \left(\bar{K}_{m,CO_2,l} \right) \right] \quad (3.14)$$

Aplicando-se ao modelo SLW as relações apresentadas acima, para a aproximação por escalonamento e para gás composto por duas espécies químicas absorvedoras, é possível obter a solução de problemas de troca radiante em meios participantes não-isotérmicos e não-homogêneos, nos quais as espécies absorvedoras são o H₂O e o CO₂ através de qualquer técnica de solução para a equação da transferência radiante.

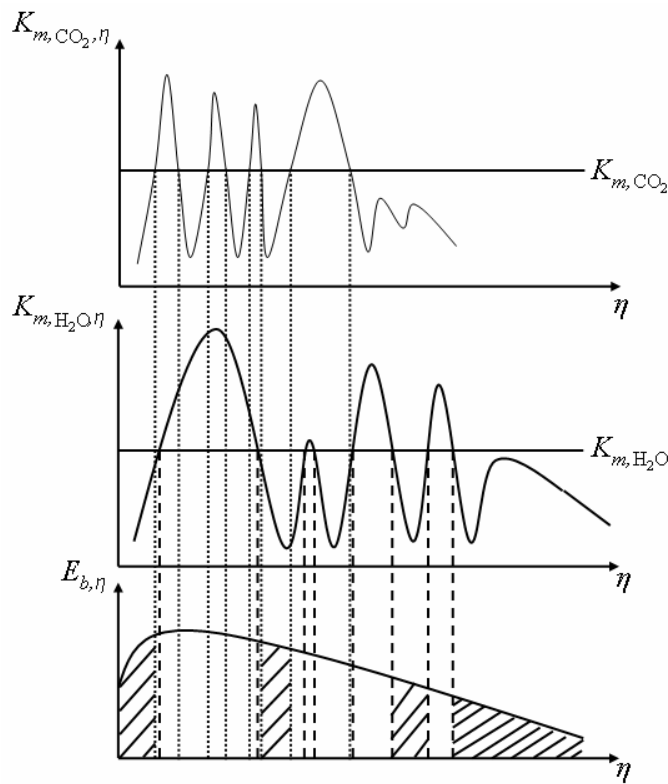


Figura 3.5 Representação gráfica das frações da energia de um corpo negro à temperatura T_b nas regiões do espectro em que $K_{m,H_2O,\eta}$ e $K_{m,CO_2,\eta}$ estão abaixo dos respectivos valores K_{m,H_2O} e

K_{m,CO_2} (região hachurada).

3.2 Formulação do Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB

Diferentes implementações podem ser propostas para a implementação do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB para o cálculo de transferência de calor por

radiação em meios participantes com propriedades espectrais, dependendo da maneira como o número de pacotes de energia é distribuído ao longo do espectro. Cada escolha resultará na obtenção de uma diferente função distribuição cumulativa, R . Assim, simplicidade de implementação e eficiência computacional foram os fatores guia para a seleção dos critérios de implementação.

A partir da definição da função distribuição ALB, a taxa de emissão de radiação de um volume de meio ΔV nas regiões espectrais em que o coeficiente de absorção molar médio é K_m dentro de um certo intervalo ΔK_m pode ser aproximado por

$$q_{\Delta V, K_m} = 4\Delta V M_s K_m [F(K_m + \Delta K_m / 2) - F(K_m - \Delta K_m / 2)] \sigma T_{\Delta V}^4 \quad (3.15)$$

Na relação acima, o produto $M_s K_m$ corresponde ao coeficiente de absorção local, onde M_s é a concentração molar da espécie absorvedora s . Denotando ΔF_{K_m} como a diferença entre as funções distribuições ALB obtidas a $K_m + \Delta K_m / 2$ e $K_m - \Delta K_m / 2$ encontra-se:

$$q_{\Delta V, K_m} = 4\Delta V M_s K_m \Delta F_{K_m} \sigma T_{\Delta V}^4 \quad (3.16)$$

Na relação acima a função distribuição ALB é calculada nas condições locais (temperaturas, concentração das espécies químicas e pressão total) do volume ΔV do meio.

Considerando que o número total de pacotes de energia lançados do volume ΔV é $N_{\Delta V}$, é proposto aqui que o número de pacotes de energia $N_{\Delta V, K_m}$ lançados de todas as regiões espectrais em que o coeficiente de absorção molar médio é K_m dentro de um intervalo ΔK_m (áreas escuras na Figura 3.3) seja proporcional à energia de corpo negro, na temperatura do volume de meio, na região espectral considerada, ou seja,

$$N_{\Delta V, K_m} = \Delta F_{K_m} N_{\Delta V} \quad (3.17)$$

Segue que a energia de um pacote associado à radiação das regiões espectrais onde o coeficiente de absorção molar é K_m é dada por

$$q_{\Delta V, K_m}^{(b)} = \frac{q_{\Delta V, K_m}}{N_{\Delta V, K_m}} = \frac{4\Delta V M_s K_m \sigma T_{\Delta V}^4}{N_{\Delta V}} \quad (3.18)$$

mostrando que a quantidade de energia de um pacote depende do valor do coeficiente de absorção molar nas regiões espectrais da energia associada ao mesmo.

Seguindo o procedimento descrito em (Siegel e Howell,2002), a frequência de pacotes lançados, associados a regiões espectrais em que o coeficiente de absorção molar é K_m é obtida por

$$f(K_m) = \lim_{\Delta K_m \rightarrow 0} \frac{N_{\Delta V, K_m}}{\Delta K_m} = \lim_{\Delta K_m \rightarrow 0} \frac{\Delta F_{K_m} N_{\Delta V}}{\Delta K_m} = \frac{dF}{dK_m}(K_m) N_{\Delta V} \quad (3.19)$$

A função densidade de probabilidade é definida como:

$$P(K_m) = \frac{f(K_m)}{\int_0^{K_{m,\max}} f(K_m^*) dK_m^*} = \frac{\frac{dF}{dK_m}(K_m) N_{\Delta V}}{[F(K_{m,\max}) - F(K_m = 0)] N_{\Delta V}} = \frac{dF}{dK_m}(K_m) \quad (3.20)$$

O resultado acima advém da definição de função distribuição ALB, em que $F(K_{m,\max}) = 1$ e $F(K_m = 0) = 0$. Finalmente, a função distribuição cumulativa é obtida:

$$R(K_m) = \int_{-\infty}^{K_m} P(K_m^*) dK_m^* = \int_0^{K_m} \frac{dF(K_m^*)}{dK_m} dK_m^* = F(K_m) \quad (3.21)$$

A Equação (3.21) mostra que, para a implementação em Monte Carlo baseada na Equação (3.17), a função distribuição cumulativa $R(K_m)$, que provê a distribuição dos pacotes de energia nas regiões espectrais onde o coeficiente de absorção espectral molar é menor que K_m é equivalente à função distribuição ALB.

Voltando-se agora para o processo de emissão de pacotes de energia por superfícies, por simplicidade considere-se que o meio participante tem temperatura e concentração das espécies químicas uniformes (extensão para meios não-uniformes será discutida mais adiante). A energia emitida por um elemento de parede cinza, tendo área ΔA e emissividade total hemisférica

ε_w associada às regiões espectrais em que o coeficiente de absorção molar médio é K_m dentro de um certo intervalo ΔK_m pode ser aproximada por

$$q_{\Delta A, K_m} = \varepsilon_w \Delta A \Delta F_{K_m} \sigma T_{\Delta A}^4 \quad (3.22)$$

Novamente é proposto que o número de pacotes emitidos por um elemento de superfície associados às regiões espectrais em que o coeficiente de absorção molar médio é K_m , dentro de um intervalo ΔK_m , seja proporcional à fração da energia de corpo negro (na temperatura do elemento de superfície, $T_{\Delta A}$) nas regiões espectrais consideradas, isto é,

$$N_{\Delta A, K_m} = \Delta F_{K_m} N_{\Delta A} \quad (3.23)$$

onde $N_{\Delta A}$ é o número total de pacotes lançados do elemento de superfície. Segue que a energia de cada pacote é

$$q_{\Delta A, K_m}^{(b)} = \frac{\varepsilon_w \Delta A e_b(T_{\Delta A})}{N_{\Delta A}} \quad (3.24)$$

Assim, todos os pacotes lançados de todos os elementos de superfície transportam a mesma quantidade de energia, que não depende das regiões espectrais.

Aplicando o mesmo procedimento apresentado para a emissão de um volume de meio, verifica-se que a equação (3.21) pode ser também aplicada para a emissão de elementos de superfície, ou seja, a função distribuição cumulativa que provê a distribuição dos pacotes de energia nas regiões espectrais em que o coeficiente de absorção espectral molar é menor que K_m é equivalente à função distribuição ALB, $R(K_m) = F(K_m)$. Para paredes não cinzas a equação (3.22) necessita ser modificada de modo a substituir a emissividade total hemisférica por uma média da emissividade hemisférica nas regiões espectrais em que o coeficiente de absorção molar é K_m , dentro de um intervalo ΔK_m . Isto deve adicionar certa complexidade ao problema, pois requer uma inspeção das linhas espectrais do meio. Entretanto, para muitos sistemas na engenharia, incluindo câmaras de combustão e outros sistemas que operam a altas temperaturas, a hipótese de parede cinza, para a qual a equação (3.22) foi deduzida, demonstra-se bastante adequada.

A base do equacionamento e dos conceitos necessários para a utilização da função distribuição ALB em cálculos de fluxos radiantes através da técnica de Monte Carlo está completa; é conveniente, agora, organizar passo a passo os procedimentos que devem ser seguidos.

3.2.1 Processo de Cálculo para Meios Homogêneos e Isotérmicos

As relações acima são válidas apenas para meios uniformes, pois foram estabelecidas a partir do trabalho realizado por Denison e Webb, 1993b, que é restrito a meios uniformes. Entretanto, no mesmo trabalho é apresentado um artifício que possibilita aplicar as relações, de maneira aproximada, à meios com campos de temperatura e concentração não uniformes. Esse artifício consiste em calcular as propriedades radiantes de todo o meio não uniforme utilizando os valores médios dos campos de temperatura e concentração, ou seja, utiliza-se para todo o meio $T_g = T_{média}$ e $Y_S = Y_{S,média}$. A temperatura de corpo negro T_b utilizada é a temperatura de fonte radiante, avaliada no local da emissão ($T_b = T_{local}$).

Primeiro passo:

Divisão da cavidade na qual se deseja calcular a transferência de calor radiante (domínio de cálculo) em zonas de volume e de superfície.

Segundo passo:

Emissão e absorção de pacotes de energia emitidos de zonas de volume de meio participante.

Para um volume de meio participante ΔV , um total de $N_{\Delta V}$ pacotes de energia são emitidos de localizações randomicamente determinadas, com igual probabilidade de ocorrência, visto que as propriedades do meio são consideradas uniformes dentro de cada zona de volume. Inicialmente um número randômico R ($0 \leq R \leq 1$) é gerado e a equação (3.21) é utilizada para determinar o correspondente coeficiente de absorção molar K_m :

$$F(K_m, T_b, T_g, P_T, Y_s) = R \quad (3.25)$$

A Equação 3.25 é uma relação implícita para encontrar K_m quando as propriedades do volume de meio (T_g, P_T e Y_s) são conhecidas e a função distribuição ALB, F , é fornecida. Correlações para a obtenção dessa função são apresentadas por Denison e Webb, 1993b, para meios tendo como

espécie absorvedora vapor de água e por Denison e Webb, 1995b, para meios tendo como espécie absorvedora o dióxido de carbono. Note-se que, para a emissão de um volume de meio, $T_b = T_g$ e a energia do pacote é fornecida pela Equação (3.18).

Uma vez emitido um pacote de energia, o passo seguinte é determinar, para uma dada direção de emissão, a localização de sua absorção. Se o meio tem temperatura e concentração de espécies químicas uniformes, para um pacote associado a regiões espectrais específicas definidas a partir de um número randômico R o coeficiente de absorção molar é K_m , assim o comprimento de caminho percorrido, l , antes que o pacote seja absorvido pelo meio pode ser encontrado através da bem conhecida relação:

$$l = -\ln(R_l) / (M_s K_m) \quad (3.26)$$

onde R_l é um número randômico entre zero e um.

Se o comprimento l determinado através da equação (3.26) for maior que a distância entre o ponto de emissão e uma zona de superfície, na direção do percurso do pacote, considera-se que o mesmo atingirá a superfície. Quando o pacote chega a uma superfície, é determinado randomicamente se este é absorvido ou refletido. Caso seja refletido, a trajetória do pacote no interior do meio participante é continuada a partir do ponto e direção de reflexão e a equação (3.26) deverá ser utilizada novamente. O procedimento deve ser repetido até que o pacote seja absorvido.

Terceiro passo:

Emissão e absorção de pacotes emitidos por zonas de superfície.

Considerando um número total de $N_{\Delta A}$ pacotes de energia emitidos de um elemento de superfície ΔA , como discutido previamente, todos transportam a mesma quantidade de energia, que pode ser obtida através da equação (3.24). Uma vez selecionadas randomicamente a localização na zona e a direção da emissão, deve-se determinar a localização da absorção do pacote de energia. Inicialmente um número randômico R é gerado para estabelecer as regiões espectrais associadas com a energia transportada pelo pacote. Novamente a equação (3.25) é utilizada para encontrar um valor K_m , sendo que a temperatura de corpo negro T_b é a temperatura do elemento de superfície e T_g, P_T e Y_s são correspondentes às condições do meio uniforme. Dessa forma, o intervalo espectral associado à radiação do pacote é relacionada às propriedades através do coeficiente de absorção molar K_m . Assim, a equação (3.26) pode ser utilizada para determinar o comprimento, l , percorrido pelo pacote antes de ser absorvido e o mesmo

procedimento descrito para a absorção dos pacotes emitidos de elementos de volume é válido para pacotes emitidos de elementos de superfície.

Quarto passo:

Os pacotes de energia emitidos e absorvidos em cada uma das zonas da cavidade são contabilizados para a determinação dos fluxos de calor por radiação entre as mesmas.

3.2.2 Procedimento de Cálculo para Meios Não-Homogêneos e Não-Isotérmicos

A fim de estender o método a casos em que o meio é não-homogêneo e não-isotérmico constituído por H_2O , CO_2 e ar, será demonstrado como os conceitos e equacionamento apresentados por Denison e Weeb (1995a, 1995b e 1995c) podem ser utilizados no contexto do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Se um pacote de energia é emitido por um elemento de meio que se encontra em um determinado estado 1, definido por $T_{g,1}$, $P_{T,1}$, $Y_{S,1}$, o coeficiente de absorção molar desse pacote pode ser calculado através da equação (3.25), conforme o procedimento descrito, anteriormente, no segundo passo. Na obtenção da função distribuição ALB, $F(K_m)$, os valores de temperatura, pressão e concentração utilizados (T_b , T_g , P_T e Y_S), são referentes ao estado 1 do volume de onde o pacote é emitido. Obtém-se, então, um valor $K_{m,1}$, para o coeficiente de absorção molar do pacote emitido. Para cada zona percorrida pelo pacote, calcula-se uma nova função $F(K_m)$, utilizando o valor de temperatura T_g , pressão e concentração, relativos ao estado da zona percorrida. Devido à relação 3.6, a utilização do mesmo número R , gerado nos cálculos relativos ao processo de emissão, assegura que os coeficientes de extinção molar, K_m , calculados em cada zona percorrida pelo pacote sejam correlacionados, da mesma forma como apresentado na Figura 3.4 (a), ao coeficiente $K_{m,1}$, referente à zona de emissão. Em outras palavras, todos os K_m 's calculados para se verificar se o pacote é absorvido em uma zona qualquer abrangem o mesmo intervalo espectral que o coeficiente de absorção molar, $K_{m,1}$, da energia radiante transportada pelo pacote.

Quando estão presentes no gás, tanto o vapor d'água quanto o dióxido de carbono, ambas espécies absorvedoras, a função distribuição ALB é definida conforme a Equação 3.11. Entretanto, como demonstrado por Denison e Webb, 1995c, essa função pode ser aproximada multiplicando-se as funções distribuição calculadas separadamente para o H_2O e para o CO_2 , conforme a Equação 3.12. O coeficiente de absorção do gás formado pela mistura entre as duas espécies absorvedoras pode ser obtido a partir da Equação 3.9.

Da mesma forma que anteriormente, é conveniente organizar passo a passo os procedimentos a serem seguidos quando a técnica de Monte Carlo é aplicada à função distribuição ALB, para meios não-homogêneos e não-isotérmicos, em que a hipótese de K -correlacionado é utilizada e no qual as espécies absorvedoras são o H_2O e o CO_2 .

Primeiro passo:

Divisão da cavidade na qual se deseja calcular os fluxos de calor radiante (domínio de cálculo) em zonas de volume e de superfície.

Segundo passo:

Emissão e absorção de pacotes emitidos por zonas de volume de meio participante
Para cada zona na cavidade, simula-se a emissão de vários pacotes de energia.

Para um volume de meio participante ΔV , um total de $N_{\Delta V}$ pacotes de energia são emitidos de localizações randomicamente determinadas, com igual probabilidade de ocorrência, visto que as propriedades do meio são consideradas uniformes dentro de cada zona de volume. Obtém-se uma função distribuição ALB utilizando-se os valores de temperatura, pressão e concentração (T_b , T_g , P_T e Y_S) relativos à zona de emissão para cada uma das espécies químicas absorvedoras e se gera números randômicos R_{H_2O} e R_{CO_2} para determinar o correspondente os correspondentes coeficientes de absorção molares $K_{m,H_2O,ZE}$ e $K_{m,CO_2,ZE}$:

$$F_{H_2O} = (K_{m,H_2O,ZE}, T_b = T_{ZE}, T_g = T_{ZE}, Y_{H_2O,ZE}) = R_{H_2O} \quad (3.27)$$

e

$$F_{CO_2} = (K_{m,CO_2,ZE}, T_b = T_{ZE}, T_g = T_{ZE}, Y_{CO_2,ZE}) = R_{CO_2} \quad (3.28)$$

onde o índice ZE indica que a propriedade é considerada no estado da zona de emissão. As funções F_{H_2O} e F_{CO_2} podem ser estabelecidas através da Equação 3.1 ou a partir das correlações apresentadas, respectivamente, por Denison e Webb, 1993b, para o vapor de água e por Denison e Webb, 1995b, para o dióxido de carbono. Tendo-se os valores dos coeficientes de extinção molares e concentrações molares M_{H_2O} e M_{CO_2} , através da a Equação 3.9, obtém-se o coeficiente de absorção do gás na zona de emissão:

$$K_{ZE} = M_{H_2O}K_{m,H_2O,ZE} + M_{CO_2}K_{m,CO_2,ZE} \quad (3.29)$$

Substituindo-se, na Equação (3.18), o produto $K_m M_s$ pelo coeficiente de absorção calculado através da equação acima, obtém-se a energia transportada pelo pacote emitido:

$$q_{\Delta V, K_{ZE}}^{(b)} = \frac{4\Delta V K_{ZE} \sigma T_{\Delta V}^4}{N_{\Delta V}} \quad (3.30)$$

Uma vez emitido um pacote de energia, a etapa seguinte é determinar, para uma dada direção de emissão, sua localização de absorção. Para meios não uniformes é necessário levar em conta as variações do coeficiente de absorção à medida que o pacote viaja no interior do meio. Visto que foi proposta a divisão do domínio em zonas de volume e de superfície com propriedades uniformes, um procedimento simples para contabilizar o efeito da não uniformidade do meio é: quando um pacote entra em uma certa zona de volume, a Equação (3.21) é novamente utilizada para encontrar valores locais para as propriedades do meio, $K_{m,H_2O,ZL}$ e $K_{m,CO_2,ZL}$, correspondentes ao intervalo espectral da radiação transportada pelo pacote:

$$F_{H_2O} = (K_{m,H_2O,ZL}, T_b = T_{ZE}, T_g = T_{ZL}, Y_{H_2O,ZL}) = R_{H_2O} \quad (3.31)$$

e

$$F_{CO_2} = (K_{m,CO_2,ZL}, T_b = T_{ZE}, T_g = T_{ZL}, Y_{CO_2,ZL}) = R_{CO_2} \quad (3.32)$$

Nas Equações (3.31) e (3.32) o índice ZL , significa zona local. Note-se que os valores de T_b , R_{H_2O} e R_{CO_2} são os mesmos determinados no processo de emissão (Equações 3.27 e 3.28), mas T_g , P_T e Y_s são substituídos para valores locais.

Com os valores locais do coeficiente de absorção molar e a Equação (3.9), obtém-se um coeficiente de absorção local:

$$K_{ZL} = M_{H_2O}K_{m,H_2O,ZL} + M_{CO_2}K_{m,CO_2,ZL} \quad (3.33)$$

Se o pacote entra em uma determinada zona de meio participante a distância percorrida dentro dessa zona antes que o pacote seja absorvido pode ser determinada randomicamente através da equação (3.26). Para tanto, é necessário substituir o produto $K_m M_S$ pelo coeficiente de absorção calculado através da Equação (3.33), resultando na seguinte equação:

$$l = -\ln(R_l)/(K_{ZL}) \quad (3.34)$$

Se o comprimento l determinado através da equação (3.34) for maior que a distância necessária para que o pacote saia da zona e chegue na zona subsequente, o pacote passa para a próxima zona. Caso a zona seguinte seja de volume de meio o procedimento deve ser repetido. Caso seja de superfície é determinado randomicamente se o pacote é absorvido ou refletido. Caso seja refletido, a trajetória do pacote no interior do meio participante é continuada a partir do ponto e direção de reflexão. O procedimento deve ser repetido até que o pacote seja absorvido.

Terceiro passo:

Emissão e absorção de pacotes emitidos por zonas de superfície.

Todos os $N_{\Delta A}$ pacotes de energia emitidos de um elemento de superfície ΔA transportam a mesma quantidade de energia, que é novamente obtida através da equação (3.24). Uma vez selecionadas randomicamente a localização na zona e a direção da emissão, deve-se determinar a localização da absorção do pacote de energia. São gerados números randômicos R_{H_2O} e R_{CO_2} para estabelecer as regiões espectrais associadas à energia transportada pelo pacote. Novamente as Equações (3.31) e (3.32) são utilizadas para encontrar os valores $K_{m,H_2O,ZE}$ e $K_{m,CO_2,ZE}$, sendo que a temperatura de corpo negro T_b é a temperatura do elemento de superfície e T_g, P_T and Y_s são correspondentes às condições em uma zona de referência qualquer no meio. Assim, o intervalo espectral associado à radiação do pacote é relacionado às propriedades dessa zona de referência no meio. Com isso, o procedimento descrito para o processo de absorção de pacotes emitidos por zonas de meio pode ser aplicado a pacotes emitidos por zonas de superfície.

Quarto passo:

Os pacotes de energia emitidos e absorvidos em cada uma das zonas da cavidade são contabilizados para a determinação dos fluxos de calor por radiação entre as mesmas.

O método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi utilizado na obtenção de alguns resultados que estão apresentados no capítulo seguinte. Foram obtidos resultados para meios gasosos homogêneos e isotérmicos, constituídos por vapor d'água e ar; para meios gasosos homogêneos, porém, não-isotérmicos, constituídos por vapor d'água; para meios gasosos não-homogêneos e não-isotérmicos, constituídos por vapor d'água e dióxido de carbono. Em um dos resultados apresentados, em que o meio não era uniforme (homogêneo não-isotérmico, constituído por H₂O e ar), foi utilizado o artifício de obter as propriedades a partir de um valor de temperatura médio. Para os demais resultados para meios não uniformes, utilizou-se a hipótese de *K*-correlacionado.

Para executar os cálculos, o método de Monte Carlo foi aplicado a todos os processos envolvidos na transferência de calor por radiação. O código computacional utilizado aqui foi desenvolvido para a obtenção de resultados apresentados por Maurente, 2003, e Maurente et al., 2004, onde informações adicionais a respeito da implementação do método podem ser obtidas. Através desse código computacional, é possível calcular os fluxos de calor por radiação no interior de cavidades que continham gás cinza. O mesmo foi modificado, na presente pesquisa, para incorporar a parte referente às propriedades espectrais.

3.3 Algumas Vantagens e Desvantagens do Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB

O método de Monte Carlo pode ser a alternativa mais viável para a solução de certos problemas de transferência de calor por radiação. Fatores como geometria complexa, reflexão especular e espalhamento da radiação dificultam a aplicação da maioria dos métodos numéricos na solução de problemas de troca radiante, enquanto que através do método de Monte Carlo tais fatores podem ser tratados sem grandes dificuldades adicionais. Assim sendo, a utilização do método de Monte Carlo em conjunto com a função distribuição ALB vem a ser uma ferramenta poderosa na solução de problemas. Além de permitir lidar de maneira simples com dificuldades como as mencionadas acima, possibilita a abordagem do comportamento espectral de meios participantes de maneira detalhada.

A aplicação do método de Monte Carlo à função distribuição ALB pode ser formulada de modo que permite relacionar diretamente a função distribuição cumulativa, do Monte Carlo, à função distribuição ALB, como demonstrado neste capítulo. Isso, além de facilitar a implementação e utilização da metodologia proposta, resulta numa melhor eficiência em tempo de processamento, visto que a utilização da equação 3.21, na qual é fundamentada a

relação do Monte Carlo com a função distribuição ALB, requer a execução de poucas operações, diferente do que acontece em outras aplicações do método à funções de distribuição, por exemplo, o Monte Carlo aplicado ao FSK, Wang et al., 2007, cuja solução da equação fundamental envolve processos de integração numérica.

Através da comparação com métodos determinísticos utilizados na solução da função distribuição ALB, como o SLW, verifica-se uma vantagem adicional do método de Monte Carlo. Enquanto as soluções por métodos determinísticos são dependentes da escolha de um arbitrário conjunto de coeficientes de absorção molares, a grande quantidade de números randômicos que deve ser gerada para reduzir as oscilações estatísticas do método de Monte Carlo naturalmente permite simular a contribuição de um grande número de coeficientes de absorção molares, evitando a especificação arbitrária. Devido ao grande número de pacotes utilizados, espera-se que os resultados obtidos com o Monte Carlo se aproximem dos obtidos através de processos de integração linha-por-linha, para certos casos, sem as dificuldades relacionadas a tais processos. Dessa forma, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB pode vir a ser utilizado na obtenção de resultados *benchmark*, de maneira bastante mais simples do que os obtidos através de procedimentos de integração linha-por-linha. No Capítulo 5, onde são apresentados resultados, essa característica do método é demonstrada.

A despeito do custo computacional elevado do método de Monte Carlo, este tem sido bastante utilizado nos últimos anos e estudos propondo técnicas para melhorar sua eficiência vem sendo realizados [Modest, 2003]. Além disso, os tempos de processamento relacionados a cálculos executados com o Monte Carlo tendem a aumentar de forma diretamente proporcional à complexidade dos problemas, enquanto que para outras técnicas se verifica maior perda de eficiência. Da mesma forma, os tempos computacionais relacionados a simulações em Monte Carlo decrescem de maneira diretamente proporcional ao aumento da capacidade de processamento dos computadores utilizados nos cálculos, sendo uma técnica bastante apropriada para utilização em sistemas de computação paralela. Os resultados obtidos em diferentes computadores não interligados podem facilmente ser compilados para fornecer um único resultados com níveis de incerteza estatística menores. Finalmente, o rápido desenvolvimento dos computadores tem proporcionado uma acentuada redução dos tempos necessários para a execução de cálculos através do método de Monte Carlo.

No Capítulo 4, que segue, é proposto o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais para melhorar a eficiência do método de Monte Carlo quando aplicado a meios participantes espectrais. O modelo é formulado de modo geral e estendido ao método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

No Capítulo 5, são apresentados resultados obtidos com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. São apresentados resultados para validação e avaliação da metodologia. Em seguida, são apresentados resultados em que o método é aplicado para analisar a magnitude de erros que podem ocorrer devido a aproximações usualmente adotadas para simplificar a abordagem de problemas de troca radiante em meios espectrais. Por fim, são apresentados resultados em que o modelo dos pacotes multi-espectrais, proposto no capítulo seguinte, é utilizado no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. São analisadas características numéricas da metodologia Monte Carlo-ALB e ganhos de eficiência proporcionados pelo modelo dos pacotes multi-espectrais.

4. MODELO DOS PACOTES DE ENERGIA MULTI-ESPECTRAIS

Contabilizar o comportamento espectral em problemas de troca de calor por radiação através do método de Monte Carlo requer a emissão de uma quantidade maior de pacotes de energia. Além da localização e das direções de emissão, o intervalo espectral associado à radiação transportada por um pacote de energia é determinado randomicamente e, portanto, está associado a uma incerteza estatística. De uma mesma localização no meio são emitidos em uma certa direção diversos pacotes de energia, que deverão ser absorvidos ao longo do caminho, na direção de emissão. Os pontos em que os pacotes são absorvidos no meio podem ser determinados randomicamente ou continuamente (Modest, 2003). Em qualquer um dos processos tanto a emissão quanto a absorção da energia são dependentes dos pontos e direções de emissão, que são associados a uma incerteza estatística. Quanto maior for o número de pacotes emitidos, menor será a incerteza associada ao resultado obtido para as trocas radiantes.

Quando o efeito espectral não é contabilizado, a energia transportada por todos os pacotes é associada a um único valor de coeficiente de absorção. A probabilidade de emissão de pacotes de energia que transportam radiação associada a este coeficiente de absorção específico é sempre igual a 1, não havendo imprecisão estatística relacionada à determinação desta grandeza. A Figura 5.1 representa uma trajetória possível para um pacote cinza emitido de um ponto no meio.

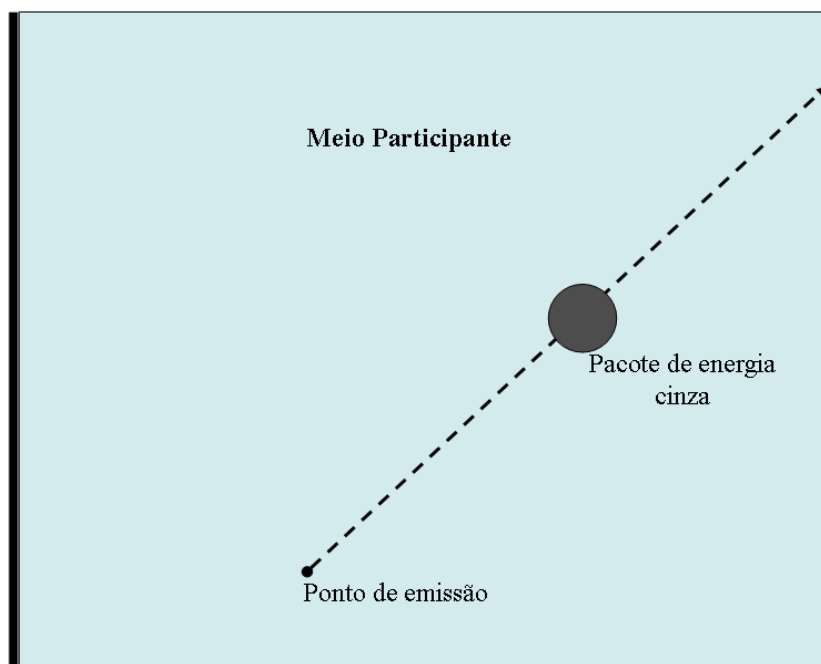


Figura 4.1 Trajetória possível para um pacote cinza qualquer.

Por outro lado, caso o comportamento espectral seja levado em conta, de cada localização e direção de emissão, pacotes de energia associados a diferentes intervalos espectrais devem ser emitidos. O coeficiente de absorção relacionado a esses pacotes de energia depende do intervalo espectral e, portanto, há uma incerteza estatística associada ao mesmo. Assim, para o caso de modelamento do comportamento espectral, a incerteza estatística relacionada ao resultado é maior que para o caso de gás cinza (para um mesmo número de pacotes emitidos), pois é multiplicada pela incerteza relacionada ao intervalo espectral. Dessa forma, a incerteza associada à caracterização geométrica (pontos e direções de emissão) é multiplicada pela incerteza relacionada à caracterização espectral.

O modelo dos pacotes multi-espectrais busca reduzir o efeito sinérgico de aumento na incerteza provocado pela combinação das incertezas associadas às características geométricas e espectrais, através da dissociação dessas incertezas. A idéia consiste em construir um pacote de energia multi-espectral composto por vários sub-pacotes cada qual associado a um único intervalo espectral (conforme representado na Figura 4.2). Assim, se um pacote multi-espectral fosse constituído por infinitos sub-pacotes, este iria conter todas as informações necessárias para caracterizar o espectro de emissão. Todos os pacotes constituídos por infinitos sub-pacotes seriam idênticos e teriam probabilidade de emissão igual a 1, em uma mesma localização e na mesma direção. Para um meio participante espectral uniforme, as probabilidades de emissão e de absorção de um pacote constituído por infinitos sub-pacotes, em qualquer localização, seria a mesma que para um meio cinza cujo coeficiente de absorção fosse igual ao coeficiente de absorção médio do meio espectral. Portanto, a incerteza estatística relacionada aos resultados das trocas radiantes seria a mesma para o meio espectral e para o meio cinza.

No modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, a incerteza estatística relacionada aos resultados será tanto menor quanto maior for o número de sub-pacotes utilizados para compor o pacote multi-espectral. Contudo, a mesma redução não será obtida para o tempo de processamento dos cálculos. O tempo necessário para a caracterização de um pacote de energia multi-espectral é diretamente proporcional ao número de sub-pacotes que o constituem. Existe, portanto, um número ótimo de sub-pacotes que deverá resultar no tempo de processamento mínimo.

Na primeira seção é apresentado o procedimento de emissão de um pacote de energia multi-espectral. Nas seções seguintes, é demonstrado como simular a absorção de pacotes multi-espectrais nos processos contínuo e discreto randômico. Por último, apresenta-se como adaptar o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB para incorporar o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais.

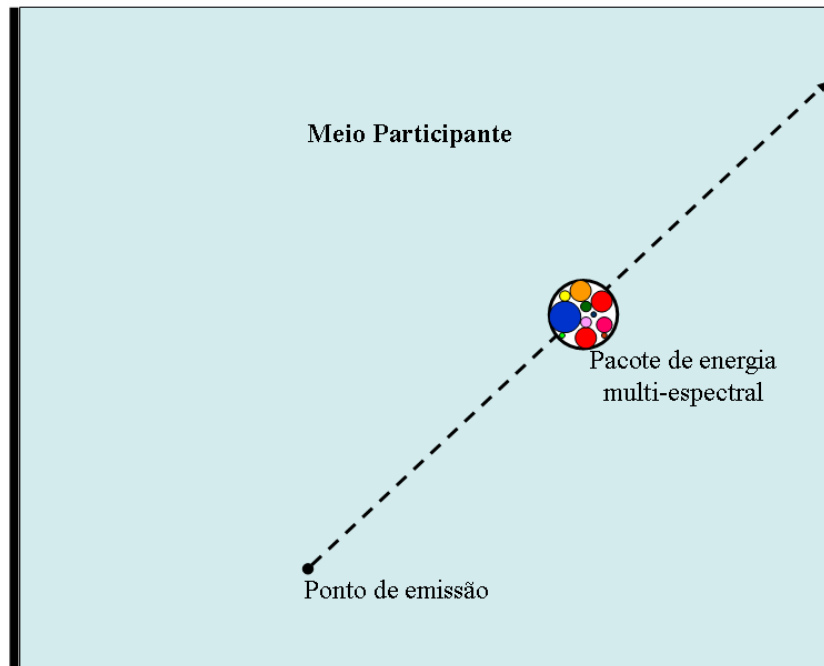


Figura 4.2 Trajetória possível para um pacote multi-espectral.

4.1 Emissão de Pacotes de Energia Multi-Espectrais

Em simulações através do método de Monte Carlo em meios espectrais, o número randômico através do qual pode ser determinado o comprimento de onda da radiação transportada pelo pacote na emissão, λ , é (Modest, 1992):

$$R_\lambda = \frac{\pi}{K_M \sigma T_b^4} \int_\lambda K_\lambda I_{b,\lambda} d\lambda \quad (4.1)$$

onde K_λ é o coeficiente de absorção espectral no local da emissão, $I_{\lambda,b}$ é a distribuição de Planck para intensidade de radiação de corpo negro e K_M é o coeficiente de absorção de Planck médio. Segue que a energia transportada por um pacote emitido pelo elemento de volume, dV , é

$$dE_{P,dV} = \frac{1}{N_p} 4K_M \sigma T_b^4 dV, \quad (4.2)$$

ou, para um volume finito,

$$E_P = \frac{1}{N_P} \int_V 4K_M \sigma T_b^4 dV = \frac{4K_M \sigma T_b^4 V}{N_P} \quad (4.3)$$

sendo cada pacote associado a um comprimento de onda específico relacionado à R_λ . N_P é o número total de pacotes emitidos por V .

O pacote de energia multi-espectral é composto de $N_{P,S}$ sub-pacotes, cada qual associado a um comprimento de onda específico e transportando a quantidade de energia $E_{P,S}$. Assim, a energia transportada pelo pacote multi-espectral é

$$E_P = \sum_{j=1}^{N_{P,S}} E_{P,S,j}, \quad (4.4)$$

onde $E_{P,S,j}$ é a energia do j -ésimo sub-pacote. Para que a energia transportada pelo pacote multi-espectral seja equivalente a que seria transportada por um pacote convencional, fornecida pela equação (4.3), a energia dos sub-pacotes é

$$E_{P,S,j} = \frac{4K_M \sigma T_b^4 V}{(N_P N_{P,S})} \quad (4.5)$$

O intervalo espectral associado a cada sub-pacote pode ser determinado através da equação (4.1). Note-se que, de acordo com a equação (4.5), o número de pacotes de energia emitidos, que é associado a cada intervalo espectral $\Delta\lambda$, é sempre o mesmo.

4.2 Absorção de Energia no Modelo dos Pacotes de Energia Multi-Espectrais

Para pacotes de energia tradicionais (associados a um único intervalo espectral), a absorção pode ser determinada randomicamente através da equação 4.6 (Modest, 1992):

$$R_{l,\lambda} = \exp\left(-\int_0^l K_\lambda dl\right) \quad (4.6)$$

onde $R_{l,\lambda}$ é um número randômico entre 0 e 1.

Se o meio é uniforme a solução da equação 4.6 é

$$l = \ln(1 - R_{l,\lambda}) \quad (4.7)$$

que fornece uma localização exata para a absorção de um pacote de energia. Entretanto, se o coeficiente de absorção $K_{l,\lambda}$ varia com a localização dependendo da temperatura e concentrações das espécies químicas locais, a solução da Equação (4.6) requer a utilização de procedimentos numéricos. Neste estudo foi proposto que a não uniformidade seja aproximada através da divisão do meio em pequenas zonas para as quais as propriedades possam ser consideradas uniformes. Assim, à medida que um pacote percorre um caminho no interior do meio, este deverá percorrer pequenos segmentos de caminho uniformes, nos quais a Equação (4.7) pode ser utilizada.

Além do processo discreto randômico tradicional descrito acima, o cálculo da absorção da energia pode ser executado através da utilização de um esquema de particionamento de energia (Modest, 2003), no qual a energia é absorvida continuamente sem a utilização de procedimentos randômicos. Esse processo de absorção contínua melhora a eficiência do método de Monte Calo na solução de problemas em meios participantes espectrais.

O processo de absorção de energia no modelo dos pacotes multi-espectrais pode ser melhor descrito para o caso de absorção contínua. Assim, optou-se por apresentar o equacionamento referente à absorção da energia transportada por pacotes multi-espectrais para o processo de absorção contínua. Mais adiante o procedimento é estendido para a absorção discreta e randômica.

4.2.1 Processo de Absorção Contínuo

À medida que um pacote multi-espectral percorre um segmento de caminho uniforme, l , a energia de cada sub-pacote é continuamente absorvida. A fração da energia do j -ésimo sub-pacote que é absorvida em l é

$$F_{A,S,j} = (1 - \exp(-K_{S,j}l)) \quad (4.8)$$

onde $K_{S,j}$ é o coeficiente de absorção relacionado ao comprimento de onda da radiação do j -ésimo sub-pacote. Segue que a energia remanescente no j -ésimo sub-pacote é

$$E_{P,S,j} = E_{P,S,j} - F_{A,S,j}E_{P,S,j} \quad (4.9)$$

Portanto, após um pacote multi-espectral percorrer um segmento de caminho l , a energia transportada em cada sub-pacote deve ser atualizada através da Equação (4.9). A energia do pacote multi-espectral é recalculada através da Equação (4.3) e dos valores atualizados de quantidade de energia transportada pelos sub-pacotes. Toda a energia que foi extraída do pacote multi-espectral deve ser contabilizada como absorvida pelo segmento de caminho l . O pacote multi-espectral, com o valor de quantidade de energia atualizado, se mantém viajando e entra no próximo segmento de caminho, o qual pode ter propriedades diferentes daquelas do anterior. O procedimento é repetido até que toda a energia do pacote multi-espectral seja absorvida.

4.2.2 Processo de Absorção Discreto Randômico

Nesta seção, é apresentado um artifício que permite calcular a absorção de energia de pacotes multi-espectrais através de processos tradicionais discretos randômicos.

A probabilidade de um pacote de energia ser absorvido ao percorrer um segmento de caminho de meio participante pode ser interpretada como a fração da energia que seria absorvida em um processo contínuo. Assim, para determinar se um pacote de energia é absorvido dentro de um segmento, pode-se gerar um número randômico e compará-lo com a probabilidade de absorção, se o número randômico é inferior à probabilidade de absorção, considera-se que o pacote é absorvido.

A Equação (4.8) fornece a fração da energia do j -ésimo sub-pacote que é absorvida em um segmento de caminho uniforme l . A fração da energia de todo o pacote multi-espectral que é absorvida em l é

$$P_A = F_A = \sum_{j=1}^{N_{P,S}} F_{A,S,j} \quad (4.10)$$

No processo de absorção discreto, os pacotes de energia são absorvidos por inteiro. A Equação (4.10) fornece a probabilidade da energia transportada por um pacote multi-espectral ser absorvida em um segmento de caminho uniforme l_1 . Se a Equação (4.10) é utilizada em um processo discreto randômico para determinar se os pacotes de energia são absorvidos em l_1 , após a contabilização de diversos pacotes de energia, a quantidade de energia absorvida é obtida. Os pacotes que não são absorvidos vão para o próximo segmento de caminho, l_2 . Da mesma forma, contabilizando-se todos os pacotes de energia que entram em l_2 , obtém-se a quantidade correta de energia que chega a esse próximo segmento.

Embora a Equação (4.10) possa ser utilizada para fornecer os valores corretos de quantidade de energia e , conseqüentemente, frações de energia absorvida em l_1 e que chega a l_2 , a absorção não é uniformemente distribuída nos comprimentos de onda e a Equação (4.10) não fornece nenhuma informação a respeito desse fato. A distribuição de energia correta nos sub-pacotes, cada qual associado a um diferente comprimento de onda, é fornecida pela Equação (4.11):

$$F_{A,S,j} = \frac{E_{P,S,j}}{E_{P,S}} \quad (4.11)$$

onde $E_{P,S,j}$ e $E_{P,S}$ são respectivamente os valores atualizados da energia transportada pelo j -ésimo sub-pacote e por todo o pacote multi-espectral, que são obtidos através das Equações (4.9) e (4.4).

Assim, se o pacote de energia multi-espectral não é absorvido, a Equação (4.11) pode ser utilizada para ajustar a distribuição da energia remanescente nos sub-pacotes. Entretanto, a energia total transportada pelo pacote multi-espectral permanece a mesma determinada no processo de emissão. Desse modo, a energia de cada sub-pacote remanescente pode ser calculada utilizando-se as frações obtidas com a Equação (4.11) através da seguinte relação:

$$E_{P,S,j} = E_p F_{A,S,j} \quad (4.12)$$

onde E_p é a energia do pacote multi-espectral como calculada no processo de emissão.

4.3 O Modelo dos Pacotes de Energia Multi-Espectrais no Método de Monte Carlo Aplicado à função distribuição ALB.

O modelo dos pacotes de energia multi-espectrais foi apresentado de forma abrangente. Assim, no equacionamento apresentado acima, o comportamento espectral é considerado através da distribuição ao longo dos comprimentos de onda a partir do equacionamento fundamental referente à utilização do método de Monte Carlo a meios espectrais como proposto por Modest, 1992. Para a utilização do modelo no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, o equacionamento apresentado deve ser ligeiramente modificado. A principal mudança é relativa à maneira como a radiação é distribuída nos sub-pacotes. Ao invés de cada sub-pacote transportar radiação associada a um intervalo de

comprimento de onda, a radiação deve ser associada a intervalos de coeficiente de absorção espectral molar, os quais são associados a um grande número de intervalos espectrais. Outra alteração é referente à quantidade de energia transportada pelos pacotes. De acordo com a formulação proposta aqui para a aplicação do método de Monte Carlo à função distribuição ALB, a energia transportada pelos pacotes varia, sendo dependente do intervalo de coeficiente de absorção molar referente à radiação do pacote. Assim, no método Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, em cada sub-pacote a quantidade de energia é dependente do intervalo do coeficiente de absorção molar (do qual depende o intervalo espectral da radiação). A quantidade de energia transportada pelo j -ésimo sub-pacote é

$$E_{P,S,j} = \frac{4K_{P,j}\sigma T_b^4 V}{(N_P N_{P,S})} \quad (4.13)$$

A equação acima difere da Equação (4.5) apenas no coeficiente de absorção, ao invés de ser utilizado o coeficiente de absorção de Planck médio, é utilizado o coeficiente de absorção relativo, ao intervalo de coeficiente espectral molar, K_m , associado à radiação transportada pelo j -ésimo pacote, o qual é determinado conforme os procedimentos descritos no Capítulo 3, utilizando-se a Equação (3.21), $R(K_m) = F(K_m)$, ao invés da Equação (4.1).

Na Equação (4.7), utilizada para determinar randomicamente a absorção de um pacote de energia no caminho de segmento l , o número randômico é referente à distribuição da radiação relativa aos valores de coeficientes de absorção molares e não de comprimentos de onda, como anteriormente. Assim, é pertinente reescrevê-la da seguinte forma:

$$l = \ln(1 - R_{l,m}) \quad (4.14)$$

onde $R_{l,m}$ é um número randômico associado a um valor do coeficiente de absorção molar, K_m .

As Equações (4.4) e (4.8) a (4.12) permanecem inalteradas e podem ser empregadas com as Equações (3.21), (4.13) e (4.14) na utilização do modelo dos pacotes de energia multi-espectrais no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

5. RESULTADOS

Os resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição de energia de corpo negro nas linhas espectrais (função distribuição ALB) foram agrupados de acordo com a finalidade para a qual sua obtenção é destinada. Na seção 5.1, são apresentados resultados cuja finalidade é a validação da metodologia proposta. Dessa forma, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi implementada de maneira a seguir a mesma seqüência – em relação à composição e campos de temperatura do gás – seguida por Denison e Webb, no desenvolvimento do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado-nas-linhas-espectrais (modelo SLW), conforme apresentado no Capítulo 3. Sendo assim, os três primeiros resultados apresentados são para gases constituídos por H₂O e ar. Considera-se: gás homogêneo e isotérmico; gás homogêneo e não-isotérmico, obtendo-se as propriedades a partir do campo de temperatura médio; gás homogêneo e não-isotérmico, considerando-se o efeito da temperatura através da aproximação por escalonamento. O resultado seguinte foi obtido para um gás não-homogêneo e não-isotérmico constituído por uma mistura formada por H₂O, CO₂ e ar. Tanto a concentração do vapor d'água quanto a do dióxido de carbono variam ao longo do domínio do problema.

Em problemas de transferência de calor em sistemas tais como fornalhas e motores de combustão interna, a solução exige que sejam considerados interativamente fenômenos de reações químicas de combustão, transporte turbulento de fluidos e trocas de calor por convecção e radiação. Devido ao grande número de fatores que devem ser considerados na abordagem de tais problemas, a aplicação de métodos espectrais detalhados na solução da parte relativa às trocas radiantes é atualmente dispendiosa computacionalmente. Por outro lado, modelos mais simples e computacionalmente eficientes como o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (WSGG) requerem a imposição de hipóteses simplificativas que levam a resultados discrepantes em relação aos experimentais ou obtidos através de técnicas mais sofisticadas. A Seção 5.2 é destinada à análise de discrepâncias relacionadas à adoção de hipóteses simplificativas necessárias para possibilitar a utilização do modelo WSGG. São avaliados os efeitos de aproximar meios participantes não-homogêneos como homogêneos e de considerar a concentração das espécies químicas como a resultante da combustão estequiométrica de certos combustíveis hidrocarbonetos, muitas vezes necessário para o emprego de correlações para as funções de ponderação dos pesos dos gases cinzas. O método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi utilizado na solução de problemas em que o meio foi considerado como homogêneo e com composição estequiométrica, o que permitiu a comparação com outros

resultados obtidos através do modelo WSGG para avaliar exclusivamente as aproximações relativas ao modelamento espectral, como a hipótese da soma-ponderada-de-gases-cinzas e a utilização de correlações para as funções de ponderação. Finalmente, resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB para meios não-homogêneos e não isotérmicos são comparados com resultados obtidos através do modelo WSGG, a fim de avaliar o efeito conjunto de todas as aproximações relacionadas ao modelo WSGG. As análises apresentadas são para geometrias unidimensionais e cilíndrica, típica de câmaras de combustão.

Na Seção 5.3, é apresentada uma solução em que o modelo dos pacotes multi-espectrais foi utilizado no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. É demonstrado que o modelo pode proporcionar uma grande melhoria na eficiência em termos de número de pacotes de energia necessários para a obtenção de níveis de oscilação estatística satisfatórios e que é capaz de reduzir o tempo de processamento em aproximadamente cinquenta por cento (50%).

Todas as funções distribuição ALB's utilizadas no método de Monte Carlo, foram geradas a partir das correlações apresentadas por Denison e Webb (1993b, 1995b). A formulação referente a essas correlações está no apêndice B.

5.1 Resultados para Validação e Análise do Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB

Os problemas apresentados nesta seção são todos unidimensionais e foram previamente solucionados por Denison e Webb (1993b, 1995b, 1995c). A mesma geometria foi considerada para todos os problemas apresentados neste capítulo, que consiste de um meio participante confinado entre duas placas planas paralelas e infinitas, como mostrado na Figura 5.1, considerando-se, entretanto, diferentes distâncias L entre as placas.

No primeiro problema é considerado que entre as placas há um meio participante com temperatura e pressão uniformes, que são $T_m = 1500$ K e $P_T = 1$ atm. O meio é um gás composto de 20% de H_2O e 80% de ar. As paredes são negras ($\epsilon_w = 1,0$) e suas temperaturas são prescritas como $T_w = 0$ K. A distância entre as placas é $L = 2$ m. Na Figura 5.1 são comparados os resultados para os divergentes do fluxo de calor obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e apresentados por Denison e Webb, 1993b, obtidos através dos modelo SLW e integração LBL. Dois resultados obtidos através do modelo SLW aparecem na figura, a diferença é relativa ao número de gases cinzas utilizados para modelar o comportamento espectral. Os fluxos de calor nas paredes são mostrados no topo da figura. O

sinal negativo no divergente do fluxo de calor indica que calor está sendo transferido do meio para as paredes frias.

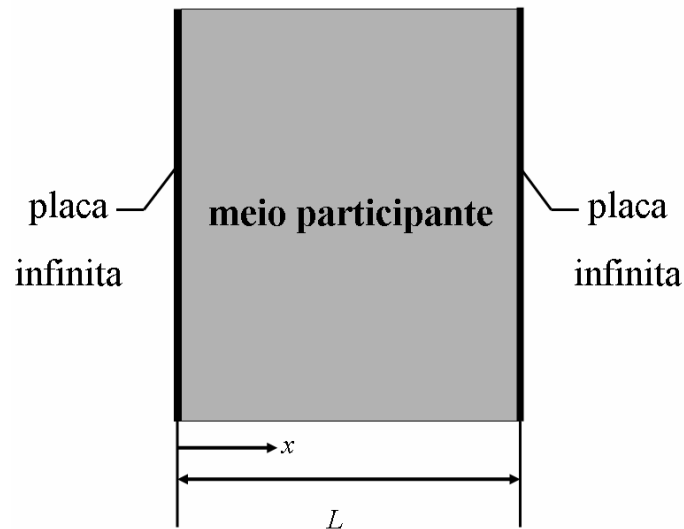


Figura 5.1 Representação da geometria referente aos problemas solucionados.

Como pode ser verificado, os resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, integração LBL e modelo SLW utilizando-se vinte (20) gases cinzas, apresentam boa concordância. O resultado obtido através do modelo SLW utilizando-se apenas três (3) gases cinzas é destoante em relação aos demais. Este resultado ilustra uma dificuldade que surge quando um método determinístico como o SLW é aplicado à função distribuição ALB. Nesse caso, é necessário arbitrar o número de gases cinzas, cada qual associados a um coeficientes de absorção específico. No método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, a grande quantidade de números randômicos necessários para reduzir as oscilações estatísticas simula naturalmente a contribuição de um grande número de coeficientes de absorção, evitando a especificação arbitrária.

O resultado obtido através do método de Monte Carlo se manteve bastante próximo do obtido através do modelo SLW utilizando-se vinte (20) gases cinzas, enquanto ambos os resultados apresentam uma pequena diferença em relação aos obtidos através da integração LBL. Isso pode ser atribuído ao fato de que tanto na solução obtida através do Monte Carlo quanto na obtida através do SLW, foi utilizada a correlação apresentada por Denison e Webb, 1993b, para a função distribuição ALB. Para o problema de meio uniforme solucionado, a utilização da função distribuição ALB obtida dos bancos no modelo SLW com infinitos gases cinzas deverá resultar na solução exata. Portanto, como no método de Monte Carlo aplicado à função

distribuição ALB são utilizados uma infinidade de pacotes de energia, o método fornece a solução exata para este tipo de problema.

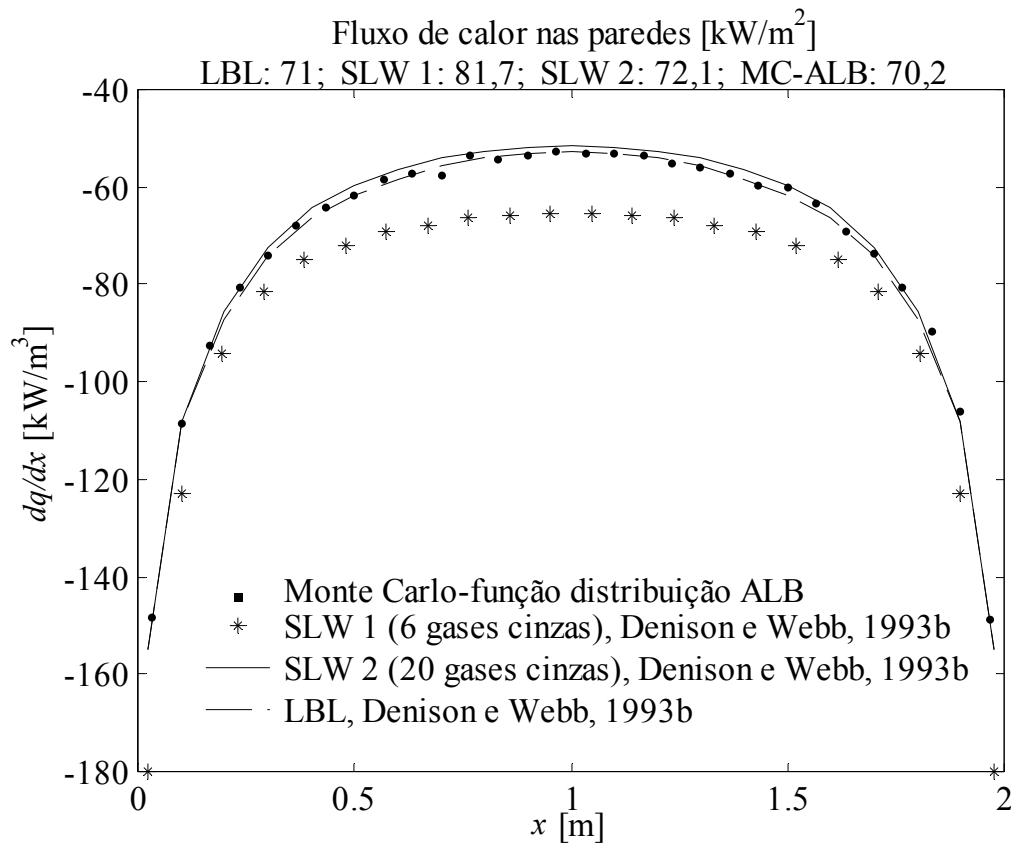


Figura 5.2 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes para um gás constituído de 20% de H₂O e 80% de ar, que está a 1500 K e pressão de 1 atm.

Para o segundo problema, a distância entre as placas é de 1,0 m. As paredes são negras e sua temperatura é de 400 K. O gás é uma mistura constituída de ar e 10 % de H₂O.

O perfil de temperaturas do gás é parabólico e pode ser descrito pela equação abaixo:

$$T(x) = -6400x^2 + 6400x + 400 \quad (5.1)$$

Na Figura 5.3 aparecem os resultados para os divergentes do fluxo de calor no meio participante, obtidos através dos método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, modelo SLW (com 20 gases cinzas) e integração linha-por-linha (LBL). O sinal negativo indica

que o gás emite mais do que absorve, transferindo calor para as paredes. Assim, o fluxo de calor para as paredes, que é mostrado no tipo da figura, é positivo.

As propriedades do meio foram avaliadas na temperatura média, $T_g = 1466,67$ K, para a obtenção das soluções através dos modelo SLW e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Entretanto, a temperatura da fonte T_b utilizada foi a temperatura local, obtida através da Equação 5.1. Para a solução através da integração LBL, ambas as temperaturas, T_g , T_b utilizadas foram as locais. Isso explica a maior divergência dos resultados próximo às paredes e no centro, pois são os locais em que as temperaturas se afastam mais do valor médio.

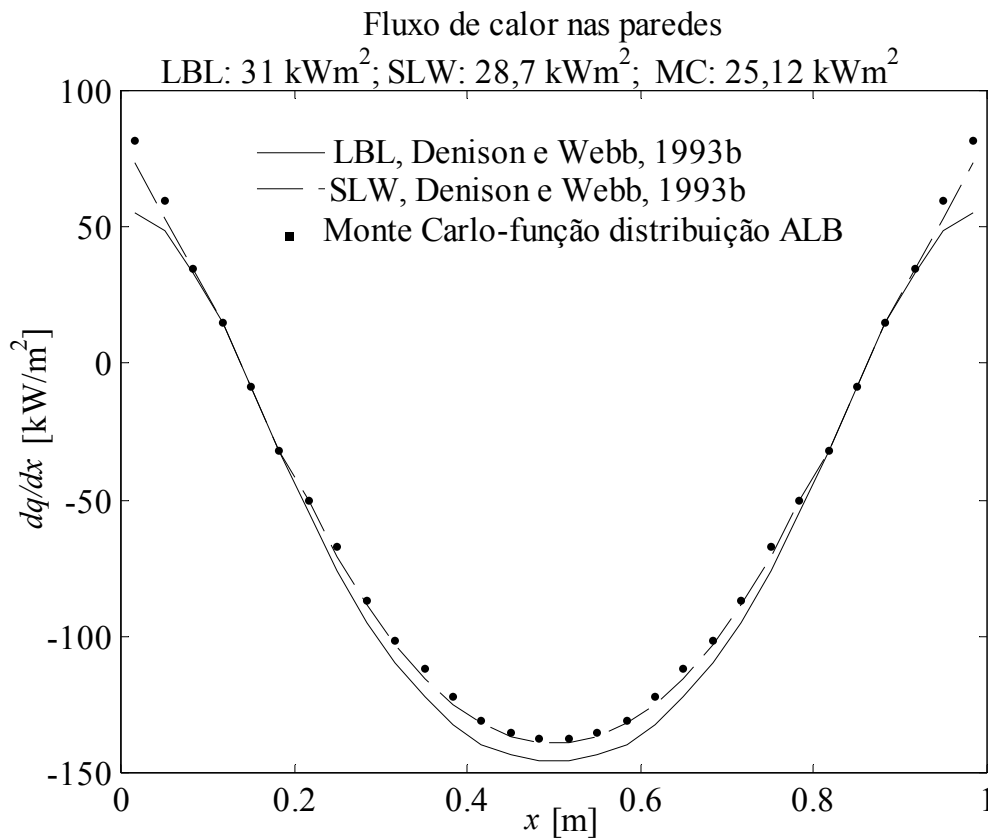


Figura 5.3 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para um gás constituído de 10% de H_2O e 90% de ar, com perfil de temperatura parabólico.

No terceiro problema foi adotada a hipótese de K -correlacionado para contabilizar o efeito da não-uniformidade da temperatura, diferente do caso anterior em que a temperatura não uniforme era aproximada como a temperatura média para a obtenção das propriedades. No Capítulo 3, Seção 3.2, foi discutido como o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB pode ser modificado para utilização em problemas nos quais o meio

participante é não uniforme através da incorporação da hipótese de K -correlacionado. Neste problema, as paredes são novamente negras ($\varepsilon_w = 1,0$) e estão separadas por uma distância $L = 2,0$ m. O meio é homogêneo e composto de 10% de H_2O e 90% de ar e sua distribuição de temperatura é fornecida pela seguinte relação:

$$T_m = 1000 + 500 \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot x}{L}\right) [K] \quad (5.2)$$

As temperaturas das paredes são $T_{w,x=0m} = 1500$ K e $T_{w,x=2.0m} = 500$ K, assegurando a continuidade de temperatura nas interfaces entre o meio e as superfícies.

A Figura 5.4 compara os resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB com os resultados obtidos através do modelo SLW e integração LBL [Denison e Webb, 1995b]. Como pode ser observado, o Monte Carlo e o SLW apresentaram boa concordância, embora as soluções obtidas através de ambos tenha se afastado um pouco da obtida por integração LBL para $x > 1,0$ m, visto que tanto no método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB quanto no modelo SLW foi empregada a mesma correlação para aproximar a função distribuição ALB.

O último problema traz uma complexidade adicional: tanto a temperatura como as concentrações de ambas as espécies absorvedoras, H_2O e CO_2 , não são uniformes entre as placas, que são separadas por uma distância $L = 3,0$ m. As paredes são cinzas e têm emissividade $\varepsilon_w = 0,75$. A pressão total da mistura gasosa é $P_T = 1$ atm e as concentrações de vapor d'água e dióxido de carbono são fornecidas pelas seguintes equações:

$$Y_{H_2O}(x) = 0.2 - 0.15 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.3)$$

e

$$Y_{CO_2}(x) = 0.133 + 0.1 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (5.4)$$

De acordo com as relações acima, a concentração de vapor d'água varia de 5 a 35%, enquanto a concentração de dióxido de carbono varia de 3,3 a 23,3%. A temperatura do meio varia de 400 a 1000 K, conforme a seguinte equação:

$$T_m(x) = 700 - 300 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad [\text{K}] \quad (5.5)$$

As temperaturas das paredes são $T_{w,x=0\text{m}} = 400\text{ K}$ e $T_{w,x=2.0\text{m}} = 1000\text{ K}$.

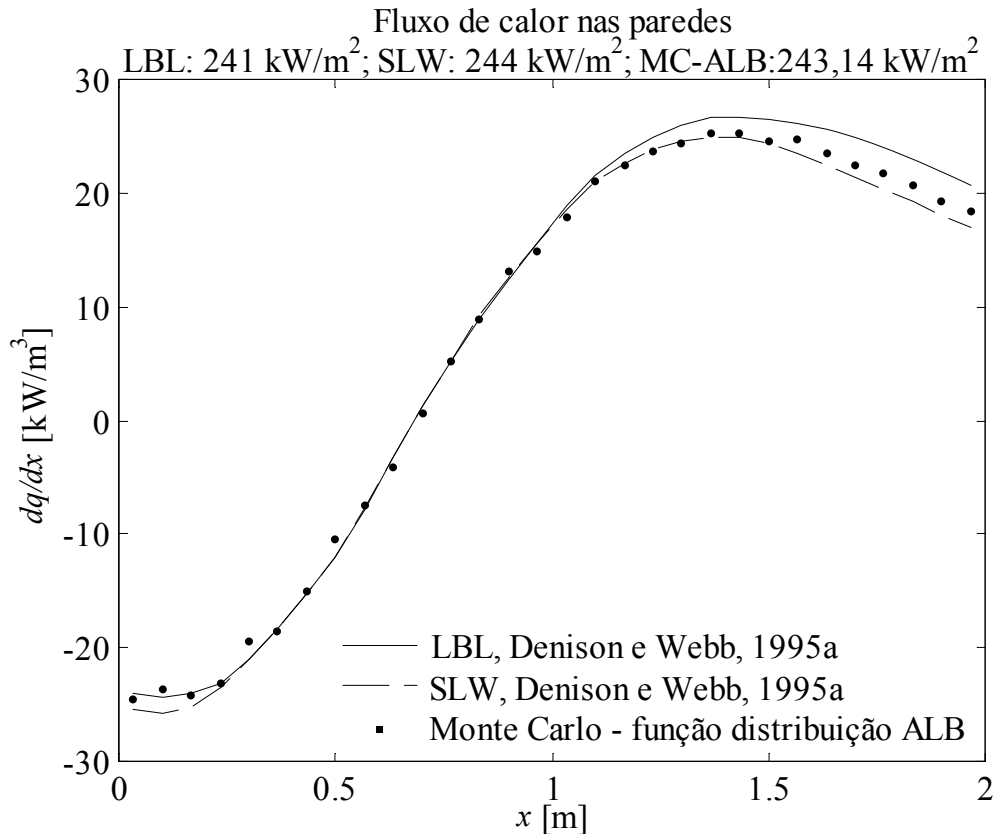


Figura 5.4 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para um gás constituído de 10% de H_2O e 90% de ar, que apresenta um perfil de temperaturas fornecido pela Equação (5.2).

A não homogeneidade das concentrações das espécies absorvedoras bem como da temperatura foram consideradas através do procedimento esboçado no Capítulo 3, Seção 3.2. A Figura 5.5 mostra resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, do modelo SLW e da integração LBL. As soluções apresentaram boa concordância, com exceção de uma pequena diferença no centro ($1,0\text{ m} < x < 1,6\text{ m}$), onde o resultado obtido com o modelo SLW diferiu quase 2,5% dos demais, e no lado direito ($x > 2,5\text{ m}$).

Nos três primeiros problemas apresentados o volume de gás entre as placas foi dividido em trinta (30) zonas de volume igualmente espaçadas. No último problema, devido à

acentuada variação nas concentrações e temperatura, o volume de gás foi dividido em cinquenta (50) zonas igualmente espaçadas. Os fluxos de calor por radiação foram calculados efetuando-se o somatório através de todos os pacotes de energia absorvidos pelas paredes e dividindo o resultado por uma área de referência. As soluções foram obtidas com um código computacional em Monte Carlo 3D, que foi adaptado para considerar refletividade total especular para a superfície cilíndrica lateral e, dessa forma, simular a geometria de placas planas infinitas. Para o propósito de determinar a área de referência, foi escolhido um raio de 1,0 m para o cilindro, embora os resultados sejam independentes do diâmetro.

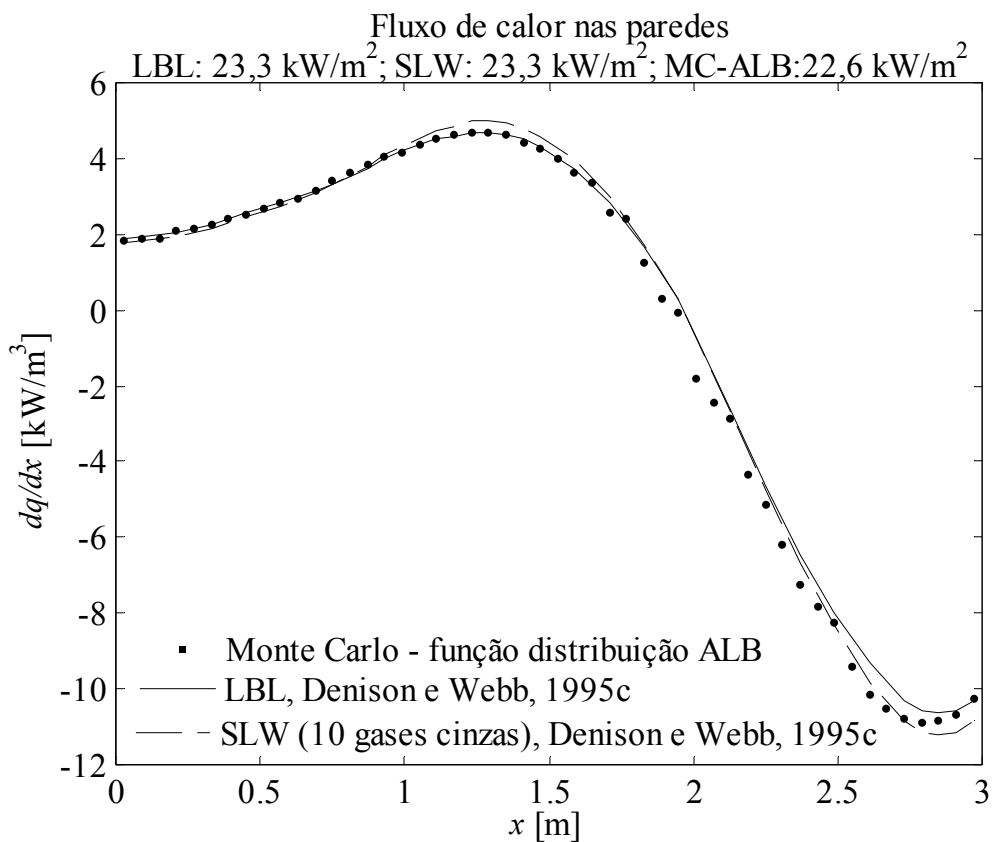


Figura 5.5 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para um gás cujas distribuições de concentrações de H₂O e CO₂ e de temperaturas são fornecidas pelas Equações (5.3), (5.4) e (5.5).

Para a obtenção dos resultados apresentados nesta seção, o número de pacotes de energia emitidos de cada zona foi da ordem de magnitude de um milhão. Com isso, o desvio padrão associado aos divergentes do fluxo de calor se manteve abaixo de 4% do valor máximo do divergente do fluxo de calor para caso. Esse nível de oscilação é baixo o suficiente para viabilizar a análise comparativa entre os resultados obtidos com o método de Monte Carlo

aplicado à função distribuição ALB os resultados obtidos através dos modelo SLW e integração LBL.

Os resultados obtidos através do método de Monte Carlo apresentados nesta seção, bem como todos os resultados relativos a geometrias unidimensionais obtidos através do método de Monte Carlo apresentados neste trabalho, foram obtidos utilizando-se um código computacional tridimensional apropriado para a solução da transferência de calor por radiação em meios participantes confinados em cavidades cilíndricas. As geometrias unidimensionais foram modeladas considerando-se que a parede lateral cilíndrica reflete de modo totalmente especular cem por cento (100%) da radiação que chega até a mesma. Por esse motivo, uma análise numérica a respeito de tempos de processamento não seria adequada para os problemas relativos a geometrias unidimensionais. Uma análise a respeito da relação entre número de pacotes emitidos, incerteza estatística e tempo de processamento será apresentada para os problemas em que a cavidade apresenta geometria cilíndrica, para os quais o código computacional pode ser diretamente aplicado, sem a adoção de nenhum tipo de artifício numérico, que teria algum efeito sobre o tempo de processamento.

5.2 Avaliação de Discrepâncias Relativas às Aproximações Necessárias para a Utilização do Modelo WSGG

Em função da alta temperatura dos gases decorrentes de processos de combustão, a radiação térmica é geralmente o modo de transferência de calor dominante em fornalhas e motores de combustão interna. Entretanto, o modelamento das trocas de calor em tais sistemas não é limitado à radiação térmica, sendo necessária a solução interativa de processos de combustão, escoamento turbulento e transferência de calor por convecção e radiação. Dessa forma, a aplicação de métodos avançados ao modelamento das propriedades espectrais do meio participante não é viável para a maioria dos casos.

Devido a sua simplicidade, o modelo WSGG é provavelmente o mais utilizado em problemas de transferência de calor por radiação em meios participantes. Entretanto, apresenta limitações significativas. É postulado que as emitância e absortância totais do meio participante possam ser representadas através de um valor ponderado médio das emitância e absortância totais de um pequeno número de gases cinzas (em geral três). Os coeficientes de absorção desses gases cinzas são considerados constantes e a ponderação da contribuição (pesos) de cada um deles para as trocas de calor totais são dependentes apenas da temperatura. A concentração das espécies químicas absorvedoras necessita ser considerada constante. Além disso, utiliza-se

correlações para a obtenção dos pesos dos gases cinzas na soma ponderada. Smith et al., 1982, apresentou correlações para gases produzidos na combustão estequiométrica de dois hidrocarbonetos típicos: metano (20% de H₂O, 10% de CO₂ e 70 % de ar) e etano (10% de H₂O, 10% de CO₂ e 80% de ar). Enquanto tais correlação são adequadas para concentrações decorrentes de combustão completa e quando os produtos encontram-se completamente misturados, sua validade não é esperada para os meios não-homogêneos comumente encontrados no interior de câmaras de combustão.

A fim de investigar os erros relacionados às aproximações necessárias para a aplicação do modelo WSGG, foram obtidos diversos resultados que são apresentados nesta seção. Na Subseção 5.2.1, são apresentados resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB para meios unidimensionais com o objetivo de analisar o efeito da concentração das espécies químicas. Na Subseção 5.2.2 é também investigado o efeito da concentração. Entretanto, a geometria e as distribuições de temperatura e concentração são baseadas nas encontradas em uma câmara de combustão típica. Na Subseção 5.2.3 são analisados erros relacionados à hipótese de soma-ponderada-de-gases-cinzas. Na última subseção, a 5.2.4, é analisado o efeito da aplicação do modelo WSGG como um todo, ou seja, é considerado o efeito conjunto das duas aproximações tratadas nas sub-seções anteriores.

5.2.1 Análise do Efeito da Concentração das Espécies Químicas: Geometria Unidimensional

A fim de demonstrar o erro que é relacionado à hipótese de mistura de gases estequiométrica homogênea, a metodologia em Monte Carlo proposta foi utilizada, nesta seção, na solução de seis casos-teste. Os dois primeiros são baseados no segundo problema apresentado na seção anterior, cuja solução aparece na Figura 5.3, a geometria e o perfil de temperatura são os mesmos. Assim, $L = 1,0$ m e a distribuição de temperatura é fornecida pela Equação (5.1). A diferença é referente à concentração das espécies químicas. Para o primeiro caso, foi considerado um meio em que as concentrações de vapor d'água e dióxido de carbono são fornecidas pelas equações abaixo:

$$Y_{H_2O}(x) = -0.9(x/L)^2 + 0.9(x/L) + .05 \quad (5.6)$$

e

$$Y_{CO_2}(x) = -0.42(x/L)^2 + 0.42(x/L) + .03 \quad (5.7)$$

Assim, a concentração do vapor d'água varia de 5%, próximo às paredes, a 27,5%, na meia distância entre as placas ($x = 0,5$ m), resultando em uma concentração média de 20%, enquanto a concentração do dióxido de carbono varia de 3 a 13,5%, resultando em uma concentração média de 10%. A solução do problema de transferência de calor para esse meio não-homogêneo é comparada com solução para uma mistura homogênea tendo 20% de H₂O e 10% de CO₂. Para ambos os meios participantes, a solução foi obtida através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

A Figura 5.6 mostra os divergentes do fluxo de calor no meio para as duas misturas de gases. Como pode ser visto, a diferença foi maior no centro ($x = 0,5$ m) e próximo às paredes ($x = 0$). Os resultados para os fluxos de calor nas paredes são mostrados no topo da figura. Note-se que houve uma diferença considerável, o fluxo foi 29% maior para o meio não-homogêneo: 83,55 kW/m² versus 59,66 kW/m².

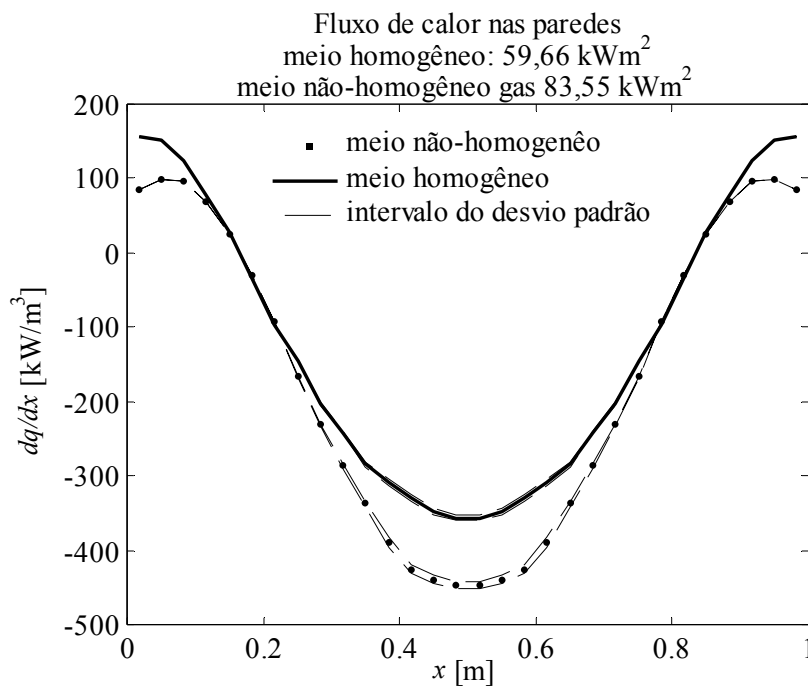


Figura 5.6 Divergentes do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para um meio homogêneo (20% H₂O e 10% CO₂) e para um meio não-homogêneo: concentrações fornecidas pelas Equações (5.6) e (5.7).

Para uma análise estatística, o intervalo de confiança do desvio-padrão é apresentado para os dois resultados mostrados na figura. Junto à curva referente a cada resultado podem ser

vistas outras duas curvas, a superior é obtida somando-se o valor do desvio-padrão ao respectivo resultado, enquanto na a inferior, o desvio-padrão é subtraído.

No segundo caso considerado, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi utilizado na solução de dois problemas em meios uniformes, mas diferindo no valor das concentrações de vapor d'água e dióxido de carbono. Em um dos meios, a concentração das espécies químicas é novamente a resultante da combustão estequiométrica do metano, ou seja, 20% H₂O e 10% CO₂. No outro, as concentrações de ambas as espécies químicas são 25% menores (15% H₂O e 7,5% CO₂). Como no problema anterior, a distribuição de temperatura é fornecida pela Equação 5.1 e a distância de separação entre as placas é $L = 1,0$ m. A Figura 5.7 mostra que, como no caso anterior, as maiores diferenças foram no centro ($x = 0,5$ m) e próximo às paredes ($x = 0$ m). Ocorreu também uma diferença considerável para os fluxos de calor nas paredes, aproximadamente 16%: 51,55 kW/m² para o meio constituído de 15% de H₂O e 7,5% de CO₂ versus 59,66 kW/m² para o meio estequiométrico. Na Figura 5.7 são novamente mostrados os intervalos de confiança dos desvios padrão dos resultados.

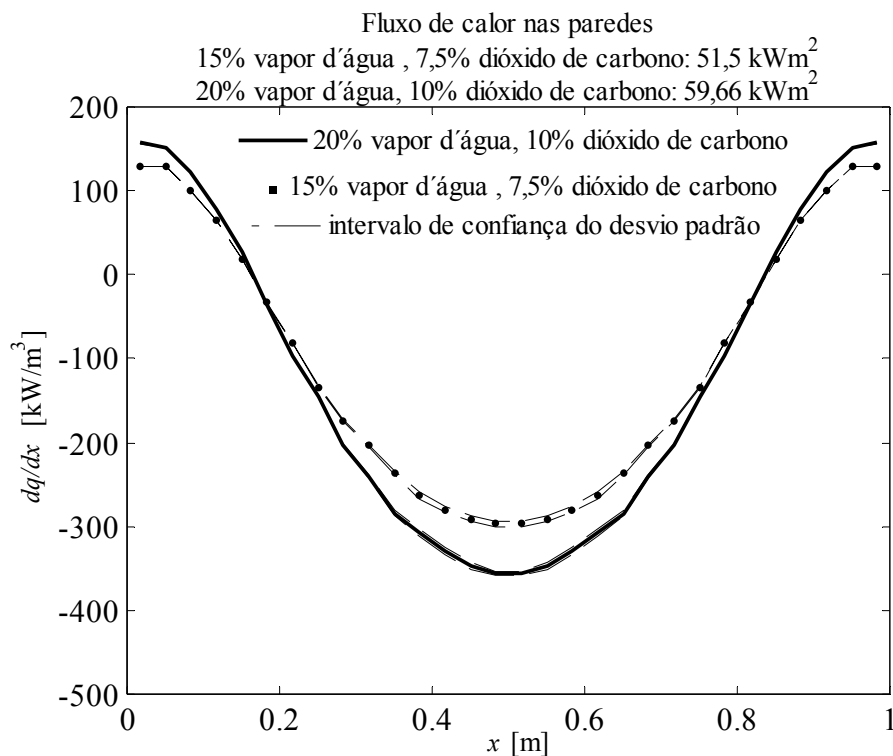


Figura. 5.7 Divergentes do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxo de calor nas paredes para meios homogêneos: (20% H₂O e 10% CO₂) e (15% H₂O e 7.5% CO₂).

Todas as soluções apresentadas nas Figures 5.6 e 5.7 foram obtidos calculando-se o valor médio dos resultados obtidos em um total de 80 simulações em Monte Carlo. A geometria foi dividida em trinta (30) zonas de volume de meio participante e cada superfície foi considerada uma zona. Em cada simulação foram emitidos 50 mil pacotes de energia de cada zona de volume e de superfície, isto é, um total de quatro milhões ($4 \cdot 10^3$) de pacotes de cada zona em todas as simulações. O desvio-padrão foi calculado a partir das 80 amostras. Para todos os casos, o desvio-padrão percentual, relativo ao valor absoluto máximo do divergente do fluxo de calor, que ocorre no centro, se manteve abaixo de 1,5%. Como pode ser verificado através das figuras, o desvio-padrão foi menor próximo às paredes, mantendo-se abaixo de 0,085% para todos os casos. O grande número de pacotes de energia emitidos necessário para a redução das oscilações estatísticas pode ser atribuído ao fato de que a presente metodologia em Monte Carlo foi implementada sem o uso de técnicas que poderiam aumentar sua eficiência. A utilização de um esquema de particionamento de energia, como empregado por Wang et al., 2007, e uma melhor distribuição da emissão de energia nas zonas, de acordo com sua temperatura, deve reduzir consideravelmente o número de pacotes requeridos.

Os combustíveis mais comuns são constituídos principalmente por hidrogênio e carbono. Estes são chamados de combustíveis hidrocarbonetos. No processo de combustão completo de combustíveis hidrocarbonetos, o gás produto é composto apenas por vapor d'água e dióxido de carbono e sua concentração depende do tipo de combustível, além do balanço entre ar e combustível na reação química de combustão. Para os três casos seguintes, será novamente considerado o meio gerado na combustão estequiométrica do metano. Os resultados para as trocas radiantes nesse meio serão comparados com resultados obtidos para meios também produzidos na combustão do metano, entretanto, em reações que ocorrem com excesso de ar, ao invés de hipotéticas frações estequiométricas de ar e combustível. Foram consideradas reações com 50 e 100% de excesso de ar.

Em uma reação com 50% de excesso de ar as frações de vapor d'água e dióxido de carbono do meio produzido são 13,1 e 6,55%, respectivamente. A transferência radiante foi calculada para um meio na temperatura adiabática de chama relativa à reação com 50% de excesso de ar, a saber, 1780 K. As paredes foram assumidas como negras e mantidas a baixa temperatura de 300 K. A distância de separação entre as mesmas é $L = 1,0$ m. Na Figura 5.8 são mostrados os resultados para os divergentes do fluxo de calor no meio e, no topo da figura, os fluxos de calor nas paredes.

Para a reação com 100% de excesso de ar, o meio produzido é constituído de 10% H_2O e 5% CO_2 . A figura 5.9 mostra os resultados para divergente do fluxo de calor no meio e os

fluxos de calor nas paredes obtidos considerando-se a temperatura do meio 1476 K, que é a temperatura adiabática de chama referente à combustão do metano com 100% de excesso de ar.

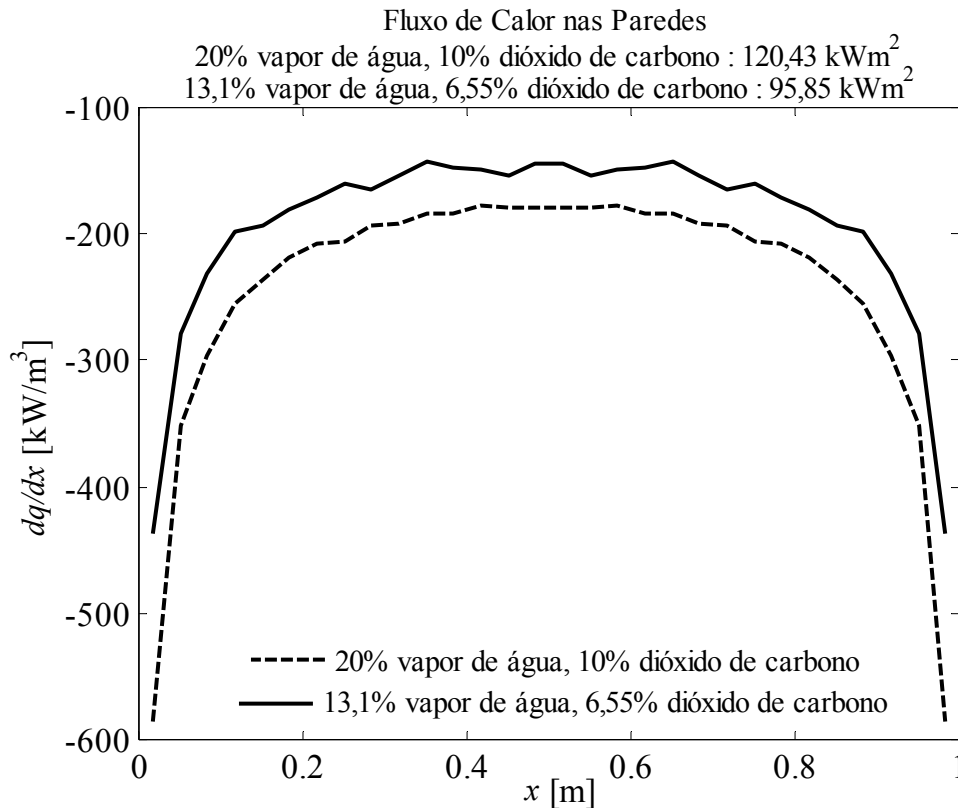


Figure 5.8 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes para dois meios homogêneos a 1780 K, tendo concentrações: (20% H_2O e 10% CO_2) e (13,1% H_2O e 6,55% CO_2).

Em sistemas de combustão reais o meio não é isotérmico. Devido a isso, no caso seguinte a temperatura do meio é considerada como não uniforme. Novamente, são comparadas situações em que os produtos da combustão são gerados em reações de combustão do metano estequiométrica e com 100% de excesso de ar. Assim, as temperaturas adiabáticas de chama referentes a essas duas reações de combustão foram as escolhidas como máxima e mínima temperaturas para ambos os meios. O perfil de temperatura é parabólico e fornecido pela Equação (5.8) Dessa forma, a máxima temperatura, 2327 K, que é a temperatura adiabática de chama referente à combustão estequiométrica ocorre no centro, enquanto a mínima, 1476 K, ocorre na interface com as paredes:

$$T(x) = -3404x^2 + 3404x + 1476 \quad (5.8)$$

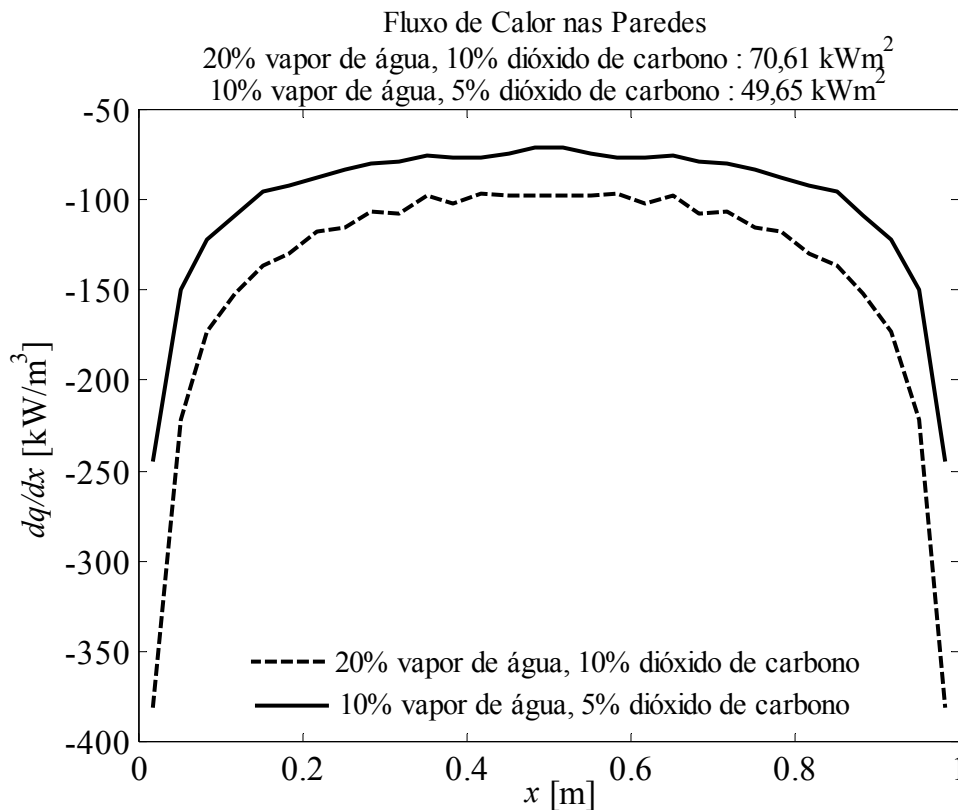


Figura 5.9 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes para dois meios homogêneos a 1476 K, tendo concentrações: (20% H₂O e 10% CO₂) e (10% H₂O e 5% CO₂).

Para assegurar a continuidade de temperatura no domínio, as paredes foram consideradas a 1476 K.

A Figura 5.10 mostra o resultado para o divergente do fluxo de calor no meio para as duas misturas de gases. Como pode ser visto, a discrepância foi maior no centro ($x = 0,5$ m), onde a temperatura é mais elevada, e próximo às paredes ($x = 0$ m). Os fluxos de calor nas paredes, que aparecem no topo da figura, mostram que há uma diferença considerável entre os resultados. O meio estequiométrico transfere 52% mais calor (70,3 kW/m²) do que aquele produzido na combustão do metano com 100% de excesso de ar (46,2 kW/m²).

O octano é o principal hidrocarboneto encontrado na gasolina. Para esse composto, as correlações apresentadas por Smith et al., 1982, não são adequadas nem mesmo para produtos da combustão estequiométrica totalmente misturados de maneira a constituir um meio homogêneo.

Na reação de combustão do octano nas frações estequiométricas de ar e combustível, o gás produzido é composto de 14% de H_2O , 12,5% de CO_2 e 73,5% de espécies não participantes. No último caso, é considerado um meio nessas frações de concentração de espécies químicas, representando o gás produzido na combustão estequiométrica do octano. A solução é comparada com o resultado obtido para um meio tendo como espécies participantes 10% de H_2O e 10% de CO_2 , o qual é gerado na combustão estequiométrica do etano. Esse meio foi escolhido para comparação devido ao fato de que dentre os meios para os quais Smith et al., 1982, apresentaram correlações para utilização no modelo WSGG, é o que mais se aproxima do gerado na combustão estequiométrica do octano. A temperatura do meio foi assumida como sendo a temperatura adiabática de chama da combustão estequiométrica do octano, 2304 K. As paredes foram consideradas negras e sua temperatura é de 300 K. A Figura 5.12 mostra os resultados obtidos para os divergentes do fluxo de calor no meio. No topo da figura, apresentam-se os fluxos de calor nas paredes.

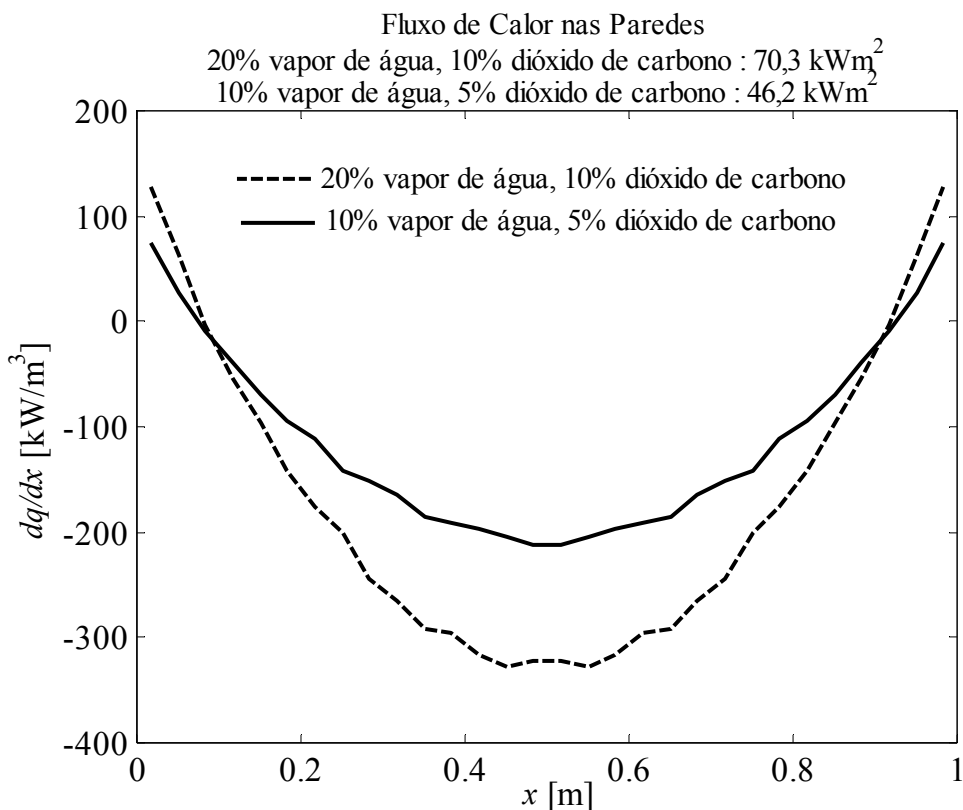


Figure 5.10 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes para dois meios homogêneos com distribuição de temperatura fornecida pela Equação 5.8 e tendo concentrações: (20% H_2O e 10% CO_2) e (10% H_2O e 5% CO_2).

Observando-se a Figura 5.11, é possível perceber que há uma diferença significativa entre os divergentes do fluxo de calor no meio, a qual se torna ainda mais expressiva próximo às paredes. O fluxo de calor nas paredes foi de $170,5 \text{ kW/m}^2$ para o meio composto por 10% de H_2O e 10% de CO_2 , 16,6% menor que $204,5 \text{ kW/m}^2$, obtido para o meio composto por 14% de H_2O e 12,5% de CO_2 . Esse resultado está em plena concordância com o obtido para a taxa líquida de transferência de calor no meio, que foi 16,6% maior para o meio composto por 10% de H_2O e 10% de CO_2 , indicando que perdeu menos calor para as paredes que o outro meio participante.

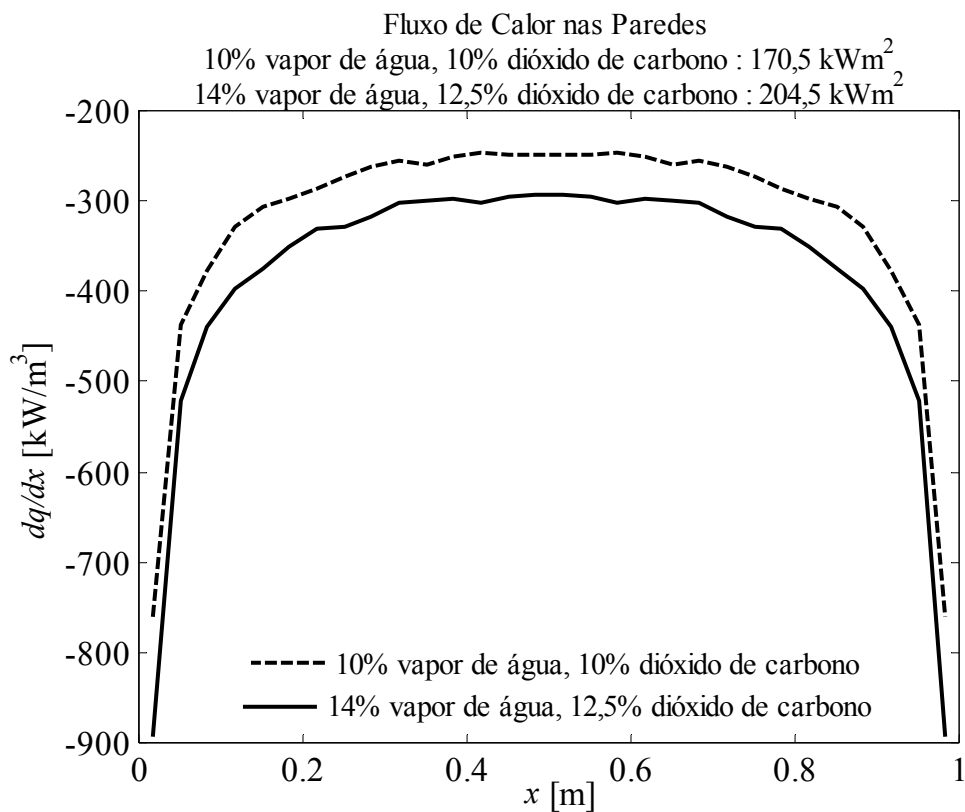


Figura 5.11 Divergente do fluxo de calor ao longo das zonas de gás e fluxos de calor nas paredes para dois meios homogêneos a 2304 K, tendo concentrações: (10% H_2O e 10% CO_2) e (14% H_2O e 12,5% CO_2).

Para todas as simulações em Monte Carlo a geometria foi dividida em trinta (30) zonas de volume de meio participante e cada superfície foi considerada uma zona. O número de pacotes de energia emitidos de cada zona foi da ordem de magnitude de um milhão. O desvio-padrão associado aos divergentes do fluxo de calor se manteve abaixo de 4% do valor absoluto local do divergente do fluxo de calor, para os casos de meio isotérmico, e abaixo de 4% do valor

da máxím do divergente do fluxo de calor (que ocorre no centro), para o caso de meio não isotérmico.

5.2.2 Análise do Efeito da Concentração das Espécies Químicas: Geometria Cilíndrica

Visito que grande parte da motivação para a o estudo da transferência de calor por radiação em meios participantes advém de processos de combustão em fornalhas, a partir de agora, a análise será estendida a problemas em uma cavidade cilíndrica com características baseadas nas encontradas em uma câmara de combustão típica, para a qual Silva, 2005, e Silva et al., 2007, apresentaram solução para o problema da transferência de calor através de procedimentos de cálculo iterativos, envolvendo combustão, convecção e radiação.

O problema solucionado consiste de uma câmara de combustão cilíndrica com 1,7 m de comprimento e 0,5 m de diâmetro (conforme representado na Figura 5.12), que opera à base de queima de gás natural. Os campos de temperatura e concentração foram obtidos através do método dos volumes finitos. Para a solução do escoamento turbulento foi utilizado o modelo $k-\varepsilon$. Mais de um modelo foi utilizado para os processos de combustão. O modelo *Eddy Breakup-Arrhenius* (E-A), com duas etapas de combustão é o mais completo e, na análise realizada, foi o que se mostrou mais preciso. Portanto, os resultados obtidos através desse modelo foram escolhidos para serem utilizados na presente análise. No cálculo da transferência de calor por radiação foi utilizado o modelo WSGG em conjunto com o método das zonas. Para os coeficientes de extinção e as funções de ponderação dos pesos de cada gás cinza, foram utilizados os dados apresentados por Smith et al., 1982. Os resultados obtidos para os fluxos de calor convectivo, radiante e total na parede lateral cilíndrica da cavidade são mostrados na Figura 5.13. Observando esses resultados, verifica-se a importância do fluxo radiante, que é maior que o fluxo de calor por convecção na maior parte da parede.

O ar de entrada foi considerado como composto de 23% de oxigênio (O_2), 76% de nitrogênio (N_2) e 1% de vapor d'água (H_2O). A composição do gás natural combustível foi assumida como 90% de metano (CH_4) e 10% de nitrogênio. Através da solução acoplada dos problemas de combustão e transferência de calor, foram obtidos resultados para a composição e temperatura do meio. Além das espécies não participantes, oxigênio e nitrogênio, o meio produto da combustão é constituído de metano, monóxido de carbono, vapor d'água e dióxido de carbono.

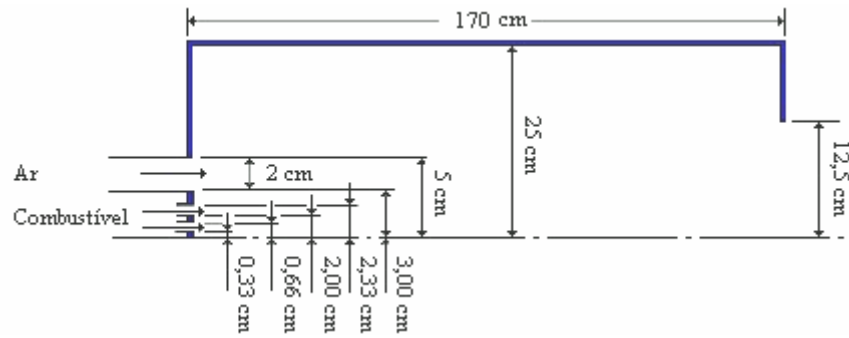


Figura 5.12 Representação da câmara de combustão [Silva, 2005].

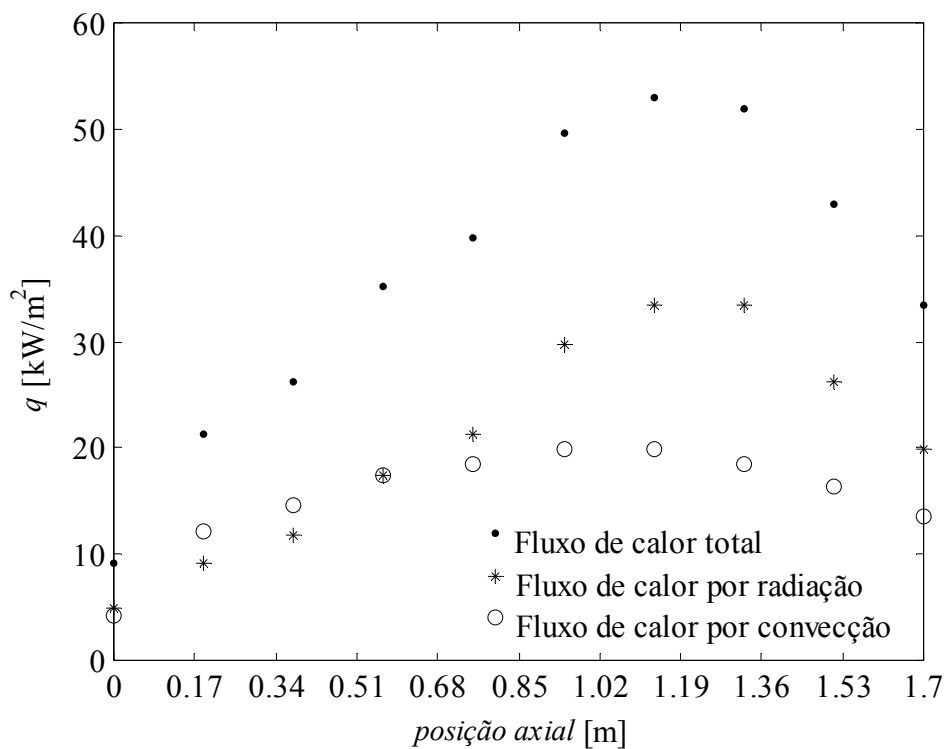


Figura 5.13 Fluxos de calor por convecção, por radiação e total, na parede lateral cilíndrica da câmara de combustão [Silva, 2005].

Nas Figuras 5.14 e 5.15 aparecem os resultados para o campo de concentrações do vapor d'água e do dióxido de carbono. Nas Figuras 5.16 e 5.17 aparecem os resultados para os campos de concentrações do metano e do monóxido de carbono. Por último, na Figura 5.18, é mostrada a distribuição de temperatura no meio.

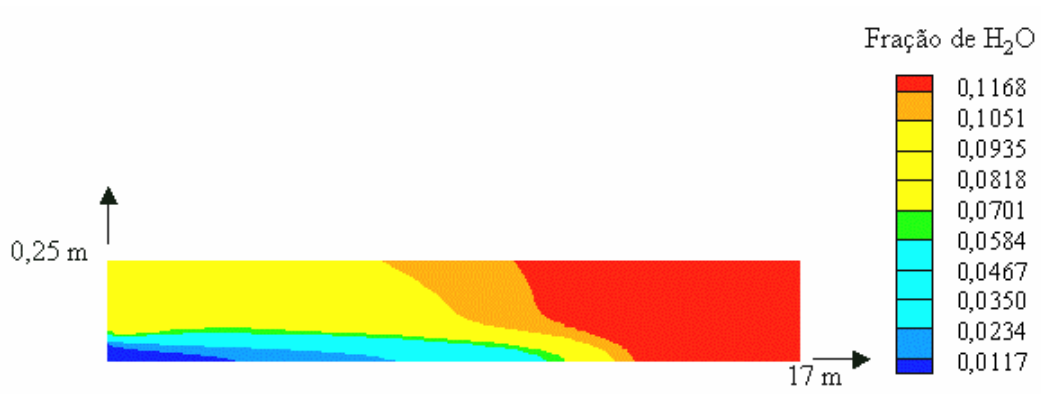


Figura 5.14 Campo de concentração do vapor d'água na câmara de combustão.
[Silva, 2005].

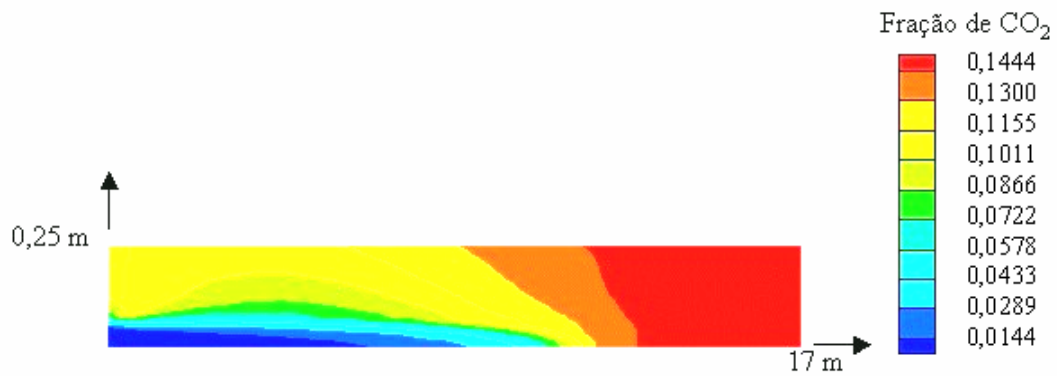


Figura 5.15 Campo de concentração do dióxido de carbono na câmara de combustão.
[Silva, 2005].

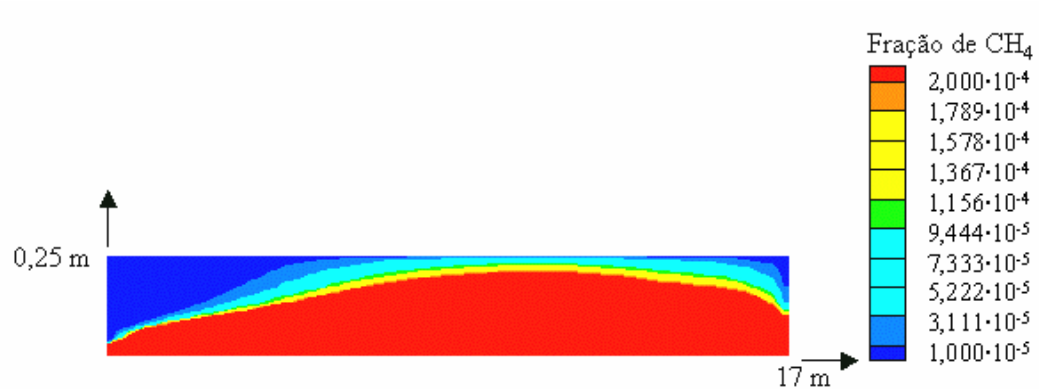


Figura 5.16 Campo de concentração do metano na câmara de combustão
[Silva, 2005].

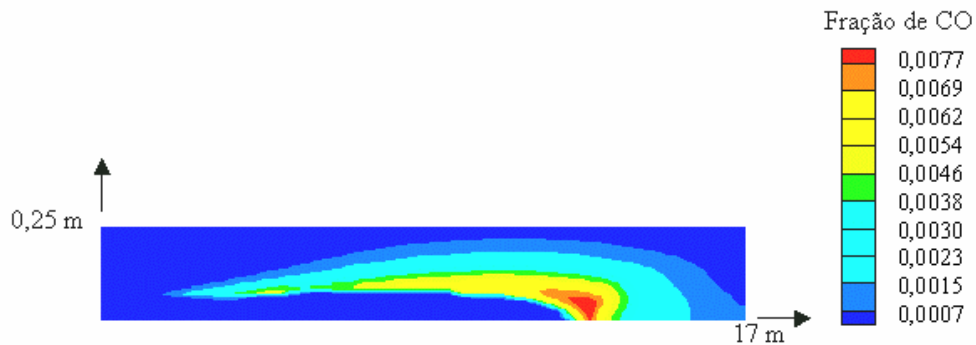


Figura 5.17 Campo de concentração do monóxido de carbono na câmara de combustão.
[Silva, 2005].

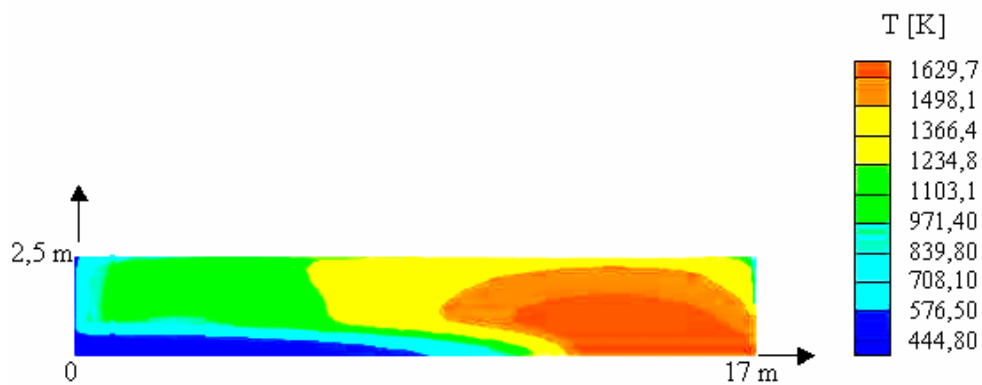


Figura 5.18 Distribuição de temperatura na câmara de combustão.
[Silva, 2005].

A despeito da concentração não homogênea do meio produzido no processo de combustão, a fim de utilizar o modelo WSGG com as correlações de Smith et al., 1982, para o cálculo das trocas radiantes, o meio foi considerado como homogêneo resultante da combustão estequiométrica do metano, ou seja, composto de 20% de H_2O e 10% de CO_2 . Para avaliar o efeito dessa aproximação relativa à concentração do meio, o método de Monte Carlo aplicado a função distribuição ALB é utilizado nesta seção para a obtenção de resultados.

No método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, como implementado neste trabalho, as únicas espécies participantes que podem ser consideradas são o vapor d'água e o dióxido de carbono. Assim, o método não pode levar em conta o efeito do metano e do monóxido de carbono. Como pode ser observado na Figura 5.16, praticamente todo metano sofre a combustão em uma região pequena muito próxima à entrada da câmara. Dessa forma, a

concentração de metano no interior da fornalha é muito pequena, mantendo-se abaixo de 0,002% em todo o domínio, de modo que o efeito do metano nas trocas radiantes pode ser negligenciado.

Observando o resultado da Figura 5.17, verifica-se que a concentração de monóxido de carbono também é pequena na maior parte da cavidade, sendo um pouco mais expressiva apenas nas regiões que aparecem em vermelho e amarelo. Entretanto, mantendo-se abaixo de 0,8%. Esse fato corrobora a simplificação de que as únicas espécies emissoras e absorvedoras presentes são o vapor d'água e o dióxido de carbono. Entretanto, há monóxido de carbono o suficiente para justificar uma análise que o leve em conta. O método aqui proposto pode ser utilizado com essa finalidade. Mas, para tanto, seria necessária a obtenção da função distribuição ALB para o monóxido de carbono, o que requer a utilização de extensos bancos de dados, como os HITRAN e HITEMP, que envolvem o conhecimento de muitos fatores físicos subjacentes aos mecanismos de emissão e absorção de linhas espectrais por moléculas.

De acordo com os resultados apresentados por Silva, 2005, e Silva et al., 2007, as trocas de calor por radiação não influenciam significativamente os resultados relativos a concentração das espécies químicas, o que permite que os campos de concentração das espécies químicas obtidos possam ser utilizados nos cálculos de troca radiante através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Além das aproximações referentes à concentração das espécies químicas necessárias para a utilização da presente metodologia em Monte Carlo, alguns outros fatores dificultam a utilização direta dos campos de concentração e temperatura apresentados nas Figuras 5.14, 5.15 e 5.18, na solução da transferência de calor por radiação através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Dentre essas dificuldades, destaca-se o fato de que para a solução do escoamento turbulento, a câmara de combustão foi dividida em volumes finitos com tamanhos variados. Próximo às paredes, foi necessário a utilização de muitos volumes, de tamanho reduzido em comparação aos utilizados nas regiões distantes das superfícies sólidas. Para a solução das trocas radiantes, todas as zonas podem ter o mesmo volume, e a utilização de zonas pequenas próximo às paredes resultaria em um esforço computacional desnecessário.

Nos resultados apresentados por Silva, 2005, e Silva et al., 2007, em alguns volumes, a temperatura chega a valores menores que a temperatura de 400 K, considerada para as paredes. Entretanto, as correlações de Smith et al., 1982, são válidas apenas para a faixa de temperatura que vai de 600 K a 2400 K. Houve, portanto, uma extrapolação na utilização das correlações para o cálculo das trocas radiantes em regiões do meio onde a temperatura era menor que 600 K.

A fim de evitar os problemas mencionados acima e facilitar a utilização do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB na solução do problema de transferência de

calor em cavidades com distribuição de temperatura e campo de concentrações semelhantes aos encontrados em câmaras de combustão típicas, neste trabalho, foram obtidas correlações que permitem gerar campos de temperatura e de concentração de vapor d'água e dióxido de carbono baseados nos apresentados nas Figuras 5.14, 5.15 e 5.18. No apêndice C são apresentadas essas correlações.

Foram obtidas aqui correlações para dois diferentes campos de temperatura. No primeiro campo de temperaturas foi realizado um ajuste para manter as temperaturas dentro do intervalo adequado para a utilização das correlações de Smith et al., 1982. Para tanto, as temperaturas mínimas foram fixadas em 600 K e as máximas foram mantidas inalteradas a 1700 K, todas as demais temperaturas dentro do intervalo $600 \text{ K} \leq T \leq 1800 \text{ K}$, foram ajustadas proporcionalmente. As correlações C 1, apresentadas no Apêndice C, permitem gerar o primeiro campo de temperatura considerado. O segundo campo de temperatura, que pode ser gerado através das correlações C 2, é fidedigno ao apresentado na Figura 5.18, assim as temperaturas variam em um intervalo que vai de aproximadamente a temperatura das paredes de 400 K a 1800 K. A exceção do último resultado apresentado na subseção seguinte, para todos os demais obtidos para a cavidade cilíndrica, foi considerando o perfil de temperatura ajustado, $600 \text{ K} \leq T \leq 1800 \text{ K}$.

A Figura 5.19 mostra a distribuição de temperatura no gás ajustada para manter a temperatura no intervalo entre 600 K e 1800 K, obtida com as correlações C 1.

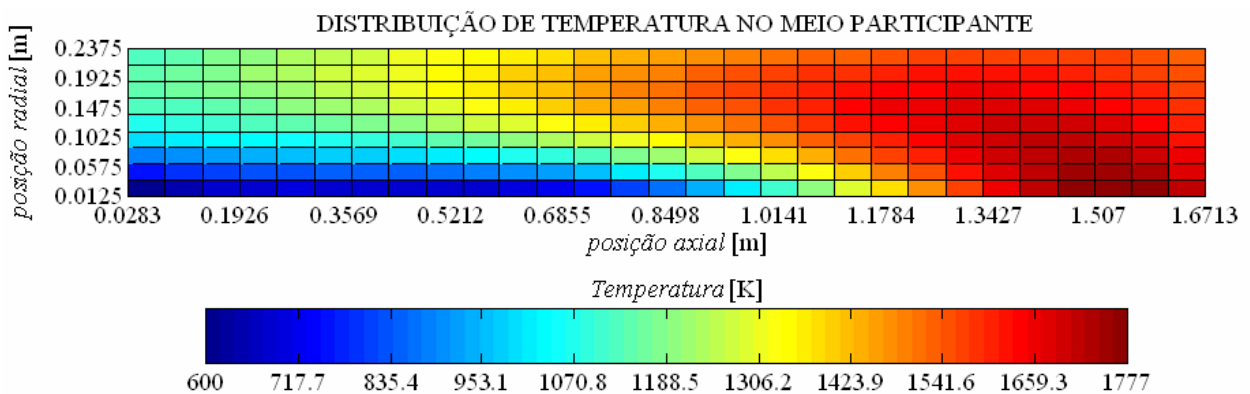


Figura 5.19 Distribuição de temperatura em uma câmara de combustão típica (obtida com a correlação C 1, apresentadas no Apêndice C).

As correlações C 3 fornecem a distribuição aproximada do dióxido de carbono para o caso de combustão de metano e de etano, visto que são similares. Considerando-se processos de combustão estequiométrica, a distribuição do vapor de água é igual a do dióxido de carbono para

o caso de combustão de etano e igual ao dobro da concentração do dióxido de carbono para o caso de combustão do metano. Assim, as concentrações do vapor de água podem também ser obtidas pelas correlações C 3. As figuras seguintes, 5.20 e 5.21 mostram distribuições de concentração de vapor d'água e dióxido de carbono que podem ser obtidos com as correlações C 3.

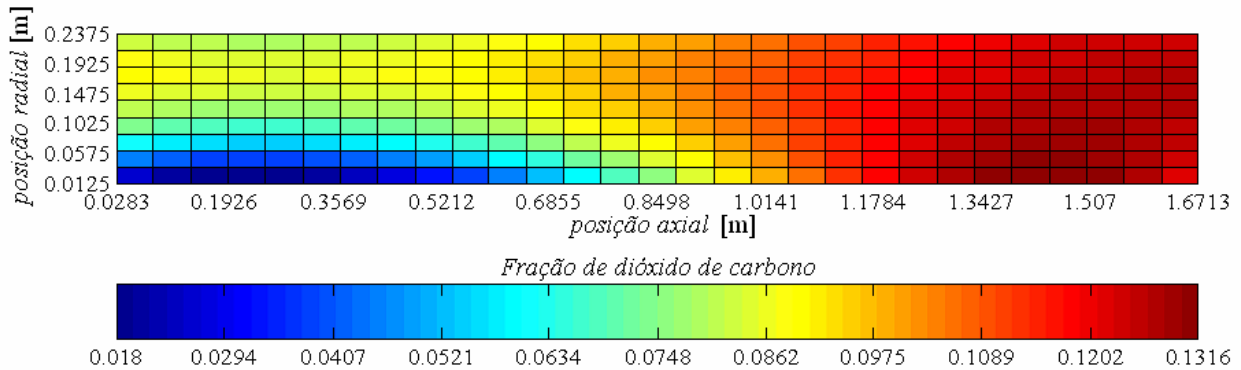


Figura 5.20 Distribuição de dióxido de carbono em uma câmara de combustão de metano típica (obtida com as correlações C 3, apresentadas no Apêndice C).

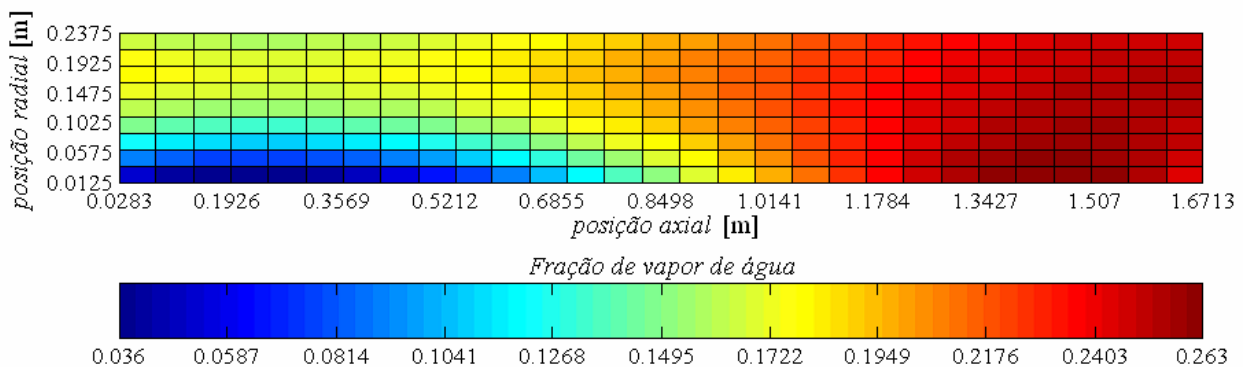


Figura 5.21 Distribuição de vapor de água em uma câmara de combustão de metano típica (obtida com as correlações C 3, apresentadas no Apêndice C).

O método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi utilizado na solução da transferência de calor por radiação considerando-se dois meios participantes distintos. O primeiro é um meio não-homogêneo em que as temperaturas e as concentrações são fornecidas pelas correlações, considerando-se combustão de etano. O segundo é o meio produzido na

combustão estequiométrica do etano, 10% H₂O e de 10% CO₂, como necessário quando são utilizadas as correlações obtidas por Smith et al., 1982, no modelo WSGG.

Embora seja usual aproximar o meio como sendo o produzido na combustão estequiométrica do combustível considerado, as concentrações dos produtos da combustão podem ser bastante diferentes daquelas resultantes de um processo de combustão estequiométrico. A razão para isso é que os processos de combustão geralmente ocorrem com excesso de ar, ao invés de frações estequiométricas. Dessa forma, o emprego de correlações para as funções de ponderação no modelo WSGG para outros meios que não o gerado na combustão do respectivo combustível poderia melhorar a precisão dos resultados. Entretanto, é ainda requerida a aproximação de meio homogêneo. Um meio homogêneo que de algum modo reproduz um certo meio não-homogêneo é aquele cuja concentração é igual à sua concentração média. No caso abordado, o meio não-homogêneo é considerado como produzido numa combustão estequiométrica e, portanto, sua concentração média é igual a concentração estequiométrica. Assim, a discrepância nos resultados é a mínima que poderia resultar da aproximação de meio uniforme necessária para a aplicação do modelo WSGG.

Para a solução em Monte Carlo a cavidade foi dividida em trinta (30) partes iguais na direção axial e dez (10) na radial. Assim a cavidade é formada por 300 zonas de volume, a superfície lateral cilíndrica é formada por 30 zonas e cada superfície lateral plana é formada por 10 zonas. As Figuras 5.22a e 5.22b mostram os resultados para os divergentes do fluxo de calor no meio, respectivamente, para o meio não-homogêneo e para o meio homogêneo gerado na combustão estequiométrica do etano. Com a convenção adotada, o sinal negativo para o divergente do fluxo de calor indica que a zona emite mais do que absorve, assim, perdendo energia para as vizinhanças. O oposto é válido quando o sinal é positivo.

Como pode ser observado, os divergentes do fluxo de calor no meio apresentam um perfil similar para os dois meios participantes. Entretanto, há uma diferença significativa entre os resultados obtidos para o meio não-homogêneo e para o meio estequiométrico. A taxa líquida de transferência de calor no gás foi 15,41% menor para o meio não-homogêneo.

Diferenças entre os resultados podem ser melhor examinadas através da Figura 5.23, que mostra os resultados dos fluxos de calor na parede lateral cilíndrica da cavidade. A tendência geral é a mesma; entretanto, as diferenças entre os resultados se tornam mais relevantes na região de alta temperatura, caracterizada pelos picos nos fluxos de calor. Como pode ser observado, para o meio homogêneo, o fluxo de calor se manteve próximo ao fluxo de calor referente ao meio não-homogêneo, para a maior parte da parede lateral cilíndrica. Entretanto, é observada uma diferença de 13,14%, para o fluxo de calor máximo. Além disso, para o meio não-

homogêneo o ponto de pico do fluxo de calor ocorre a 1,33 m da entrada na direção axial, enquanto para o outro meio, ocorre a 1,38 m.

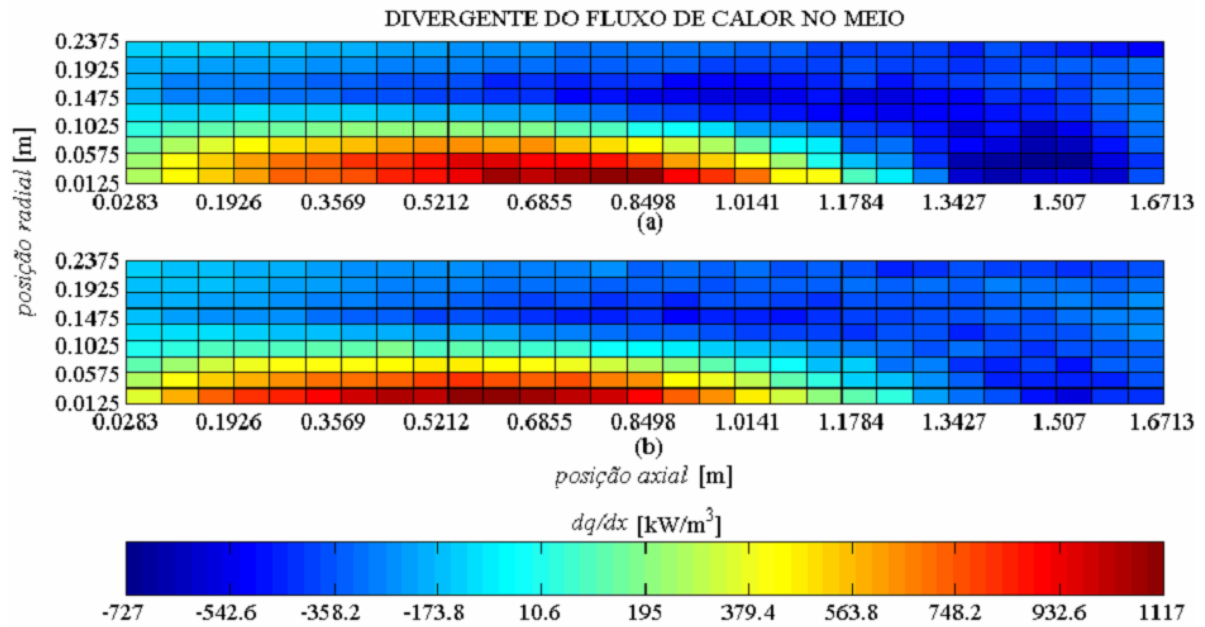


Figura 5.22 Divergente do fluxo de calor no meio: (a) meio não-homogêneo, (b) meio homogêneo (10% CO₂, 10% H₂O).

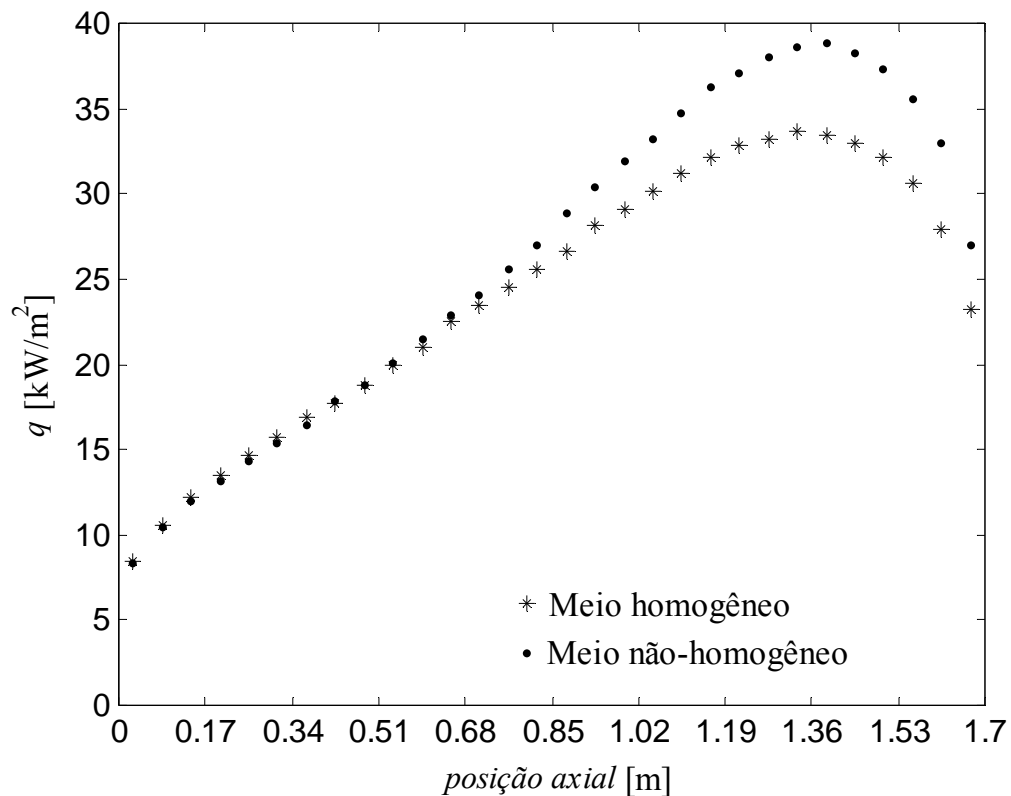


Figura 5.23 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica da cavidade.

As oscilações que aparecem nos resultados obtidos para os divergentes do fluxo de calor no meio são devido ao baixo número de pacotes emitidos relativo à implementação em Monte Carlo utilizada aqui, quinhentos mil ($5 \cdot 10^5$), para cada zona de volume de meio e de superfície. Entretanto, nos resultados considerados para a realização da análise quantitativa, ou seja, as taxas líquidas de transferência de calor e fluxos de calor nas paredes, o número de pacotes de energia utilizados foi suficiente para garantir níveis de oscilação satisfatórios. O desvio-padrão relacionado a esses resultados ficou abaixo de 1% nos dois casos. Em todos os resultados para cavidade cilíndrica apresentados a relação entre tempo computacional e número de pacotes emitidos foi muito semelhante. Assim, os tempos de processamento relativos à obtenção de cada um dos resultados referentes à cavidade cilíndrica são apresentados na seção 5.3, onde é feita uma análise mais aprofundada da relação entre número de pacotes e tempos computacionais, bem como, são feitos comentários a respeito do código computacional utilizado e procedimentos de cálculo relativos a este código.

5.2.3 Análise da Hipótese de Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas

Para a utilização do modelo WSGG são necessárias outras aproximações que não a de meio homogêneo. Essas aproximações são relativas ao modelamento do comportamento espectral. Assim, mesmo para meios participantes de fato homogêneos e compostos por uma mistura de gases para a qual existem correlações disponíveis, os resultados obtidos com o modelo WSGG devem apresentar certa discrepância em relação a resultados obtidos com técnicas de modelamento espectral detalhadas. As aproximações podem estar relacionadas à hipótese de que o meio pode ser modelado através de alguns poucos gases cinzas ou devido à utilização de correlações para as funções de ponderação.

Smith et al., 1982, obtiveram coeficientes de absorção de gases cinzas e correlações para os pesos desse gases a partir de valores de emitância tabelados, que foram obtidos através do modelo exponencial de banda larga. São apresentadas correlações para meios constituídos por vapor d'água e espécies não participantes, para meios constituídos por dióxido de carbono e espécies não participantes e para dois meios que contêm duas espécies participantes. Esses dois meios são os produzidos na combustão estequiométrica do metano e do etano. As Figuras 5.24, 5.25 e 5.26 mostram, em escala logarítmica, dados de emitância totais obtidos com as correlações de Smith et al., 1982, e com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. A emitância total ao longo de um caminho de comprimento S , em um meio participante uniforme, é

$$\varepsilon = \frac{\int_0^{\infty} I_{\lambda,b}(\lambda) \left[1 - \exp(-K_{\lambda}(\lambda) S) \right] d\lambda}{\sigma T^4} \quad (5.9)$$

onde λ é o comprimento de onda, $I_{\lambda,b}$ é a intensidade espectral de corpo negro, fornecida pela distribuição de Planck, K_{λ} é o coeficiente de absorção espectral, σ é a constante de Stefan-Boltzmann e T é a temperatura do meio no caminho S . No caso da utilização das correlações de Smith et al., 1982, no modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas, a emitância é calculada para cada gás cinza e, em seguida, é realizada a soma ponderada para obter a emitância do meio participante. No caso da utilização do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, para cada pacote de energia emitido é calculada uma emitância através da Equação (5.9) e a emitância do meio é a emitância média obtida com base em todos os pacotes de energia emitidos na simulação.

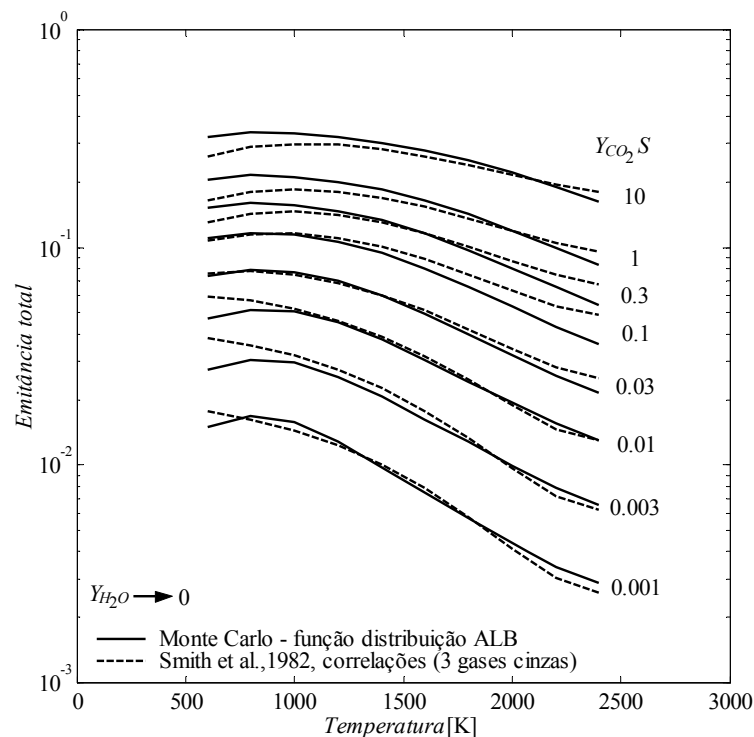


Figura 5.24 Emitância total em função da fração de CO_2 e comprimento de caminho de meio.

Os resultados, mostrados em escala logarítmica, apresentaram consideráveis discrepâncias, apesar de terem sido obtidos para meios idênticos. As diferenças entre os resultados obtidos através dos dois métodos foram menores para o meio composto por dióxido

de carbono e espécies não participantes e maiores para o meio em que a única espécie participante era o vapor d'água. Isso demonstra que as correlações para o vapor d'água são menos precisas. Tanto para o meio tendo como espécie participante apenas o H_2O quanto para o meio constituído de 10% de H_2O e 10% de CO_2 , discrepâncias consideráveis ocorrem para temperaturas elevadas, o que pode ser um fator agravante quando as correlações são utilizadas na solução de problemas de trocas radiantes em sistemas de combustão, pois a maior parte da energia é emitida das regiões de alta temperatura.

A fim de analisar a influência das aproximações referentes ao modelo WSGG com as correlações de Smith et al., 1982, nos problemas de transferência de calor em sistemas de combustão, nesta subseção, são apresentadas soluções para problemas de troca radiante na cavidade cilíndrica com o perfil de temperatura típico de uma câmara de combustão, apresentado na Figura 5.19. Para limitar a análise ao modelamento espectral, os meios participantes considerados são os gerados nos processos de combustão estequiométrica do metano (20% H_2O e 10% CO_2) e do etano (10% H_2O e 10% CO_2). Os problemas foram solucionados através de três métodos distintos: modelo WSGG e método das zonas, método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Nos casos em que o modelo WSGG foi empregado, as correlações de Smith et al., 1982, foram utilizadas.

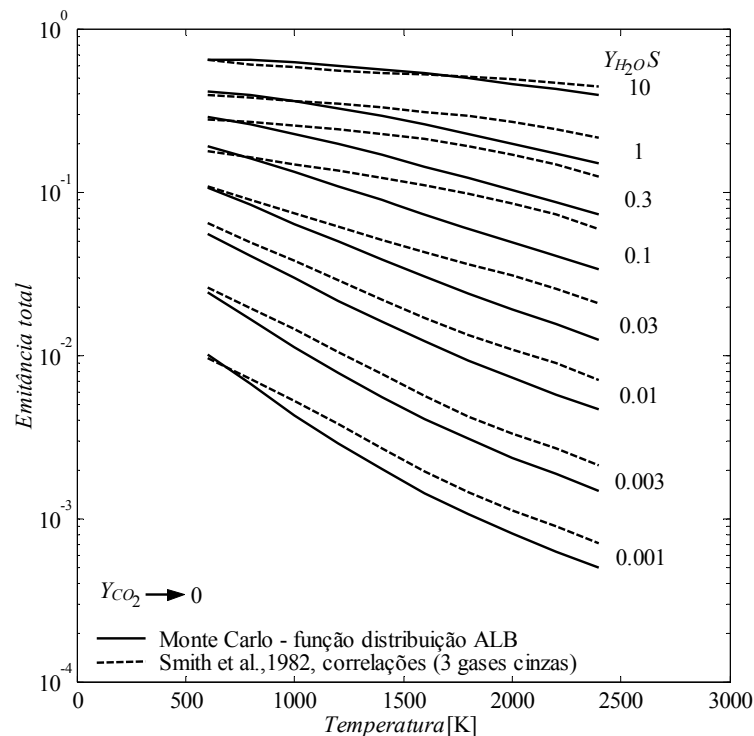


Figura 5.25 Emitância total em função da fração de H_2O e comprimento de caminho de meio.

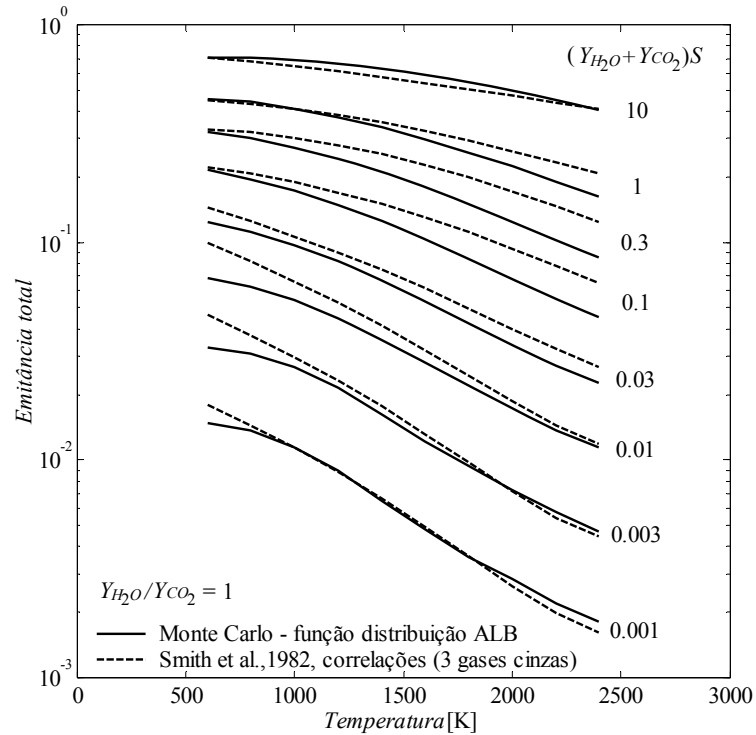


Figura 5.26 Emitância total em função da soma das frações de H_2O e CO_2 e do comprimento de caminho de meio.

Para uma análise qualitativa, a Figura 5.27 mostra os resultados obtidos para o divergente do fluxo de calor no meio participante, para a mistura decorrente da combustão do metano (20% H_2O e 10% CO_2). A Figura 5.27a apresenta o resultado obtido com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, enquanto que a Figura 5.27b é mostra o resultado obtido com o método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG. Como pode ser observado, os resultados obtidos com os dois métodos apresentam um perfil semelhante; Entretanto diferem bastante em magnitude. Executando-se a integral do divergente do fluxo de calor sobre todo o domínio, obtém-se que, para o caso em que foi utilizado o modelo WSGG, o meio perde 119 kW para as superfícies, 28% a mais que para o caso em que a solução foi obtida com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Na Figura 5.28 podem ser vistos os fluxos de calor na parede lateral cilíndrica, para o meio constituído de 20% H_2O e 10% de CO_2 , obtidos através das três metodologias distintas.

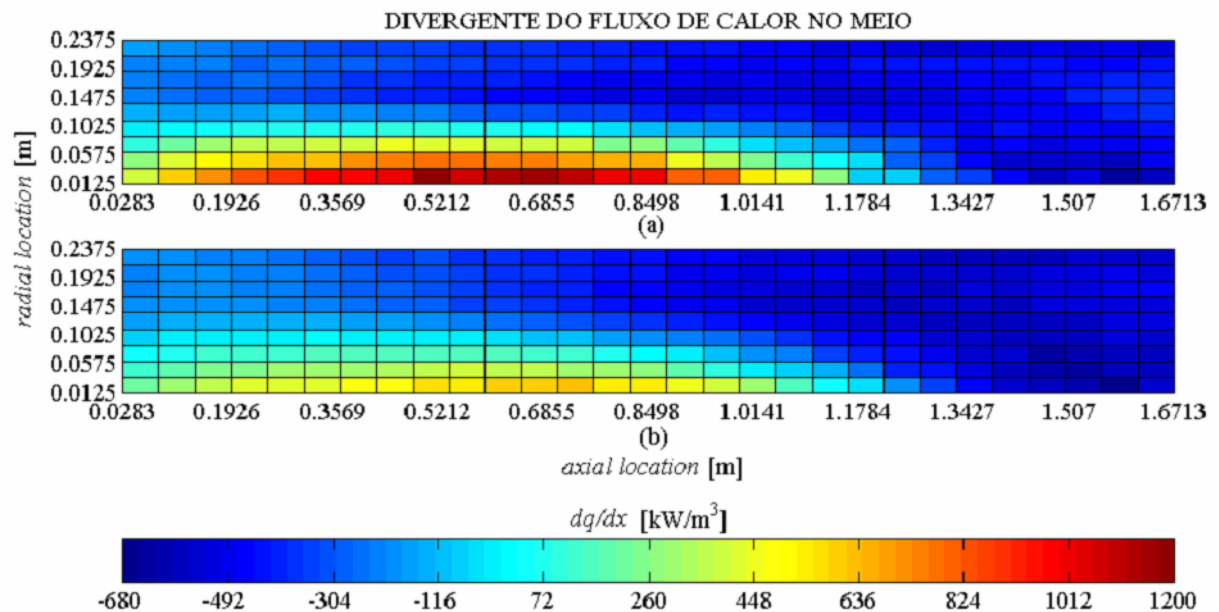


Figure 5.27 Divergente do fluxo de calor, para o meio composto de 20 % de H₂O e 10% de CO₂, obtida com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Carlo aplicado ao modelo WSGG.

Como esperado os fluxos obtidos com as duas metodologias em que o WSGG foi utilizado para modelar o comportamento espectral apresentam excelente concordância. Por outro lado, o resultado para o fluxo de calor obtido com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB é bastante discrepante em relação aos outros dois. No ponto de máximo fluxo de calor os resultados obtidos com o modelo espectral WSGG foram aproximadamente 59 kW/m², 35% maiores que 43,7 kW/m², obtido com o modelamento espectral em que a função distribuição ALB é aplicada.

Para a segunda mistura de gases 10% de H₂O e de 10% CO₂, discrepâncias podem também ser observadas, embora sejam menos expressivas do que para a primeira mistura. As Figuras 5.29a e 5.29b mostram os divergentes do fluxo de calor no meio, ambas obtidas com o método de Monte Carlo, porém aplicado aos dois diferentes modelos espectrais: WSGG e função distribuição ALB. Observando a figura, nota-se que para o caso em que o comportamento espectral foi considerado de forma detalhada, existem várias regiões no meio em que a taxa de transferência de calor é positiva, ou seja, o calor é absorvido. Em contraste, para o caso em que foi utilizado o modelo WSGG, o meio perde calor para as vizinhanças em quase todas as localizações, apresentando um comportamento mais uniforme. A taxa de transferência de calor

do meio para as superfícies foi de 86 kW, 20,7% maior que o resultado obtido com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

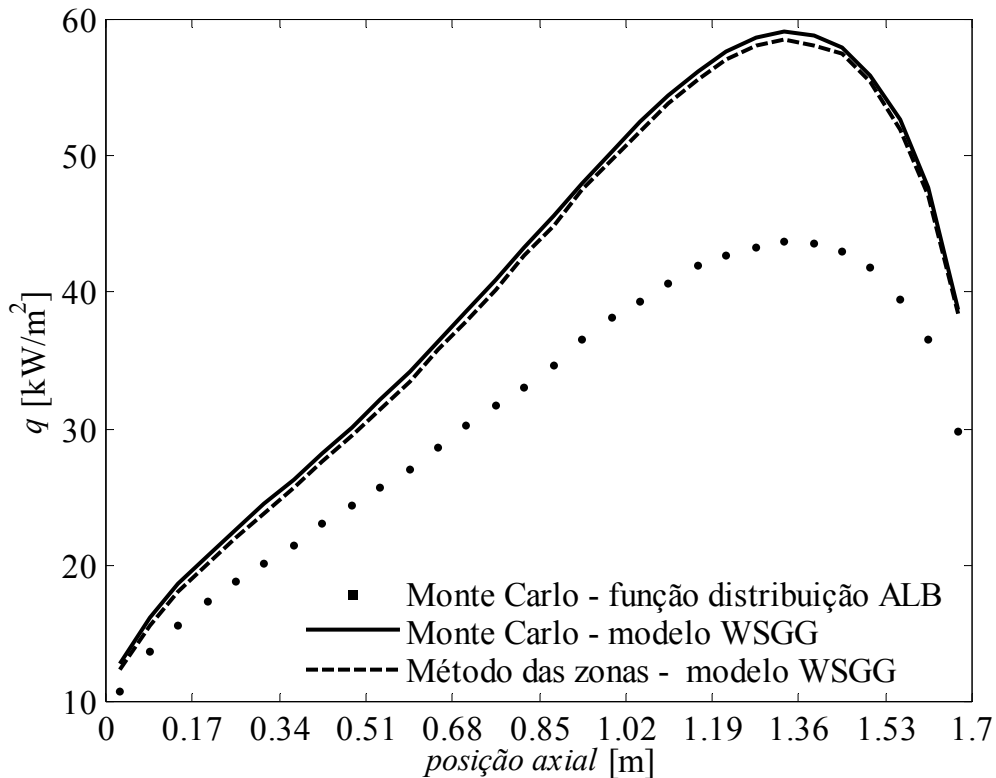


Figura 5. 28 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica, para o meio constituído de 20 % de H₂O e 10% de CO₂, obtidos através dos método da zonas aplicado ao modelo WSGG, método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

As diferenças entre os resultados para os fluxos de calor na parede lateral, apresentados na Figura 5.30, foram também menores para esse segundo meio participante. O resultado no ponto de fluxo de calor máximo foi de aproximadamente 42 KW/m², para as soluções em que foi utilizado o modelo WSGG, 26% maior que para o caso em que foi utilizado o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Comparando-se os resultados obtidos para os dois meios distintos, verifica-se que no meio com maior concentração de vapor d'água as discrepâncias foram maiores, o que está em conformidade com os resultados apresentados na Figuras 5.24 a 5.26, que indicavam maior imprecisão nas correlações para os meios contendo vapor d'água. Entretanto, no meio composto de 20% de H₂O e 10% de CO₂, a fração de espécies participantes é de 50% a maior do que para o

meio composto de 10% de H₂O e 10% de CO₂, o que deve também aumentar a diferença entre os resultados obtidos através das metodologias distintas.

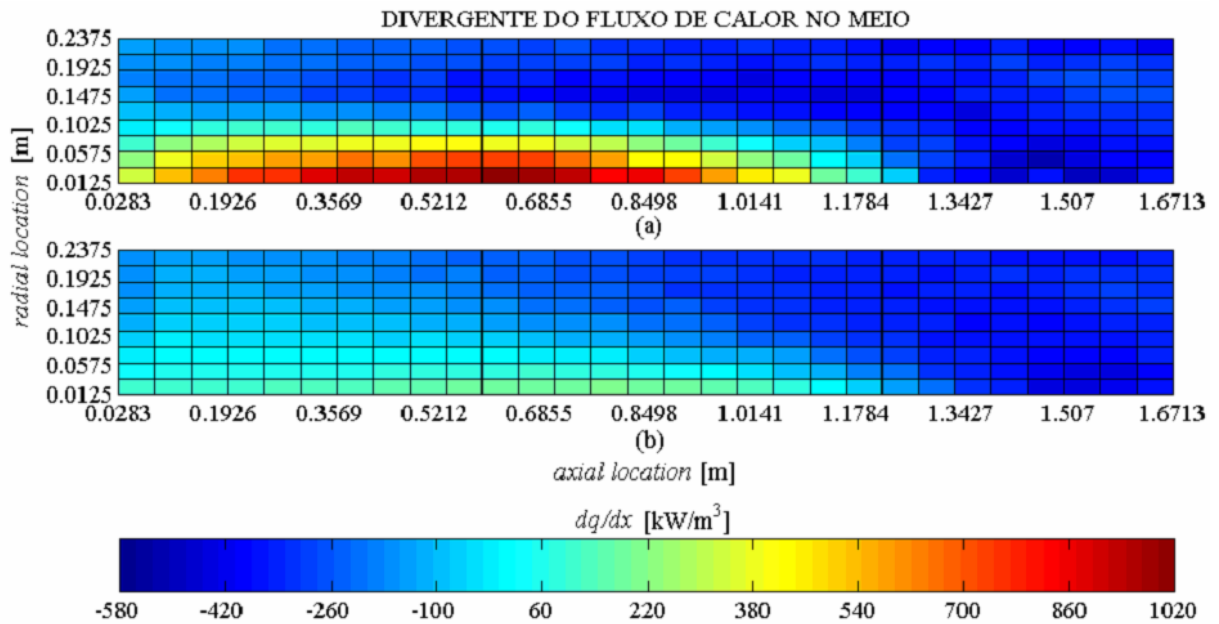


Figure 5.29 Divergente do fluxo de calor, para o meio composto de 10 % de H₂O e 10% de CO₂, obtida com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Carlo aplicado ao modelo WSGG.

Para a obtenção das soluções em Monte Carlo e método das zonas, a cavidade foi novamente dividida em trinta zonas na direção axial e dez zonas na radial. Foram executadas vinte simulações, para cada um dos quatro casos em que o método de Monte Carlo foi utilizado. Em cada simulação foram emitidos vinte e cinco mil (25.000) pacotes de energia de cada zona, totalizando, nas vinte simulações, quinhentos mil pacotes de cada zona. Em todos os casos o valor percentual do desvio-padrão do fluxo de calor na parede lateral cilíndrica ficou abaixo de 1%.

Na análise apresentada nesta sub-seção o campo de temperaturas considerado para o meio participante foi o fornecido pelas correlações C 1, para o qual as temperaturas estão no intervalo entre 600 K e 1800 K. Maurente et al., 2006b, apresentaram uma análise semelhante para casos em que o campo de temperaturas era fornecido pelas correlações C 2, no intervalo entre 400 K e 1800 K.

5.2.4 Comparação entre o Modelo WSGG e o Método de Monte Carlo Aplicado à Função Distribuição ALB

Nas duas subseções anteriores foram apresentados resultados que permitiram analisar separadamente duas classes de aproximações necessárias para a utilização do modelo WSGG, largamente empregado em problemas de transferência de calor por radiação.

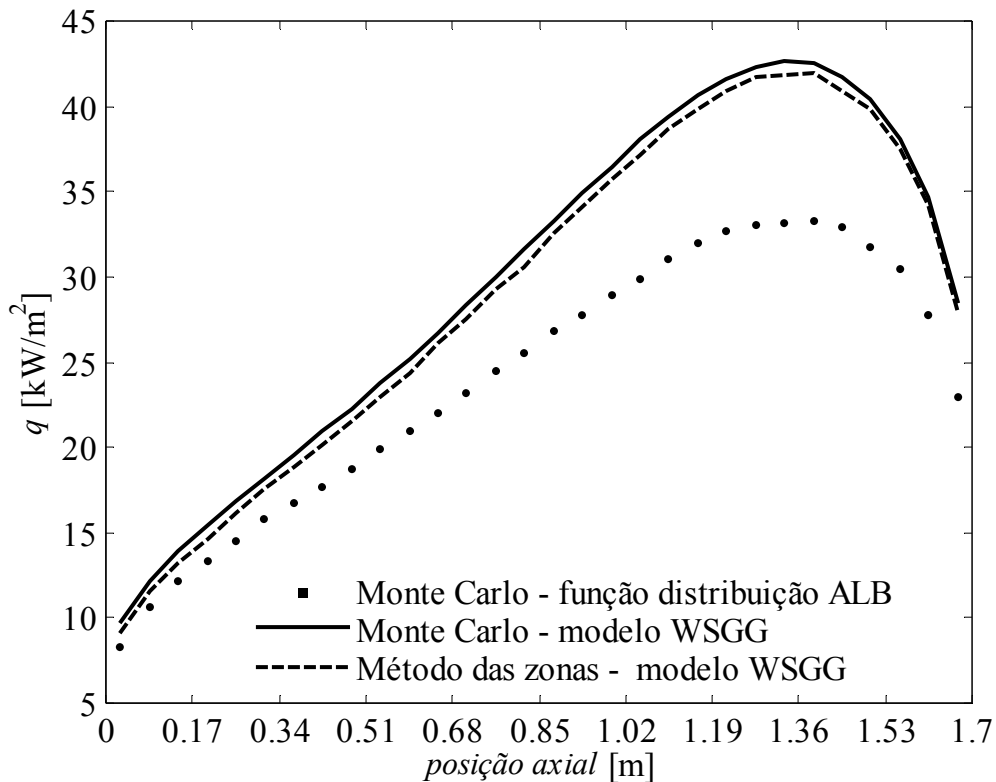


Figura 5.30 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica, para o meio constituído de 10 % de H_2O e 10% de CO_2 , obtidos através dos método da zonas e modelo WSGG, método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Nesta subseção, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e o método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG são utilizados na solução de dois problemas de transferência de calor por radiação em cavidades cilíndricas com distribuições de temperaturas típicas de câmaras de combustão, obtidas com as correlações apresentadas no Apêndice C. Nos casos em que a função distribuição ALB é utilizada, as distribuições de concentração são típicas do ambiente de câmaras de combustão, obtida com as correlações C 3, para a combustão do metano. O modelo WSGG foi aplicado na solução do problema de transferência de calor na câmara de combustão, utilizando-se uma aproximação usual para a

concentração das espécies químicas. Dessa forma, foi possível analisar o efeito conjunto relativo a ambas as classes de aproximações relativas ao meio participante e ao modelamento espectral, abordadas nas subseções anteriores.

Dois casos foram considerados. No primeiro foi utilizado o perfil de temperaturas ajustado ao intervalo de temperatura para o qual Smith et al.,1982, obteve os dados para utilização no modelo WSGG, que pode ser obtido através das correlações C 1. No segundo, foi utilizado o perfil de temperatura sem nenhum ajuste, obtido através das correlações C 2. Para os dois casos o meio foi considerado não-homogêneo. Entretanto, para a solução através do método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG, o meio foi aproximado como igual ao gerado na combustão estequiométrica do metano (20% de H₂O e 10% de CO₂), que é uma aproximação usual para o cálculo das trocas radiantes através do modelo WSGG.

Primeiro caso: $600 \text{ K} \leq T < 1800 \text{ K}$

Nas Figuras 5.31 são apresentados os resultados para o divergente do fluxo de calor no meio obtidos para o primeiro caso, em que as temperaturas se encontram no intervalo entre 600 K a 1800 K. Na Figura 5.31a, a solução foi obtida com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e na Figura 5.31b, foi obtida com o método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG.

Como nos resultados apresentados na subseção anterior, os divergentes do fluxo de calor no meio foram mais uniformes para os resultados obtidos com o modelo espectral WSGG. Essas variaram, aproximadamente, de -714 kW/m^3 a 284 kW/m^3 ; enquanto os resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB variaram de -900 kW/m^3 a 1070 kW/m^3 . A taxa total líquida de transferência de calor por radiação no meio obtida com o modelo WSGG foi de -119 kW , em valor absoluto, 21,5% maior que a obtida com a função distribuição ALB, que foi de $-97,8 \text{ kW}$.

A grande discrepância entre os resultados obtidos através dos dois diferentes métodos pode ser visualizada através da Figura 5.32, que mostra os resultados para o fluxo de calor na parede lateral cilíndrica da cavidade. A diferença entre os fluxos de calor no ponto de pico foi de $9,2 \text{ kW/m}^2$, sendo que os fluxos de calor foram de $49,3 \text{ kW/m}^2$ para o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e $58,5 \text{ kW/m}^2$ para o método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG (18,7% maior).

Casualmente o efeito conjunto referente às aproximações relativas ao meio participante e ao modelamento espectral reduziu o erro no resultado final. Enquanto a diferença

entre os máximos fluxos de calor, na parede lateral, foi de 24 % para o resultado apresentado nesta subseção, foi de 35% para o resultado apresentado na subseção anterior. Discrepâncias da mesma ordem de magnitude são verificadas para as taxas de transferência de calor no meio. A menor discrepância entre estes últimos resultados pode ser explicada pelo fato de que nas regiões mais quentes da cavidade a concentração das espécies participantes é maior fazendo com que maior quantidade de energia seja emitida nessas regiões, o que torna os resultados obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, em que a não-homogeneidade do meio é considerada, mais próximos dos obtidos com o modelo WSGG, em que o meio é aproximado como homogêneo e que sobrestima a emissão de energia radiante em todo o domínio.

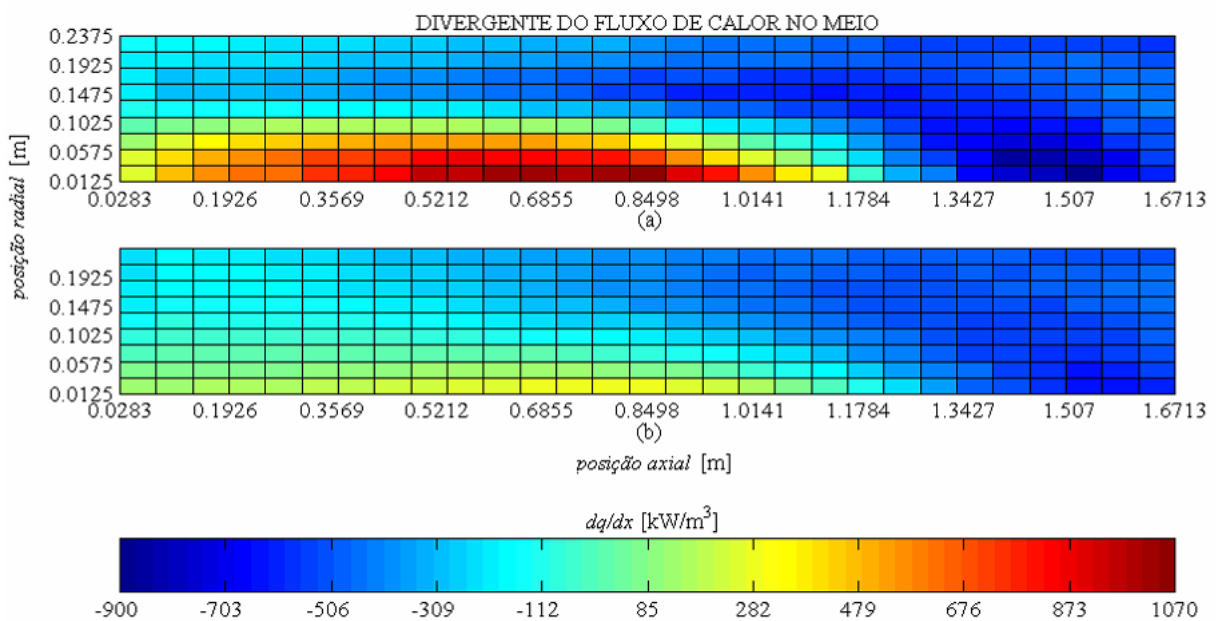


Figure 5.31 Divergente do fluxo de calor no meio obtido com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG.

A solução obtida com o método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG é a mesma apresentada no primeiro caso da subseção anterior, para a qual já foram apresentados dados relativos à imprecisão estatística. Para a obtenção da solução através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, foram realizadas dez (10) simulações, em cada uma, foram emitidos cinquenta cinco mil ($5 \cdot 10^4$) pacotes de energia de cada zona. O desvio-padrão relativo ao valor local do fluxo de calor, na parede cilíndrica, ficou abaixo de 1 %.

Na solução dos problemas foi utilizada a análise por zonas, na qual o domínio é dividido em zonas de superfície e de volume de meio participante dentro dos quais as propriedades são consideradas uniformes. Para todos os casos referentes à geometria cilíndrica considerados neste trabalho, a cavidade foi dividida em trinta partes iguais na direção axial ($N_z = 30$) e dez na direção radial ($N_r = 10$), compondo trezentas (300) zonas de volume de meio e cinquenta (50) zonas de superfície. Sendo que cada uma das superfícies circulares, nas extremidades, são constituídas por dez (10) zonas e a superfície cilíndrica é constituída por trinta (30) zonas. As aproximações devido à discretização são exclusivamente relativas às propriedades das zonas (temperatura, concentrações, emitâncias). Considerando que o meio decorrente da discretização é o meio real, afora às aproximações devido ao modelamento espectral e incertezas estatísticas, a solução da equação da transferência radiativa através do método de Monte Carlo fornece o resultado exato da taxa de transferência de calor em cada zona.

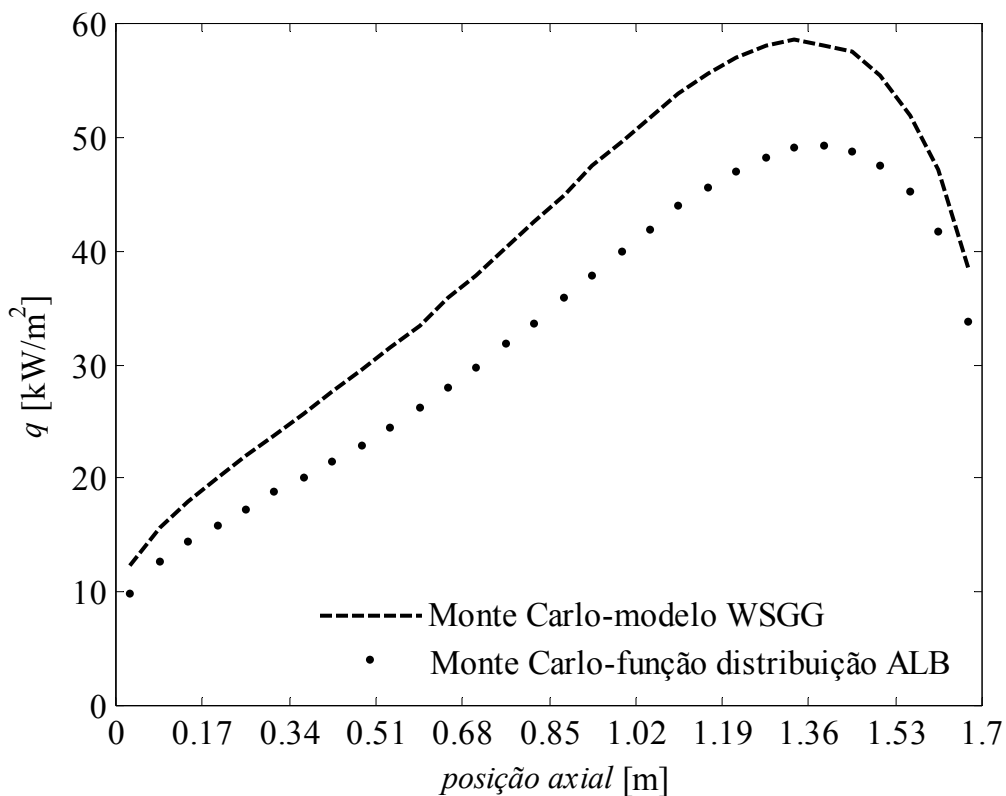


Figura 5.32 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica obtidos através dos método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Para demonstrar o efeito da discretização, foram considerados casos em que a cavidade foi dividida em menor número de zonas. O método utilizado para a obtenção das

soluções foi o Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. A Figura 5.33 ilustra o efeito, no campo de temperatura, da discretização da cavidade em um número menor de zonas. A Figura 5.33a mostra novamente a distribuição de temperatura, no meio, quando utilizadas trezentas zonas de volume ($N_z = 30$ e $N_r = 10$). A Figura 5.33b, mostra a distribuição de temperatura quando utilizado 1/4 desse número, setenta e cinco zonas de volume de meio ($N_z = 15$ e $N_r = 5$).

Como pode ser verificado observando a figura acima, o detalhamento da distribuição de temperatura é bem menor no caso em a cavidade foi discretização em um numero mais baixo de zonas. O mesmo acontece para a distribuição de concentrações. A Figura 5.34 mostra os resultados para os fluxos de calor na parede cilíndrica obtidos para esses dois casos. A figura apresenta também resultados para outros dois níveis de discretização intermediários: ($N_z = 30$ e $N_r = 5$) e ($N_z = 15$ e $N_r = 10$).

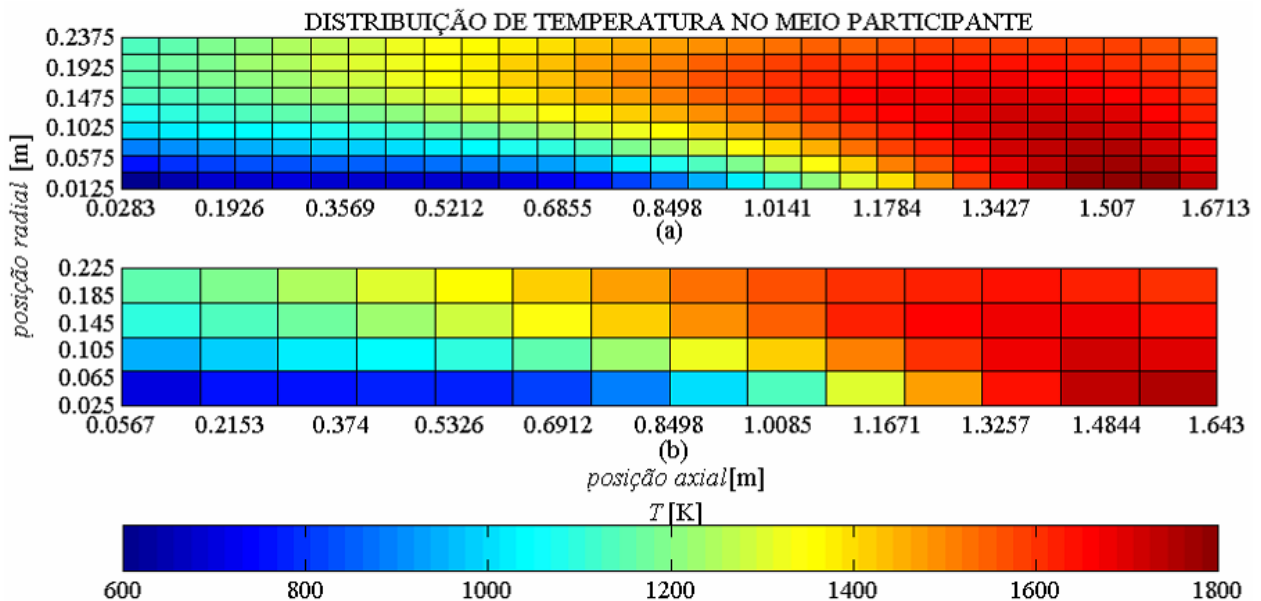


Figura 5.33 Distribuição de temperatura na câmara de combustão cilíndrica: (a) trezentas zonas de volume de meio participante ($N_z = 30$, $N_r = 10$) e (b) setenta e cinco zonas de volume de meio participante $N_z = 15$, $N_r = 5$.

Como pode ser verificado, mesmo para o caso em que foi utilizado o menor número de zonas de volume de meio participante setenta e cinco (75), os resultados continuaram próximos aos obtidos utilizando-se trezentas (300) zonas de volume de meio participante. A taxa de transferência de calor para a parede cilíndrica foi 1,25% maior para o caso em que foram utilizadas menos zonas ($N_z = 15$ e $N_r = 5$) em comparação com o caso em que foram utilizadas mais zonas. Comparando-se os outros dois casos com o caso em que foram utilizadas mais

zonas, obtém-se que, para o caso em que $Nz = 15$ e $Nr = 10$, a taxa de transferência de calor foi 1,2% maior, e para o caso em que $Nz = 30$ e $Nr = 5$, não houve diferença significativa, pois a taxa de transferência de calor foi 0,11%, dentro dos limites de incerteza estatística. O desvio padrão relativo ao valor local do fluxo de calor, na parede cilíndrica, ficou abaixo de 0,6%, para todos os resultados apresentados na Figura 5.34.

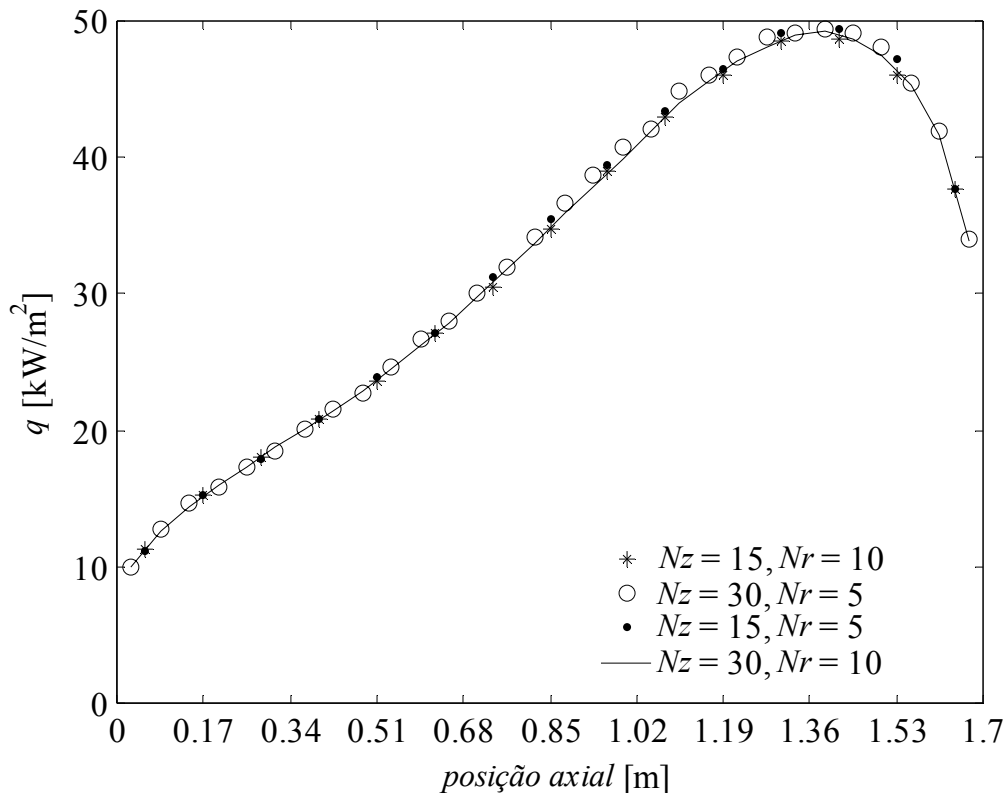


Figura 5.34 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica para diferentes níveis de discretização do domínio.

Segundo caso: $400 \text{ K} \leq T < 1800 \text{ K}$

No segundo caso considerado, são utilizadas as correlações C 2, através das quais se busca reproduzir de maneira fiel os campos de temperatura apresentados na Figura 5.18. Assim as temperaturas variam dentro do intervalo de pouco mais de 330 K a quase 1800 K. Entretanto, temperaturas abaixo da temperatura prescrita para as superfícies de 400 K ocorrem somente em algumas poucas localizações no meio e não têm grande influência no resultado das trocas radiantes totais. Dessa forma, é considerado que o intervalo de temperatura para a análise é $400 \text{ K} \leq T < 1800 \text{ K}$.

Os resultados para o divergente do fluxo de calor no meio aparecem nas Figuras 5.35a, para a solução em que foi utilizada a função distribuição ALB e 5.35b, para a solução em que foi utilizado o modelo WSGG.

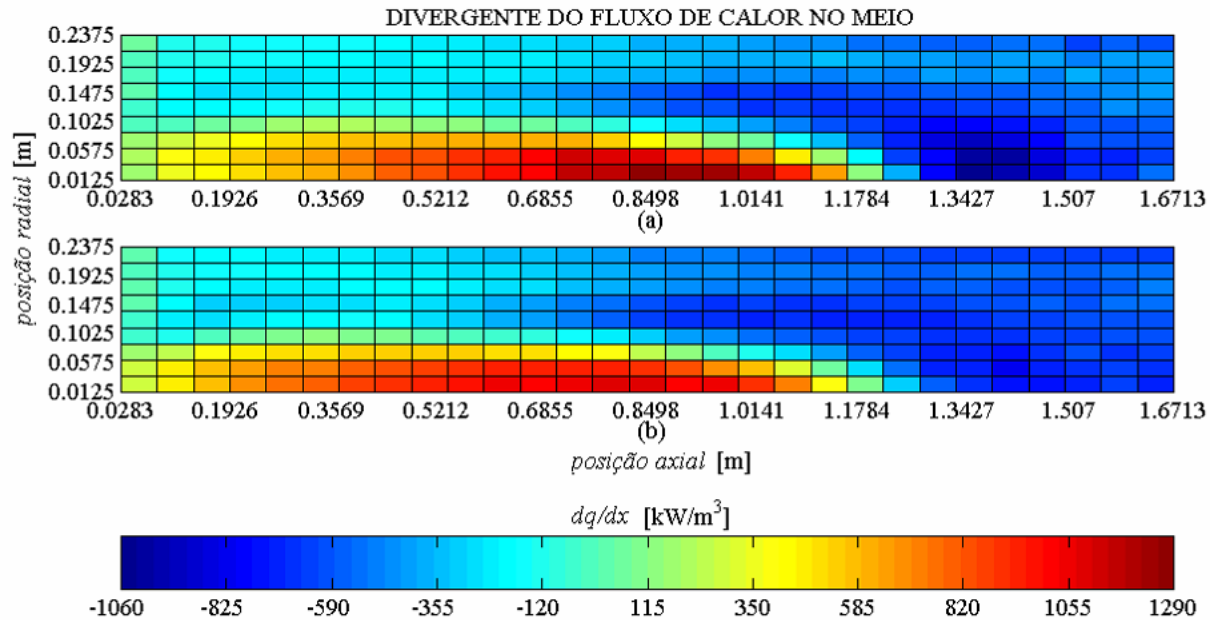


Figure 5.35 Divergente do fluxo de calor no meio obtido com: (a) método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e (b) método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG.

A figura 5.36 mostra os fluxos de calor na parede lateral cilíndrica obtidos com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e com método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG.

De um modo geral, os resultados ficaram próximos aos obtidos para o caso em que não foi necessária a extrapolação dos dados para temperaturas mais baixas. A taxa de calor emitido do meio para as superfícies obtida com o modelo WSGG foi de 108,3 kW, 26,2 % maior que a obtida utilizando-se a função distribuição ALB. O fluxo de calor máximo na parede lateral obtido com o método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG foi 24 % maior que o obtido com o outro método.

Para a obtenção das soluções, a cavidade foi dividida mais uma vez em trinta (30) partes iguais na direção axial e dez (10) na direção radial, compondo trezentas (300) zonas de volume de meio e cinquenta (50) zonas de superfície. Tanto para a obtenção da solução em que o método de Monte Carlo foi aplicado ao modelo WSGG quanto para a obtenção da solução em que foi aplicado à função distribuição ALB, foram realizadas dez (10) simulações. Em cada

simulação foram emitidos cinquenta mil ($5 \cdot 10^4$) pacotes de energia de cada zona. O desvio-padrão percentual relativo ao fluxo de calor local, na parede cilíndrica, ficou abaixo de 1%, para ambos os casos, em todas as zonas.

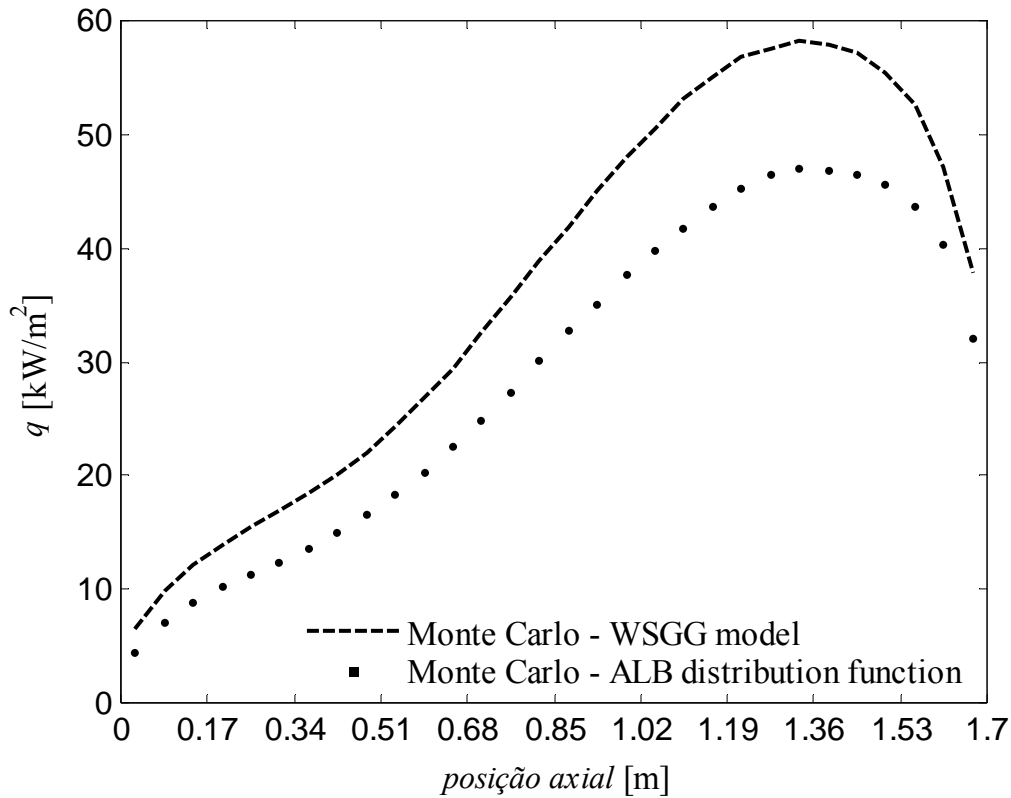


Figura 5.36 Fluxos de calor na parede lateral cilíndrica obtidos através dos métodos de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB.

Como na solução deste último problema o intervalo recomendável para a utilização das correlações obtidas por Smith et al., 1982, foi extrapolado, foram obtidos novos resultados para a emitância total do meio. A concentração considerada para as espécies participantes foi de 20% de vapor d'água e 10% de dióxido de carbono, ou seja, a mesma considerada para o meio em que o modelo WSGG foi utilizado. O intervalo de temperatura é de 400 K a 1800 K, compreendendo as temperaturas referentes a todos os problemas em cavidade cilíndrica solucionados. Os resultados são mostrados na Figura 5.37. A linha vertical indica a temperatura limite para a qual as correlações de Smith et al., 1982, foram obtidas. Para a obtenção dos resultados que aparecem à esquerda dessa linha, houve extrapolação na utilização das correlações.

Os resultados obtidos com o modelo WSGG apresentados nas Figuras 5.35 e 5.36 mantiveram a mesma tendência que nos casos anteriores. Isso indica que não houve um grande desvio, apesar de algumas das temperaturas do meio estarem aquém do intervalo recomendável para a utilização das correlações de Smith et al., 1982. Esse fato pode ser explicado através dos resultados apresentados na Figura 5.37. Comparando-se as emitâncias totais obtidas com as correlações de Smith et al., 1982, e as emitâncias totais obtidas com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, verifica-se que embora existam diferenças significativas na região de temperaturas abaixo de 600 K, nos casos em que as emitâncias são mais elevadas, $(Y_{H_2O} + Y_{CO_2})S = 0,3; 0,1; 1$ e 10 , as diferenças não foram maiores que para a região de temperaturas na qual a utilização das correlações é recomendável. Além disso, erros resultantes da utilização das correlações na região de temperaturas abaixo de 600 K, têm pouca influência no resultado final das trocas de calor por radiação, pois as regiões do meio com baixa temperatura emitem menos que as regiões quentes e, portanto, contribuem menos para as trocas de calor como um todo.

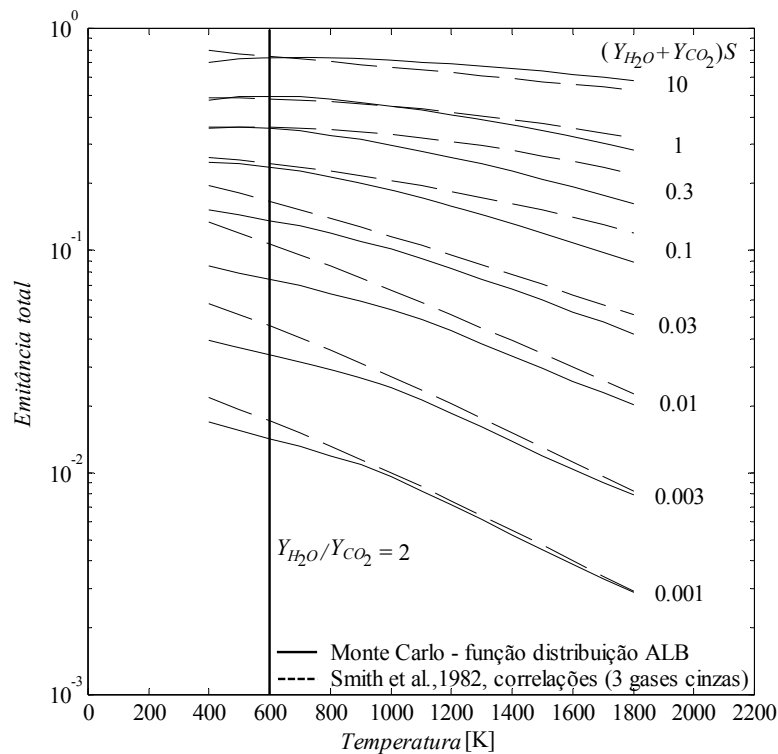


Figura 5.37 Emitância total em função da soma das frações de H_2O e CO_2 e do comprimento de caminho de meio.

5.3 Análise do Modelo dos Pacotes de Energia Multi-espectrais

Com a finalidade de analisar melhorias em termos de eficiência computacional, que podem ser obtidas com a utilização do modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, nesta seção, esse modelo é empregado em conjunto com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB na obtenção de soluções para um problema de transferência de calor por radiação. Esse problema é o primeiro solucionado na subseção 5.2.3.

O meio participante é não-homogêneo e não-isotérmico. As distribuições de temperatura, de concentração de vapor d'água e de concentração de dióxido de carbono são mostradas, respectivamente, nas Figuras 5.19, 5.20 e podem ser calculadas através das correlações apresentadas no apêndice C. A distribuição do vapor de água é considerada a mesma do dióxido de carbono.

Para a obtenção dos resultados referentes a esse meio participante, que são mostrados nas Figuras 5.31a e 5.32, a cavidade foi dividida em trinta (30) partes iguais na direção axial e dez (10), na radial, totalizando trezentas (300) zonas de volume de meio e cinquenta (50) zonas de superfície, sendo que, as paredes das extremidades foram divididas em dez (10) zonas, cada, e a parede cilíndrica foi dividida em trinta (30) zonas. Foram realizadas duzentas (200) simulações. Em cada simulação foram emitidos cinco mil ($5 \cdot 10^3$) pacotes de energia de cada zona, totalizando um milhão ($1 \cdot 10^6$) de pacotes de energia emitidos de cada zona. O máximo desvio-padrão percentual, relativo ao valor local do fluxo de calor na parede cilíndrica, foi de 0,4%. A média do desvio-padrão percentual sobre todas as zonas da parede cilíndrica foi de 0,306%.

No código computacional utilizado, existe um tempo de processamento necessário para o cálculo e armazenamento de certos dados relacionados à obtenção das funções distribuição ALB e caracterização das propriedades do meio. Esses dados são calculados e armazenados toda vez que é realizada uma simulação e o tempo necessário, independe do número de pacotes. Assim quanto menos simulações forem utilizadas para a obtenção da solução, o tempo de cálculo e armazenamento de dados será menor. No caso considerado aqui, o tempo para o cálculo e armazenamento de dados foi de aproximadamente 5 mim.

Foram realizadas muitas simulações (duzentas), para facilitar a análise estatística. Entretanto, um resultado equivalente ao apresentado na Figura 5.32, poderia ter sido obtido com uma única simulação, emitindo-se um milhão ($1 \cdot 10^6$) de pacotes de energia e, dessa forma, o processo de cálculo e armazenamento de dados teria sido realizado uma única vez. Assim, o tempo necessário para o cálculo e armazenamento desses dados não é muito relevante nesta

análise, sendo os tempos de processamento relacionados aos cálculos de emissão e absorção de pacotes de energia muito mais importantes.

Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos em um código computacional escrito em FORTRAN. Utilizando-se um processador Athlon de 1,56 GHz com 256 MB de memória RAM, o tempo médio necessário para a emissão e absorção de cada pacote de energia foi de $2,087 \cdot 10^{-5}$ s. Em cada uma das duzentas simulações foram emitidos 5.000 pacotes de energia de cada uma das 300 zonas de volume de maior participante e 50 zonas de superfície, totalizando trezentos e cinquenta milhões ($350 \cdot 10^6$) pacotes, resultando num tempo de processamento total de 7.730,6 s.

Em todos os outros casos relativos à cavidade cilíndrica, incluindo aqueles em que a cavidade foi dividida em um número menor de zonas, o tempo médio relativo a emissão e a absorção de um pacote de energia foi aproximadamente o mesmo, ou seja, $2,087 \cdot 10^{-5}$ s. Nos casos em que o método de Monte Carlo foi aplicado em conjunto com o modelo WSGG, o tempo médio relacionado a emissão e a absorção de um pacote de energia foi de aproximadamente $1,34 \cdot 10^{-5}$ s. Assim, o tempo de processamento total relativo a emissão e absorção de pacotes foi de aproximadamente 2350 s.

Para quantificar o ganho em eficiência computacional que pode ser alcançado com a utilização do modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, algumas soluções foram obtidas para o problema de meio não-homogêneo e não isotérmico descrito acima. Em cada solução, o pacote de energia multi-espectral foi composto por um número diferente de sub-pacotes.

Na Figura 5.38 são mostrados resultados obtidos utilizando-se 3, 5, 7, 10 e 20 sub-pacotes para compor o pacote multi-espectral. Para cada caso foram realizadas várias simulações. Em cada simulação, foram emitidos cinco mil ($5 \cdot 10^3$) pacotes de energia multi-espectrais de cada zona. Para todos os casos o nível de oscilação foi considerado satisfatório quando a média do desvio padrão percentual sobre todas as zonas da parede cilíndrica foi imediatamente menor que 0,3%. Para se atingir esse valor, para cada caso, foi necessário um certo número de simulações. O número de simulações foi de 87, 66, 55, 46 e 34, respectivamente, para os casos em que o pacote de energia multi-espectral foi composto por 3, 5, 7, 10 e 20 sub-pacotes. O número total de pacotes de energia multi-espectrais, para cada caso, é proporcional ao número de simulações. A Figura 5.38 mostra também o resultado obtido com duzentas (200) simulações sem a utilização do modelo dos pacotes de energia multi-espectrais (antes apresentado na Figura 5.32). Na figura aparece também os tempo de processamento referentes à obtenção de cada resultado.

Como pode ser observado, o tempo de processamento diminuiu consideravelmente quando passou a ser utilizado três sub-pacotes para compor o pacote de energia multi-espectral, comparado com o caso em que o modelo não foi utilizado. Após essa primeira redução, devido à natureza estatística do método de Monte Carlo, houve uma oscilação no tempo, antes que o valor mínimo, para os casos considerados, fosse alcançado. O tempo mínimo foi de 4.224 s para o caso em que foram utilizados sete sub-pacotes. Comparando-se esse valor com o tempo relativo à obtenção do resultado sem a utilização do modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, a redução foi de aproximadamente 55%. Para as simulações em que foram utilizados mais de sete sub-pacotes, o tempo de processamento subiu quase linearmente com o número de sub-pacotes utilizados para compor o pacote de energia multi-espectral. A relação número de sub-pacotes versus tempo de cálculo pode ser visualizada através da Figura 5.39. Nessa figura, além dos tempos de cálculo relacionados aos resultados apresentados na Figura 5.38, são apresentados resultados referentes à utilização de trinta e cinco (35) e cinquenta e cinco (55) sub-pacotes para compor o pacote de energia multi-espectral. Para esses dois últimos casos, foi adotado o mesmo critério para considerar o nível de oscilações satisfatório, ou seja, a média do desvio-padrão percentual sobre todas as zonas da parede cilíndrica deve ser menor que 0,3%. Novamente, em cada simulação foram emitidos cinco mil ($5 \cdot 10^3$) pacotes de energia de cada zona. O caso em que o modelo não é utilizado é equivalente a sua utilização considerando o pacote de energia multi-espectral como sendo composto por apenas um único sub-pacote.

A Figura 5.40 mostra a diminuição no número de pacotes de energia multi-espectrais em função do aumento do número de sub-pacotes no modelamento necessários para se atingir o critério de convergência, ou seja, o desvio-padrão inferior a 0,3%.

À medida que a quantidade de sub-pacotes é aumentada, o número de pacotes necessários para alcançar o nível de oscilação desejado se aproxima assintoticamente de um valor para o qual não há incerteza estatística relacionada à contabilização do comportamento espectral. Na Figura 5.40, à medida que o número de sub-pacotes aumenta, o número de pacotes multi-espectrais necessários se aproxima da reta *Número de pacotes* = $1,4 \cdot 10^5$ (cento e quarenta mil).

A Figura 5.41 ilustra o efeito do aumento no número de sub-pacotes utilizados no modelamento. Nessa figura pode ser visto o resultado obtido sem a utilização do modelo dos pacotes de energia multi-espectrais, com duzentas (200) simulações. Aparecem também os resultados obtidos com uma única simulação, em que são emitidos cinco mil ($5 \cdot 10^3$) pacotes de cada zona, para os casos em que o pacote de energia multi-espectral é composto por 1, 3, 7 e 55 sub-pacotes. Como pode ser observado, para o caso em que o modelo dos pacotes de energia

multi-espectrais não foi utilizado, os resultados obtidos para os fluxos de calor apresentam maior dispersão em relação à solução obtida com duzentas simulações. À medida que o número de sub-pacotes aumenta, a dispersão diminui, de maneira que, a solução obtida utilizando-se cinquenta e cinco (55) sub-pacotes está mais próxima da obtida com duzentas simulações. Para esse número de pacotes multi-espectrais (cinco mil), a utilização de um número maior de sub-pacotes não poderá reduzir consideravelmente o nível de oscilação dos resultados, devido aos motivos colocados nos comentários a respeito dos resultados apresentados na Figura 5.40.

Com a aplicação do modelo dos pacotes multi-espectrais apresentada nesta seção, foi verificado que sua utilização pode proporcionar uma significativa redução no tempo necessário para o cálculo da transferência de calor por radiação através do método de Monte Carlo. No caso solucionado, com características típicas de problemas de combustão câmaras cilíndricas, o tempo foi reduzido praticamente pela metade.

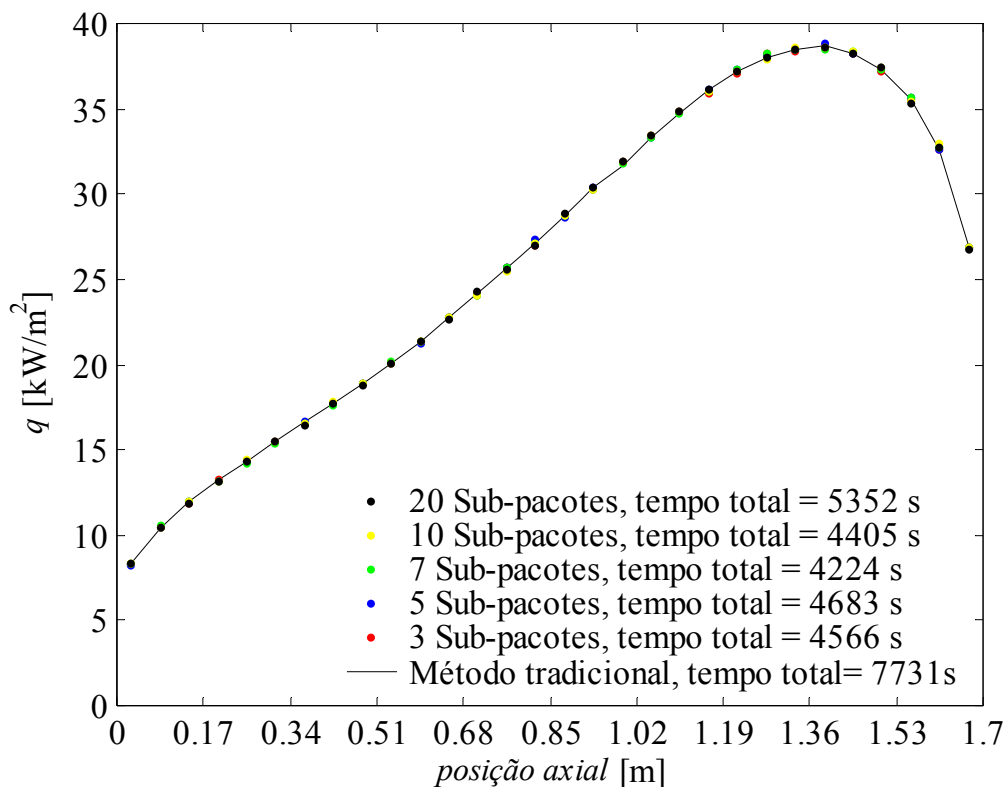


Figura 5.38 Resultados para o fluxo de calor na parede lateral cilíndrica obtidos utilizando-se quantidades diferentes de sub-pacotes para compor o pacote de energia multi-espectral.

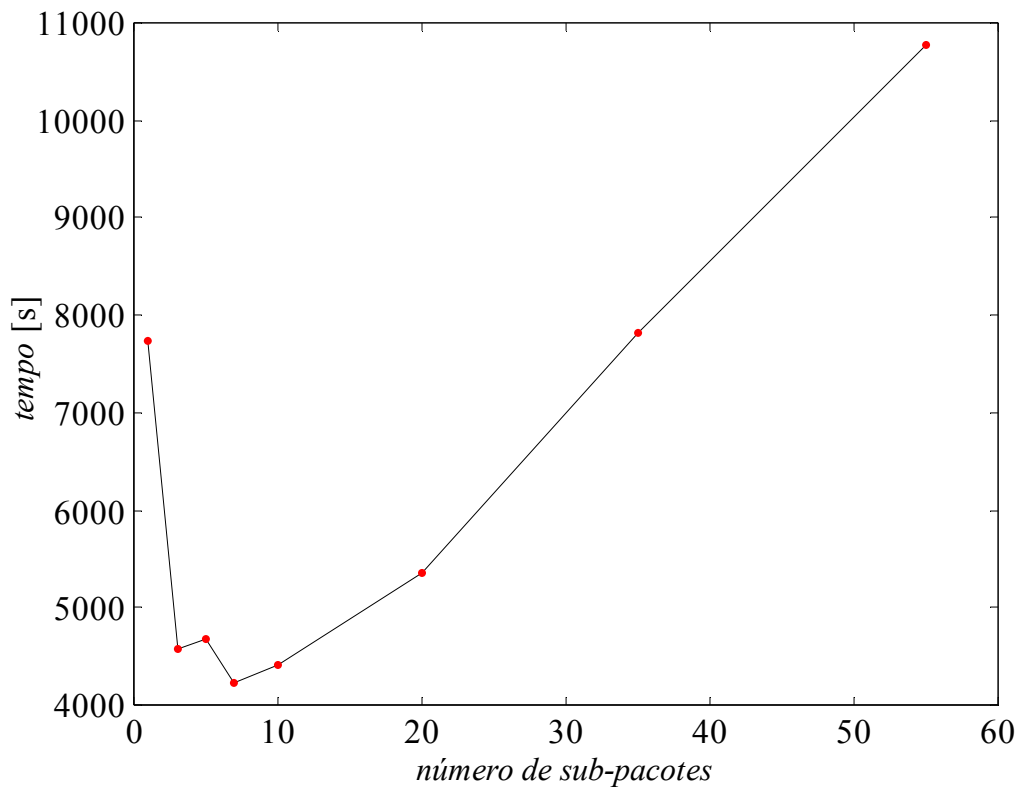


Figura 5.39 Relação tempo de processamento versus número de sub-pacotes utilizados.

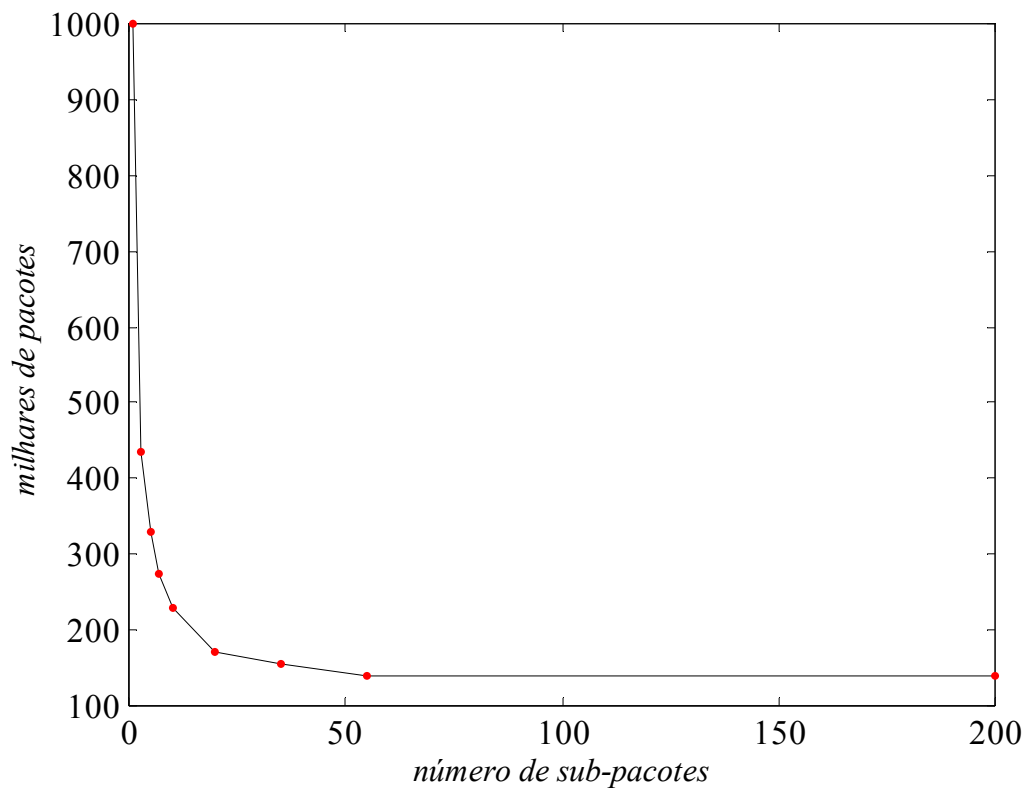


Figura 5.40 Relação número de pacotes de multi-espectrais versus número de sub-pacotes.

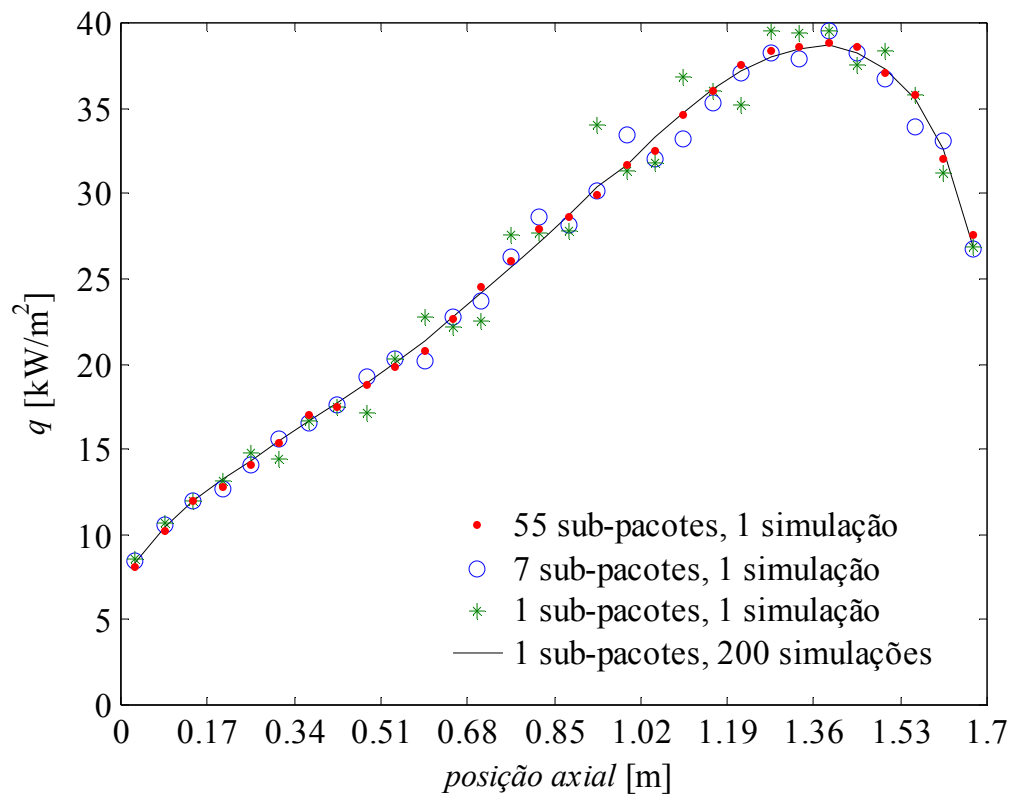


Figura 5.41 Resultados para o fluxo de calor na parede lateral cilíndrica obtidos utilizando-se quantidades diferentes de sub-pacotes para compor o pacote de energia multi-espectral.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

6.1 Conclusões

O método de Monte Carlo apresenta grandes vantagens, em relação a outras técnicas, na solução de problemas de transferência de calor por radiação envolvendo cavidades geometricamente complexas, efeitos de reflexão e espalhamento especulares e radiação em gases reais, que se caracterizam pela complexa dependência das propriedades radiantes em relação ao comprimento de onda.

Neste trabalho, foi proposta a aplicação do método de Monte Carlo à função distribuição de energia de corpo negro nas linhas espectrais (função distribuição ALB), resultando em uma metodologia que possibilita contabilizar o comportamento espectral de meios participantes através do método de Monte Carlo. Foi sugerida uma forma de implementação que permitiu estabelecer uma relação simples e direta entre a função distribuição ALB e a função distribuição cumulativa do método de Monte Carlo. A implementação proposta, além de facilitar a utilização do método, proporciona ganhos em eficiência computacional, pois evita que seja necessária a solução numérica de equações integrais, o que é requerido quando problemas são solucionados através de outras técnicas em que o Monte Carlo é aplicado a métodos de distribuição [Wang et. al, 2007].

O método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB apresenta a vantagem adicional de que a grande quantidade de números randômicos gerados para reduzir as oscilações estatísticas naturalmente simula a contribuição de um grande número de intervalos espectrais. Isso não acontece quando a função distribuição ALB é utilizada em conjunto com métodos determinísticos, como o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado nas linhas espectrais (SLW), que requer a escolha arbitrária de um número limitado de coeficientes de extinção espectrais molares, cada qual associado a um único intervalo espectral.

Para a validação da metodologia desenvolvida neste trabalho, foi resolvida uma série de problemas unidimensionais de transferência de calor por radiação em meios participantes. Inicialmente, foram considerados meios homogêneos, tanto isotérmicos como não isotérmicos, constituídos de vapor d'água e ar; em seguida, considerou-se um meio não-homogêneo e não-isotérmico constituído de vapor d'água, dióxido de carbono e ar. As soluções foram comparadas com outras obtidas através do modelo SLW e da integração linha-por-linha (LBL) [Denison e Webb, 1993b, 1995b e 1995c]. Os resultados apresentaram excelente concordância e, de um modo geral, ficaram mais próximos dos obtidos por integração LBL que os obtidos com o

modelo SLW. Apesar disso, ambos os resultados obtidos através de métodos em que a função distribuição ALB foi utilizada, apresentaram pequenas diferenças em alguns pontos em relação aos obtidos por integração LBL. Duas possíveis causas são a utilização de correlações para a função distribuição ALB e a adoção da hipótese de K -correlacionado. Mais adiante, quando serão feitas proposições para futuras pesquisas, será sugerida uma possibilidade para eliminar a necessidade de utilização da hipótese de K -correlacionado.

Apesar da simplicidade relacionada à implementação proposta, o esforço computacional requerido em simulações através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB ainda é elevado. Isso restringe a sua total aplicação em problemas de transferência de calor por radiação em sistemas de combustão, os quais requerem a solução iterativa de processos de reações químicas, escoamento turbulento de fluidos, convecção e radiação de calor.

Visando a redução dos tempos computacionais relacionados à utilização da técnica de Monte Carlo no modelamento do comportamento espectral de meios participantes (como no caso em que é aplicado à função distribuição ALB), foi proposto o modelo dos pacotes de energia multi-espectrais. Este modelo consiste em construir um pacote de energia (multi-espectral) composto por vários sub-pacotes (cada qual associado a um único intervalo espectral) e, com isso, dissociar as incertezas relacionadas à caracterização espectral das associadas às características geométricas, como localização e ângulos de emissão.

Resultados foram obtidos, utilizando-se números diferentes de sub-pacotes no modelo dos pacotes de energia multi-espectrais. Estes resultados foram comparados entre si bem como com resultados obtidos sem a utilização do modelo. O exemplo selecionado foi o de transferência de calor no interior de uma cavidade cilíndrica com dimensões e distribuições de temperatura e concentrações de vapor d'água e dióxido de carbono características de uma câmara de combustão típica. Os resultados confirmaram os preceitos sobre os quais a idéia da metodologia foi fundamentada. À medida que o número de sub-pacotes utilizados no modelamento aumentou, o número de pacotes de energia multi-espectrais relacionados a um determinado desvio-padrão dos resultados foi aproximando-se de um mesmo valor finito, demonstrando que a incerteza estatística se tornou independente da incerteza relacionada a características espectrais. Em termos de tempo de computacional, para o caso estudado, a utilização do modelo dos pacotes multi-espectrais proporcionou uma redução em quase cinquenta por cento (50%).

A despeito do alto custo computacional relacionado a simulações em Monte Carlo, o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB se mostrou uma alternativa

vantajosa para a obtenção de soluções precisas da transferência de calor por radiação em meios participantes espectrais. Assim, este método foi utilizado para gerar resultados que permitem avaliar erros que podem advir de aproximações necessárias para o emprego de modelos mais simplificados.

O modelo WSGG é provavelmente o mais utilizado devido a sua grande eficiência computacional. Entretanto, requer a adoção de muitas hipóteses simplificativas. Uma importante aproximação é relativa ao modelamento do comportamento espectral. As emitância e absorptância do meio são modeladas como sendo compostas pela soma de frações de emitância e absorptância de gases cinzas com coeficientes de absorção invariáveis. O número de gases cinzas considerados no modelamento é pequeno, geralmente três. As frações (pesos) da contribuição de cada um dos gases para os valores totais são as únicas variáveis do problema e dependem exclusivamente da temperatura do gás. Existem funções de ponderação que estabelecem a variação dos pesos dos gases cinzas em relação à temperatura do meio.

Outra aproximação é que para a utilização do modelo WSGG é necessário assumir que o meio é homogêneo. Além disso, é necessário a utilização de correlações para funções de ponderação dos pesos dos gases cinzas, as quais são disponíveis apenas para alguns gases com concentrações especificadas. Smith et al., 1982, apresentaram correlações para gases que contém apenas uma espécie absorvedora, a qual pode ser o vapor d'água ou o dióxido de carbono em qualquer valor de concentração, e apresentou também correlações para meios constituídos por estas duas espécies absorvedoras, porém com apenas duas concentrações possíveis: (20% de H₂O, 10% e 70% de ar) e (10% de H₂O, 10% de CO₂ e 80% de ar), que são as frações resultantes da combustão estequiométrica do metano e do etano, respectivamente.

Neste trabalho o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB foi utilizado na obtenção de diversos resultados objetivando efetuar uma análise de erros relacionados a simplificações inerentes ao modelo WSGG. Foram obtidos resultados que permitiram avaliar separadamente os efeitos das aproximações relativas à concentração do meio e do modelamento espectral, bem como resultados em que o erro se deve ao efeito conjunto dessas duas aproximações.

Inicialmente o método foi aplicado na solução de dois problemas em uma cavidade unidimensional, com o objetivo de avaliar aproximações relativas ao meio participante. Através dos resultados obtidos para o primeiro problema foi analisado o efeito de se aproximar um meio não-homogêneo como homogêneo. Para o segundo problema, foram obtidos resultados através dos quais foram avaliados erros que podem surgir quando outros meios são aproximados como os decorrentes da combustão estequiométrica do metano, para o qual Smith et al., 1982,

apresentaram correlações para utilização no modelo WSGG. Foram verificados erros nos resultados dos fluxos de calor nas paredes de 29%, para o primeiro problema e 16%, para o segundo problema, demonstrando que as aproximações podem lavar a erros consideráveis.

Com o objetivo de ampliar a base de dados para a análise, foram solucionados outros quatro casos em que o meio participante era homogêneo. Entretanto, ao invés de impor distribuições de temperatura e valores de concentração hipotéticos, as concentrações consideradas foram as dos produtos da combustão de combustíveis típicos: metano, o principal componente do gás natural, e octano, o principal componente da gasolina. Foram consideradas reações químicas de combustão com excesso de ar e estequiométrica. As distribuições de temperatura foram determinadas com base na temperatura adiabática de chama referente ao processo de combustão considerado. Para todos os casos, através da comparação entre os resultados obtidos para os meios decorrentes dos processos de combustão e para os meios aproximados, foram verificadas diferenças consideráveis. Para as taxas de transferência de calor do meio para as paredes, foram verificadas discrepâncias de 16 a 50%.

A análise do efeito da concentração das espécies químicas foi também realizada para uma cavidade cilíndrica em que os campos de temperatura e concentrações variavam de forma similar a dos meios que ocorrem no interior de uma câmara de combustão típica. Para comparação e avaliação dos erros foi considerado outro meio participantes. Este meio apresentava concentração igual à dos produtos da combustão estequiométrica do etano; que vem ser a igual à concentração média do meio não-homogêneo. Novamente houve diferenças significativas entre os resultados. A taxa de transferência de calor do meio resultante da combustão estequiométrica para as paredes foi aproximadamente 15 % mais elevada que a obtida para o meio não-homogêneo.

Em todos os resultados obtidos para analisar erros devido a aproximações usuais para a concentração dos meios participantes, foram verificadas diferenças bastante significativas. Assim, foi constatado que tais aproximações podem induzir erros consideráveis nos resultados.

Dois problemas de transferência de calor em cavidade cilíndrica contendo meio participante homogêneo foram solucionados. A mesma distribuição de temperatura, típica de uma câmara de combustão, foi considerada para os dois problemas, que diferiam apenas na concentração do meio. O primeiro meio tinha composição igual à dos produtos da combustão estequiométrica do metano (20% H₂O e 10% CO₂), enquanto a composição do segundo era igual à dos produtos de combustão estequiométrica do etano (10% H₂O e 10% CO₂). Através dos resultados obtidos para esses meios homogêneos, avaliou-se exclusivamente o efeito das aproximações referentes ao comportamento espectral. Os problemas foram solucionados através

dos método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG, método das zonas em conjunto com o modelo WSGG e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Através da comparação entre os resultados obtidos com as diferentes técnicas, constatou-se acentuadas diferenças nos fluxos de calor para a parede lateral cilíndrica e nas taxas de transferência de calor no meio obtidos com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB em relação aos resultados obtidos através das outras duas metodologias, que apresentaram resultados concordantes entre si.

Por último, foram obtidas soluções através do método de Monte Carlo aplicado ao modelo WSGG e à função distribuição ALB, para dois problemas que permitiram avaliar o efeito conjunto das discrepâncias relacionadas tanto às aproximações referentes ao meio quanto às referentes ao modelamento espectral. Novamente foram consideradas cavidades cilíndricas em que as distribuições de temperatura e concentrações eram semelhantes às encontradas em uma câmara de combustão. Da mesma forma que para os outros casos, nesses dois últimos problemas considerados, foram verificadas diferenças acentuadas entre os resultados obtidos com as duas metodologias, mostrando mais uma vez que as aproximações necessárias à utilização do modelo WSGG podem conduzir a erros bastante expressivos.

Existem técnicas que consideram o efeito espectral de forma detalhada, como é o caso do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB. Entretanto, sua aplicação na solução da transferência de calor por radiação em problemas em sistemas de combustão, que envolvem muitos outros fenômenos além da radiação e requerem solução iterativa, aumenta em muito o tempo de processamento necessário para a obtenção dos resultados. Por outro lado, o modelo WSGG, que consome pouco tempo computacional, pode levar a erros consideráveis, como demonstrado através dos resultados obtidos neste trabalho. Visto que a radiação constitui um importante mecanismo de troca de energia em sistemas de combustão, esses erros podem comprometer a precisão dos resultados para a troca de calor como um todo. Assim, existe uma grande necessidade de desenvolvimento de métodos que permitam considerar o comportamento espectral em problemas de transferência de calor em meios participantes. Algumas proposições para futuras pesquisas com esta finalidade são sugeridas a seguir.

6.2 Sugestões para Futuros Trabalhos

A despeito dos erros relacionados à sua aplicação, o modelo WSGG, devido à grande eficiência computacional, é um método largamente utilizado na solução de problemas de trocas

de calor por radiação. Assim sendo, é de fundamental interesse a realização de melhorias neste método, que tornem possível a obtenção de resultados mais precisos através do mesmo.

A análise realizada neste trabalho mostrou que erros bastante relevantes podem advir da necessidade de se aproximar meios não-homogêneos como os homogêneos constituídos por frações específicas de certos produtos de combustão. Entretanto, nos casos em que a concentração do meio homogêneo aproximado era igual à concentração média do meio considerado, os erros foram relativamente menores. Assim, a simples compilação de mais correlações que permitam considerar diversas misturas de gás distintas certamente contribuiria para a redução dos erros associados ao modelo. Entretanto, essa redução seria limitada, pois outras aproximações importantes continuariam necessárias. Uma outra sugestão de pesquisa é a respeito da possibilidade de obtenção de correlações que incorporem o modelamento do efeito da variação na concentração das espécies químicas.

Observando os resultados obtidos para analisar exclusivamente os erros relacionados ao modelamento espectral, nota-se que os fluxos de calor para a parede lateral cilíndrica obtidos utilizando-se o modelo WSGG apresentaram a mesma tendência que os obtidos através do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, porém foram sempre mais elevados. Isso é um indicativo de que resultados mais próximos poderiam ser obtidos e que grande parte dos erros, no modelo WSGG, são em função de discrepâncias devido a imprecisões nas correlações. As diferenças consideráveis que apareceram em resultados obtidos para as emitâncias, através das correlações de Smith et al., 1982, e do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB corroboram essa hipótese. Baseando-se nesses fatos, podem ser propostas pesquisas a respeito da obtenção de correlações a partir de dados base gerados com o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, mais detalhado espectralmente que o modelo de banda larga exponencial, método utilizado para gerar os resultados a partir dos foram geradas as correlações de Smith et al., 1982.

O aperfeiçoamento de modelos espectrais sofisticados, como os SLW, FSK, CW, PMC/FSK e o método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB, a fim de reduzir os tempos computacionais relacionados à utilização dos mesmos, bem como o desenvolvimento de novos modelos seria o ideal para a solução precisa das trocas radiantes em problemas de transferência de energia em sistemas de combustão. Os métodos em que o Monte Carlo é utilizado, como no caso da metodologia proposta neste trabalho, são atualmente os mais dispendiosos em termos de tempo computacional. Entretanto, o Monte Carlo é potencialmente o método mais preciso e versátil, na solução de problemas de troca radiante. Além disso, os tempos de processamento relacionados a esse método tendem a aumentar de maneira diretamente

proporcional ao aumento da complexidade dos problemas, muito menos do que ocorre para outras técnicas. Da mesma forma, os tempos computacionais relacionados à obtenção de soluções através do método de Monte Carlo decrescem de maneira diretamente proporcional ao aumento da capacidade de processamento dos computadores. Devido a isso, a utilização de computação paralela é bastante vantajosa em simulações através do método de Monte Carlo.

Conforme demonstrado por Solovjov e Webb, 2000, a hipótese de *K*-correlacionado utilizada nos modelos SLW e método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB pode ter sua precisão reduzida em situações em que ocorrem variações acentuadas nas distribuições de temperatura e concentração das espécies químicas. Solovjov e Webb, 2005, demonstraram que o modelo CW, no qual não é utilizada a hipótese de *K*-correlacionado pode ser utilizado em conjunto com outras técnicas de solução, incluindo a função distribuição ALB. A utilização conjunta do método de Monte Carlo aplicado à função distribuição ALB e do método CW, a fim de evitar a hipótese de *K*-correlacionado, poderia possibilitar um aumento na precisão do método quando utilizado na solução de problemas em que ocorrem fortes variações nas temperatura e concentrações. Assim, o método de Monte Carlo aplicado à função ALB poderia ser utilizado na obtenção de soluções ainda mais precisas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Denison M. K. e Webb B. W., 1993, **“A spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model for arbitrary RTE solvers”**, Journal of Heat Transfer, 115: 1004-1011.

Denison M. K. e Webb B. W., 1993, **“An absorption-line blackbody distribution function for efficient calculation of total gas radiative transfer”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 50: 499-510.

Denison M. K e Webb B. W., 1995, **“The spectral line-based weighted sum-of-gray-gases model in nonisothermal nonhomogeneous media”**, Journal of Heat Transfer, 117: 359-365.

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

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

Farmer, J. and Howell, J. R., 1998, **“Comparison of Monte Carlo Strategies for Radiative Transfer in Participating Media”**, Advances in Heat Transfer, 31: 333 – 429.

Fleske, J. D. e Tien, C L., 1975, **“Wide Band Characterization of the Total Band Absorption of Overlapping Infrared Gas Bands”**, Combust.Sci. Technol., 11: 111.

Goody, R., West, R., Chen, L., e Crisp, D., 1989, **“The correlated-*K* method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 42: 539-550.

Hottel, H. C. e Sarofim, A. F., 1967, **“Radiative Transfer”**, New York: McGraw-Hill Book Company

Howell, 1998, **“The Monte Carlo Method in Radiative Heat Transfer”**, Journal of Heat Transfer, 120: 547 - 560.

Maurente A., 2003 **“Utilização do Método de Monte Carlo na Resolução de Problemas de Transferência de Carlo por Radiação em Cavidades que Contém Meio Participante”**, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.

Maurente A., Bayer P. O. e França F. H. R., 2007, **“Utilização do Método de Monte Carlo na Solução de Problemas de Transferência de Carlo por Radiação em Cavidades Contendo Meio Participante”**, RETERM, in press.

Maurente A., Vielmo H. A. e França F. H. R., 2007, **“A Monte Carlo Implementation to Solve Radiation Heat Transfer in Non-homogeneous Media with Spectrally Dependent Properties”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, in press, doi:10.1016/j.jqsrt.2007.04.002

Maurente A., Vielmo H. A., e França F. H. R., **“Comparison of The Monte Carlo Method Applied to The Absorption-Line-Blackbody Distribution Function with a Conventional WSGG model”**, IMECE, International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 2006, Chicago, IL, United States of America.

Maurente A., Vielmo H. A., e França F. H. R., **“Analysis of The Chemical Species Concentrations on The Radiative Heat Transfer in Participating Gases Using a Monte Carlo Methodology”**, Encit, Brazilian Congress of Thermal Engineering and Science, 2006, Curitiba, PR, Brasil

Maurente A., Vielmo H. A., e França F. H. R., **“An Analysis of The Effect of Chemical Species concentrations of Participating Gases in The Radiation Heat Transfer in Cylindrical Combustion Chamber Using The Monte Carlo-ALB Distribution Function Method”**, Submetido para COBEM, IMECE, International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 2006, Chicago, IL, United States of America.

Modest, M. F., 1991, **“The weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer”**, Journal of Heat Transfer, 113: 650-656.

Modest, M. F., 1992, **“The Monte Carlo method applied to gases with spectral line structure. Numerical Heat Transfer”**, Numerical Heat Transfer, 22: 273-284.

Modest, 1993, **“Radiative Heat Transfer”**, McGraw-Hill, Inc., New York.

Modest, 2003, **“Radiative Heat Transfer”**, New York, Academic Press;

Modest M. F. e Singh V., 2005, **“Engineering correlations for full spectrum k -distribution of H₂O from the HITEMP spectroscopic databank”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 93: 263-271.

Modest, M. F. e Zhang, H., 2002, **“The full-spectrum correlated- K distribution for thermal radiation for molecular gas-particulate mixtures”**, Journal of Heat Transfer, 124: 30-38.

Saido, K. e Giedt, W. H., 1977, **“Spectral Absorption of Water Vapor and Carbon Dioxide Mixtures in the 2.7 Micron Band”**, Journal of Heat Transfer, 99: 53 -59.

Siegel, R. e Howell, J. R., 2002, **“Thermal Radiation Heat Transfer”**, New York: Taylor & Francis.

Silva, 2005, **“Simulação Numérica de Processos de Combustão”**, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil.

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

Skocypec, R. D. and Bulckius, R. O., 1984, **“Total Hemispherical Emittances for CO₂ or H₂O Including Particulate Scattering”**, Int. Journal of Heat and Mass Transfer, 27: 1 - 13.

Snegirev, A. Y., 2004, **“Statistical modeling of thermal radiation transfer in bouyant turbulent diffusion flames”** Combustion and Flame, 136: 51-71.

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

Solovjov V. P. e Webb B.W., 2000, **“SLW modeling of radiative transfer in multicomponent gas mixtures”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer; 65: 655-672.

Solovjov V. P. e Webb B.W., 2002, **“A local-spectrum correlated model for radiative transfer in non-uniform gas media”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 73: 361-373.

Solovjov V. P. e Webb B.W., 2005, **“The cumulative wavenumber method for modeling radiative transfer in transfer in gas mixtures with soot”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 93: 273-287.

Tessé, L., Dupoirieux, F., Zamuner, B., e Taine, J., 2002, **“Radiative transfer in real gases using reciprocal and forward Monte Carlo methods and a correlated-k approach”**, Int. J. Heat Mass Transfer, 45: 2797-2814.

Tessé, L., Dupoirieux, e Taine, J., 2004, **“Monte Carlo modeling of radiative transfer in a turbulent soot flame”**, Int. J. Heat Mass Transfer, 47: 555-572.

Wang A. e Modest M. F.,2005, **“High-accuracy compact database of narrow-band K-distributions for water vapor and carbon dioxide”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 93: 245-261.

Wang L., Yang, J. Modest, M. F. e Howorth, D. C., 2007, **“Application of the full-spectrum k-distribution method to photon Monte Carlo solvers”**, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 104: 297-304.

APÊNDICE A

Método de Monte Carlo

Neste apêndice são apresentados três exemplos. Os conceitos fundamentais de *função frequência*, *função densidade de probabilidade* e *função distribuição cumulativa* são explicados através dos dois exemplos iniciais. No primeiro (obtido de Siegel e Howell, 2002) a aplicação do método não é específica à radiação térmica. No segundo, os conceitos fundamentais são explicados para um problema específico de emissão de energia por uma superfície com temperatura não uniforme.

Num terceiro exemplo (obtido de Siegel e Howell, 2002), é demonstrado como pode ser desenvolvido um algoritmo em Monte Carlo para a solução de um problema de trocas radiantes

Exemplo A1

Um arqueiro atira flechas em um alvo circular. O alvo tem um raio (R) de 10m e é dividido em cinco regiões numeradas de 1 a 5, conforme a figura abaixo.

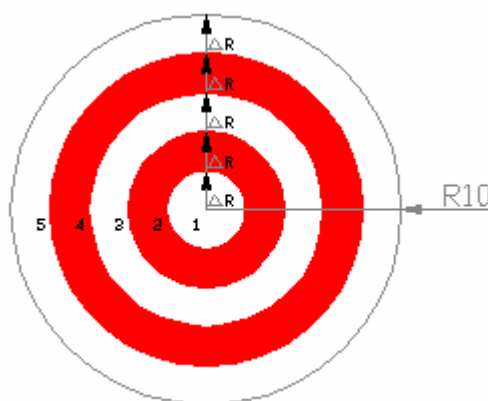


Figura A1 Alvo do arqueiro

Após o arqueiro atirar 165 flechas, é verificado que 1 flecha atinge a região 1; 9 flechas atingem a região 2; 25, a 3; 49, a 4 e 81, a 5. O histograma do número de flechas que atinge cada região do alvo pode ser visto na Figura A2.

Se $F(r)$ é o número de flechas que atingiu o alvo a uma distância $r \pm \Delta r/2$ do centro da região do alvo, a *função frequência* é

$$f(r) = \frac{F(r)}{\Delta r} \quad (\text{A1})$$

Para tornar a função frequência contínua, ela será aproximada pela função analítica $f(r) = r^2$, no intervalo $0 \leq r \leq 10$ e $f(r) = 0$ em qualquer outro intervalo, pois, no exemplo, todas as flechas atingiram o alvo.

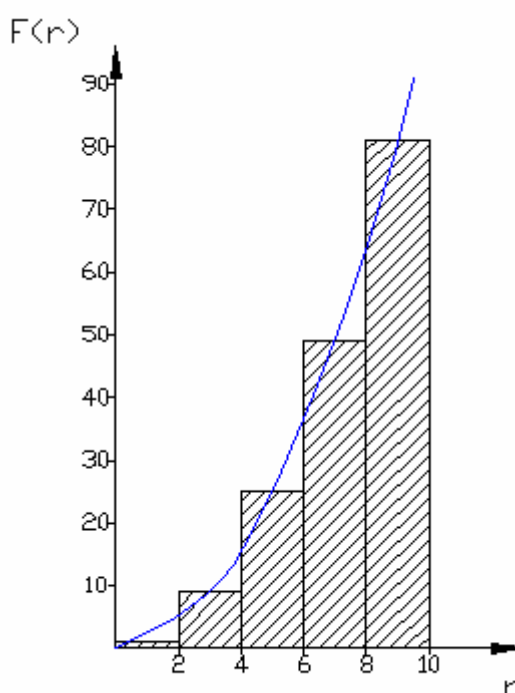


Figura A2 Histograma da distribuição de flechas em cada região do alvo.

A função densidade de probabilidade é

$$P(r) = \frac{f(r^*)}{\int_0^{\infty} f(r^*) dr^*} \quad (\text{A2})$$

Então, no exemplo,

$$P(r^*) = \frac{r^2}{\int_0^{10} r^{*2} dr^*} = \frac{3 \cdot r^2}{1000} \quad (\text{A3})$$

Integrando-se a função densidade de probabilidade conforme a equação que segue,

$$R(r) = \int_{-\infty}^r P(r^*) dr^*, \quad (\text{A4})$$

é obtida a *função de distribuição cumulativa*, $R(r)$, que representa a probabilidade de um evento ocorrer no intervalo de $-\infty$ até r .

Efetuando-se a integração para a função distribuição de probabilidade do exemplo, obtém-se

$$R(r) = \frac{r^3}{1000} \quad (\text{A5})$$

agora, escrevendo-se r em função de R , obtém-se

$$r(R) = (1000 \cdot R)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A6})$$

A seguir, divide-se r em um número de incrementos iguais Δr e escolhe-se M valores para R em um intervalo de 0 a 1. O espaçamento entre cada um dos M valores é constante, ao longo do intervalo. Haverá, então, M valores de r que corresponderão a M valores de R . A fração dos valores de M que se encontra num intervalo ΔR , dividida por Δr é

$$\frac{M_{\Delta r} / M}{\Delta r} = \frac{\Delta R}{\Delta r} \quad (\text{A7})$$

A quantidade $\Delta R / \Delta r$ se aproxima de dR/dr quando um grande número de valores é usado para M . Mas, por comparação entre as Equações A.3 e A.6, dR/dr pode ser visto como, simplesmente, $P(r)$. Assim, obtendo-se os valores de r através dos valores M , a função distribuição de probabilidades é gerada.

As relações estabelecidas acima podem ser utilizadas para simular problemas. Para um melhor entendimento, será simulado o lançamento de flechas pelo arqueiro do exemplo anterior. Para simular o lançamento de uma flecha, escolhe-se randomicamente um valor para R . O valor de R é substituído na Equação A.6, então, é encontrado um valor correspondente para r , que representa a posição onde o alvo é atingido pela flecha. O procedimento pode ser repetido várias vezes e o número total de flechas que atinge cada região do alvo pode ser contabilizado. Abaixo estão apresentados resultados de simulações feitas com 165 valores de R (o mesmo número de

flechas que o arqueiro do exemplo lançou) e com 165.000 (1000 vezes o número de flechas que o arqueiro do exemplo lançou). Para fins de comparação, os resultados foram rescritos, na tabela abaixo, em termos do número percentual de flechas que atinge cada uma das cinco regiões do alvo.

Tabela A1 Resultados do exemplo e simulações 1 e 2.

Região do alvo	Resultados do exemplo 2.1	Resultados da simulação 1 (165 flechas)	Resultados da simulação 2 (165.000 flechas)
1	0,606%	1,212%	0,812%
2	5,454%	4,454%	5,162%
3	15,151%	15,757%	15,185%
4	29,697%	34,545%	29,194%
5	49,090%	44,242%	49,843%

Observando-se os resultados das simulações, pode-se notar que quando o número de “flechas simuladas” é aumentado, a distribuição percentual de flechas em cada região se aproxima da distribuição do exemplo (aqui tomado como caso real, pois através dos resultados do exemplo foi gerada a função distribuição de probabilidade).

Exemplo A.2

A superfície S_1 mostrada na Figura 3.1, abaixo, é negra e apresenta a seguinte distribuição de temperaturas em Kelvin:

$$T(x) = Cx \quad (\text{A8})$$

onde x está em metros, C é uma constante em unidades de K/m . Como mostrado na figura, a placa possui comprimento L e largura W .

A partir da lei de Stefan-Boltzmann obtém-se que o poder emissivo, E_b , apresenta a seguinte distribuição, na superfície, ao longo da direção x :

$$E_b = \sigma(Cx)^4 \quad (\text{A9})$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann, igual a $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$.

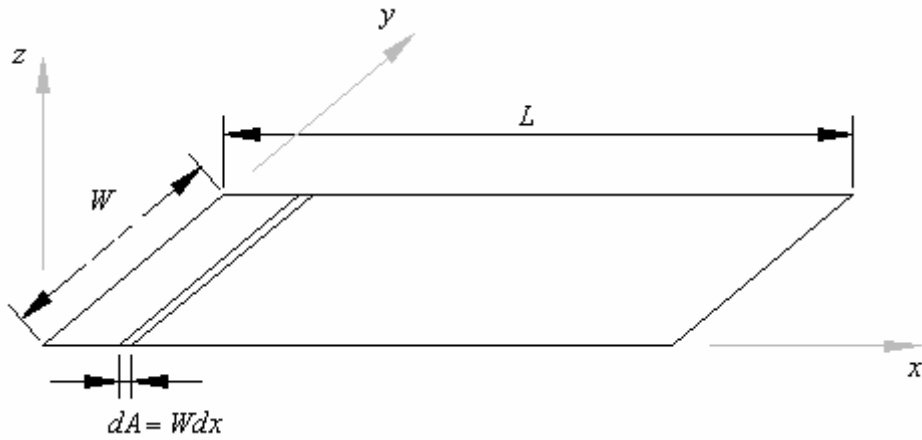


Figura. A3 Superfície do Exemplo A2

Multiplicando-se a Equação 3.2 por dA , obtém-se a taxa de energia emitida pelo elemento de superfície na posição x :

$$dq(x) = dA \sigma (Cx)^4 = W \sigma (Cx)^4 dx \quad (\text{A10})$$

Supondo-se que a superfície da Figura A3 estivesse a uma temperatura uniforme T_2 , a taxa de energia emitida por essa superfície seria

$$q_2 = dA \sigma T_2^4 = WL \sigma T_2^4 \quad (\text{A11})$$

Se a superfície emitir N_2 pacotes de energia por segundo, cada pacote transporta a seguinte quantidade de energia:

$$w = \frac{q_2}{N_2} = \frac{WL \sigma T_2^4}{N_2} \quad (\text{A12})$$

Como a temperatura da superfície não é uniforme, a taxa de energia emitida num intervalo de $x = x_1$ até $x = x_2$ é obtido integrando-se a Equação A10, no intervalo considerado:

$$q_{1 \rightarrow 2} = \int_{x_1}^{x_2} W \sigma(Cx)^4 dx \quad (\text{A13})$$

Assumindo que todos os pacotes de energia emitidos por S_1 , com temperatura não uniforme, transportam a mesma quantidade de energia, dividindo a energia w obtida com a Equação A12, o número de pacotes emitidos (ou frequência de emissão de pacotes) em quaisquer regiões da superfície, delimitadas por valores arbitrários de x_1 e x_2 , pode ser obtido através da seguinte relação:

$$F(x_1 \rightarrow x_2) = \frac{q_{1 \rightarrow 2}}{w} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{W \sigma(Cx)^4}{w} dx \quad (\text{A14})$$

A quantidade $W\sigma(Cx)^4 dx/w$ que aparece na Equação A14 é denominada *função frequência*:

$$f(x) = \frac{WL\sigma(Cx)^4}{w}, \quad (\text{A15})$$

pois como demonstrado, efetuando uma integração sobre a mesma, obtém-se a frequência de ocorrência de um determinado evento (no caso, emissão de pacotes de energia) dentro do intervalo de integração considerado.

Cabe salientar que a função frequência é característica do problema. A função frequência obtida através da Equação A15 é válida apenas para o Exemplo A2.

A *função densidade de probabilidades* é obtida a partir da função frequência através da seguinte equação:

$$P(x) = \frac{f(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} f(x^*) dx^*} \quad (\text{A16})$$

Para o caso do exemplo, a função densidade de probabilidade é

$$P(x) = \frac{x^4}{\int_{-\infty}^{\infty} x^4 dx} = \frac{x^4}{\int_0^L x^4 dx} = \frac{5x^4}{L^5} \quad (\text{A17})$$

A função distribuição cumulativa é

$$R(x) = \int_{-\infty}^x P(x^*) dx^* \quad (\text{A18})$$

Essa função representa a probabilidade de um evento (no caso do exemplo, a emissão de um pacote de energia) ocorrer no intervalo entre $-\infty$ e x .

Para o caso do exemplo, a função distribuição cumulativa é

$$R(x) = \frac{1}{L^5} \int_{-\infty}^x 5x^4 dx = \frac{1}{L^5} \int_0^x 5x^4 dx = \frac{x^5}{L^5} \quad (\text{A19})$$

Escrevendo-se x em função de R , obtém-se

$$x(R) = R^{\frac{1}{5}} L \quad (\text{A20})$$

A seguir, divide-se um intervalo x em um número de incrementos iguais Δx e escolhe-se M valores para R em um intervalo de 0 a 1. O espaçamento entre cada um dos M valores é constante, ao longo do intervalo. Haverá, então, M valores de x que corresponderão a M valores de R . A fração dos valores de M que se encontra num intervalo ΔR , dividida por Δx é

$$\frac{M_{\Delta x} / M}{\Delta x} = \frac{\Delta R}{\Delta x} \quad (\text{A21})$$

A quantidade $\Delta R / \Delta x$ se aproxima de dR/dx quando um grande número de valores é utilizado para M . Mas, por comparação entre as Equações A17 e A20, dR/dx pode ser visto como, simplesmente, $P(x)$. Assim, obtendo-se os valores de x através dos valores M , a função distribuição de probabilidades é gerada.

As relações estabelecidas acima podem ser usadas para simular a emissão de pacotes de energia. Para tanto, é necessária a geração de números randômicos.

Números randômicos são números escolhidos ao acaso em um intervalo entre 0 e 1. No método de Monte Carlo, são relacionados à função distribuição de probabilidade e é, justamente, nessa relação que o método está fundamentado.

Quando se trabalha com o método de Monte Carlo, é requerida uma grande quantidade de números randômicos. Desse modo, é necessário que muitos números sejam gerados de maneira aleatória. Computadores geram números pseudo randômicos, que podem não ser satisfatoriamente aleatórios para algumas aplicações. Entretanto, na grande maioria dos casos, os números gerados são suficientemente randômicos.

Para simular o lançamento de um pacote de energia é possível determinar randomicamente a posição, os ângulos de lançamento, o comprimento de onda e outras características do pacote. Entretanto, nesse exemplo, serão determinadas apenas coordenadas x de lançamento. Para tanto, é determinado, randomicamente, um valor para R . O valor de R é substituído na Equação A20, então, é encontrado um valor correspondente para x , que representa a coordenada x do lançamento do pacote.

Se a superfície S_1 for dividida, por exemplo, em dez partes iguais ao longo da direção x , o percentual exato da taxa de energia emitida em cada uma dessas regiões pode ser obtido utilizando-se a equação A13. O mesmo cálculo pode ser executado através da técnica numérica de Monte Carlo. Para tanto, é necessário simular o lançamento de pacotes, utilizando a equação A20, e determinar a taxa de energia emitida em cada região contabilizando os pacotes emitidos.

Na Tabela A2 aparecem resultados obtidos através do método de Monte Carlo. Dois casos foram considerados. No primeiro foram lançados 1.000 pacotes e no segundo, 200.000. Para comparação aparecem também resultados exatos obtidos através da equação A13.

Quanto maior o número de pacotes lançados na simulação, mais a distribuição de emissão de energia ao longo das dez regiões da superfície aproxima-se do resultado obtido com Equação A13. Observando a Tabela A2, nota-se que na simulação em que foram lançados mais pacotes o resultado da distribuição da emissão de pacotes ao longo da direção x está mais próximo do resultado exato. Se pudesse ser simulado o lançamento de infinitos pacotes de energia, o resultado obtido através do método de Monte Carlo seria o mesmo obtido através da Equação A13.

Exemplo A3

Para demonstrar a aplicação do método de Monte Carlo na solução de problemas de transferência radiante, será visto agora um exemplo obtido de [Siegel e Howell, 2002]

Na figura abaixo, o elemento infinitesimal de área dA_1 está à temperatura T_1 e possui emissividade espectral direcional $\varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1, T_1)$. O plano infinito A_2 está na temperatura $T_2 = 0$ e possui emissividade espectral direcional $\varepsilon_{\lambda,2}(\lambda, \theta_2, T_2)$. Será mostrado como o método de Monte

Carlo pode ser aplicado para se determinar a quantidade de energia irradiada por dA_1 que é absorvida pelo plano infinito.

Tabela A2 Distribuição de emissão pacotes de energia ao longo das regiões da superfície S_1 obtidos através da equação 3.6 e através de simulações em Monte Carlo.

Região da superfície	Percentual de pacotes emitidos		
	Equação 3.6	Simulação com 1.000 pacotes.	Simulação com 200.000 pacotes.
1 ($0 \leq x \leq 10$)	0,001%	0	0,001%
2 ($10 \leq x \leq 20$)	0,31%	0	0,0315%
3 ($20 \leq x \leq 30$)	0,211%	0,10%	0,2095%
4 ($30 \leq x \leq 40$)	0,781%	0,80%	0,7845%
5 ($40 \leq x \leq 50$)	2,101%	2,60%	2,1555%
6 ($50 \leq x \leq 60$)	4,651%	4,80%	4,6070%
7 ($60 \leq x \leq 70$)	9,031%	8,30%	9,1060%
8 ($70 \leq x \leq 80$)	15,961%	14,90%	15,9285%
9 ($80 \leq x \leq 90$)	26,281%	25,10%	25,9420%
10 ($90 \leq x \leq 100$)	40,951%	43,40%	41,2345%

A quantidade de energia que dA_1 emite por unidade de tempo é

$$dq_1 = \varepsilon_1(T_1)\sigma T_1^4 dA_1 \quad (\text{A22})$$

onde ε_1 é a emissividade total hemisférica.

Se for assumido que a taxa dq_1 é composta por N pacotes de energia por segundo, a energia de cada pacote é

$$w = \frac{dq_1}{N} \quad (\text{A23})$$

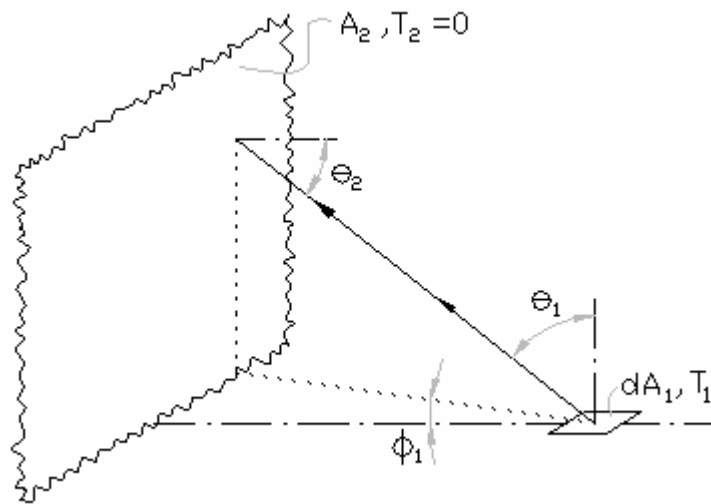


Figura A4 Configuração geométrica para o exemplo A3 [Siegel e Howell, 2002].

Para determinar a energia absorvida por A_2 é necessário contabilizar todos os pacotes emitidos por dA_1 e absorvidos por A_2 . Devido ao fato da área dA_1 ser infinitesimal, não é necessário considerar a probabilidade de um pacote refletir em A_2 e voltar para dA_1 , permanecendo no sistema. Assim, a energia transferida de dA_1 para A_2 por unidade de tempo é

$$dq_{1 \rightarrow \text{absorvida por } 2} = wS_2 = \frac{\varepsilon_1(T_1) \sigma T_1^4 dA_1}{N} S_2 \quad (\text{A24})$$

Agora será visto como se determina o caminho e o comprimento de onda de cada pacote.

A energia emitida por dA_1 por unidade de tempo no intervalo de comprimento de onda $d\lambda$ no entorno de λ e no intervalo de ângulo sólido $d\omega_1$ no entorno de ω_1 é

$$dq_{\lambda,1}(\lambda, \omega_1) = \varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1, T_1) I_{\lambda,b,1}(\lambda, T_1) \cos(\theta_1) dA_1 d\omega_1 d\lambda \quad (\text{A25})$$

onde $d\omega_1 = \sin(\theta_1) d\theta_1 d\phi_1$.

Integrando-se a Equação A25 em relação a ϕ , desde 0 até 2π , obtém-se a energia emitida por dA_1 por unidade de tempo no intervalo de comprimento de onda $d\lambda$ no entorno de λ e no intervalo de ângulo $d\theta_1$ no entorno de θ_1 :

$$dq_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1) = 2\pi \varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1, T_1) I_{\lambda,b,1}(\lambda, T_1) \cos(\theta_1) dA_1 \sin(\theta_1) d\theta_1 d\lambda \quad (\text{A26})$$

Então, a probabilidade de emissão no intervalo de comprimento de onda $d\lambda$ no entorno de λ e no intervalo de ângulo $d\theta_1$ no entorno de θ_1 é

$$P(\lambda, \theta_1) d\theta_1 d\lambda = \frac{2\pi \varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1, T_1) I_{\lambda,b,1}(\lambda, T_1) \cos(\theta_1) \sin(\theta_1) d\theta_1 d\lambda}{\varepsilon_1(T_1) \sigma T_1^4} \quad (\text{A27})$$

Será assumido, por simplicidade, que a emissividade espectral direcional é uma função produto das variáveis ângulo e comprimento de onda, isto é,

$$\varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1, T_1) = \Phi_1(\lambda, T_1) \Phi_2(\theta_1, T_1) \quad (\text{A28})$$

Observe-se que a hipótese não é válida para muitas superfícies reais, pois, em geral, a distribuição angular da emissividade depende do comprimento de onda. Entretanto, para o exemplo A3, no qual a hipótese é válida, a probabilidade de emissão no intervalo de comprimento de onda $d\lambda$ no entorno de λ pode ser calculada como segue:

$$P(\lambda) d\lambda = d\lambda \int_0^{\pi/2} P(\lambda, \theta_1) d\theta_1 = \frac{2\pi \cdot d\lambda \int_0^{\pi/2} \varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1, T_1) I_{\lambda,b,1}(\lambda, T_1) \cos(\theta_1) dA_1 \sin(\theta_1) d\theta_1}{\varepsilon_1(T_1) \sigma T_1^4} \quad (\text{A29})$$

A função distribuição cumulativa é

$$R_\lambda = \frac{2\pi \int_0^{\lambda \rightarrow \infty} \int_0^{\pi/2} \varepsilon_{\lambda,1}(\lambda^*, \theta_1, T_1) I_{\lambda,b,1}(\lambda^*, T_1) \cos(\theta_1) dA_1 \sin(\theta_1) d\theta_1 d\lambda^*}{\varepsilon_1(T_1) \sigma T_1^4} \quad (\text{A30})$$

Executando-se a integração na Equação A30 (muitas vezes são requeridos procedimentos numéricos para a integração), são encontrados valores para λ a partir de números randômicos.

Através de um procedimento similar para a variável ângulo, obtém-se

$$R_{\theta_1} = \int_0^{\theta_1} \int_0^{\infty} P(\lambda, \theta_1^*) d\theta_1^* = \frac{2\pi \int_0^{\theta_1} \int_0^{\infty} \varepsilon_{\lambda,1}(\lambda, \theta_1^*, T_1) I_{\lambda b,1}(\lambda, T_1) \cos(\theta_1^*) dA_1 \sin(\theta_1^*) d\theta_1^* d\lambda^*}{\varepsilon_1(T_1) \sigma T_1^4} \quad (\text{A31})$$

Se dA_1 for uma superfície difusa e cinza, a equação de R_{λ} se reduz a

$$R_{\lambda, \text{difusora cinzenta}} = \frac{\pi \int_0^{\lambda} I_{\lambda b,1}(\lambda, T_1) d\lambda^*}{\sigma T_1^4} = F_{0-\lambda} \quad (\text{A32})$$

onde $F_{0-\lambda}$ é a fração da emissão de corpo negro num intervalo de 0 a λ .

A equação de R_{θ} , para o caso de dA_1 ser difusa e cinza, se reduz a

$$R_{\theta, \text{difusora cinzenta}} = 2 \int_0^{\theta_1} \cos(\theta_1^*) \sin(\theta_1^*) d\theta_1^* = \sin^2(\theta_1) \quad (\text{A33})$$

Através da Equação A33, é possível determinar o ângulo θ_1 de emissão, para definir o caminho do pacote, resta apenas o ângulo ϕ_1 . É fácil intuir que, como a emissividade não depende de ϕ_1 , esse ângulo pode ser determinado por

$$\phi_1 = 2\pi R_{\phi_1} \quad (\text{A34})$$

onde R_{ϕ_1} é um número randômico.

Como a posição do plano A_2 em relação à dA_1 é conhecida, pode-se determinar se um dado pacote que partiu de dA_1 na direção (θ_1, ϕ_1) atinge A_2 . Ele atingirá A_2 sempre que $\cos(\theta_1) \geq 0$. Se o pacote de energia não atingir A_2 , um outro pacote deve sair de dA_1 . Se o pacote atingir A_2 , deve ser determinado se ele é absorvido ou refletido.

O ângulo de incidência θ_2 pode ser encontrado a partir da seguinte relação:

$$\cos(\theta_2) = \sin(\theta_1) \cos(\phi_1) \quad (\text{A35})$$

A partir da lei de Kirchhoff, encontra-se a absortividade espectral direcional de A_2 como

$$\alpha_{\lambda,2}(\lambda, \theta_2) = \varepsilon_{\lambda,2}(\lambda, \theta_2) \quad (\text{A36})$$

A probabilidade de absorção é simplesmente a absorvividade avaliada para θ_2 e ϕ_2 , ou seja, $\alpha_{\lambda,2}(\theta_2, \phi_2)$ para os ângulos especificados. A função da absorvividade é, $\alpha_{\lambda,2}(\theta_2, \phi_2)$, que é a função distribuição de probabilidade. Sendo assim, pode-se determinar se um dado pacote de energia é absorvido através da utilização de um número randômico $R_{\alpha,2}$. Se

$$R_{\alpha,2} \leq \alpha_{\lambda,2}(\lambda, \theta_2) \quad (\text{A37})$$

o pacote é absorvido. Um contador S_2 na memória do computador deve contabilizar essa absorção. Caso contrário, o pacote é refletido e não é contabilizado. O procedimento deve ser repetido para os N pacotes da amostra. Após o término, a energia absorvida por A_2 pode ser calculada através da Equação A24.

O equacionamento está agora completo. Na Figura A5 pode ser visto um diagrama que auxilia na elaboração de um algoritmo que pode ser implementado através de códigos computacionais.

Observando-se o problema, é possível notar que ele poderia ser facilmente resolvido através dos métodos padrões de integração; entretanto, em uma extensão posterior do problema que o tornasse apenas ligeiramente mais difícil, o mesmo não poderia ser resolvido através do modo padrão. Por exemplo, se fosse introduzido uma terceira superfície finita com propriedades direcionais.

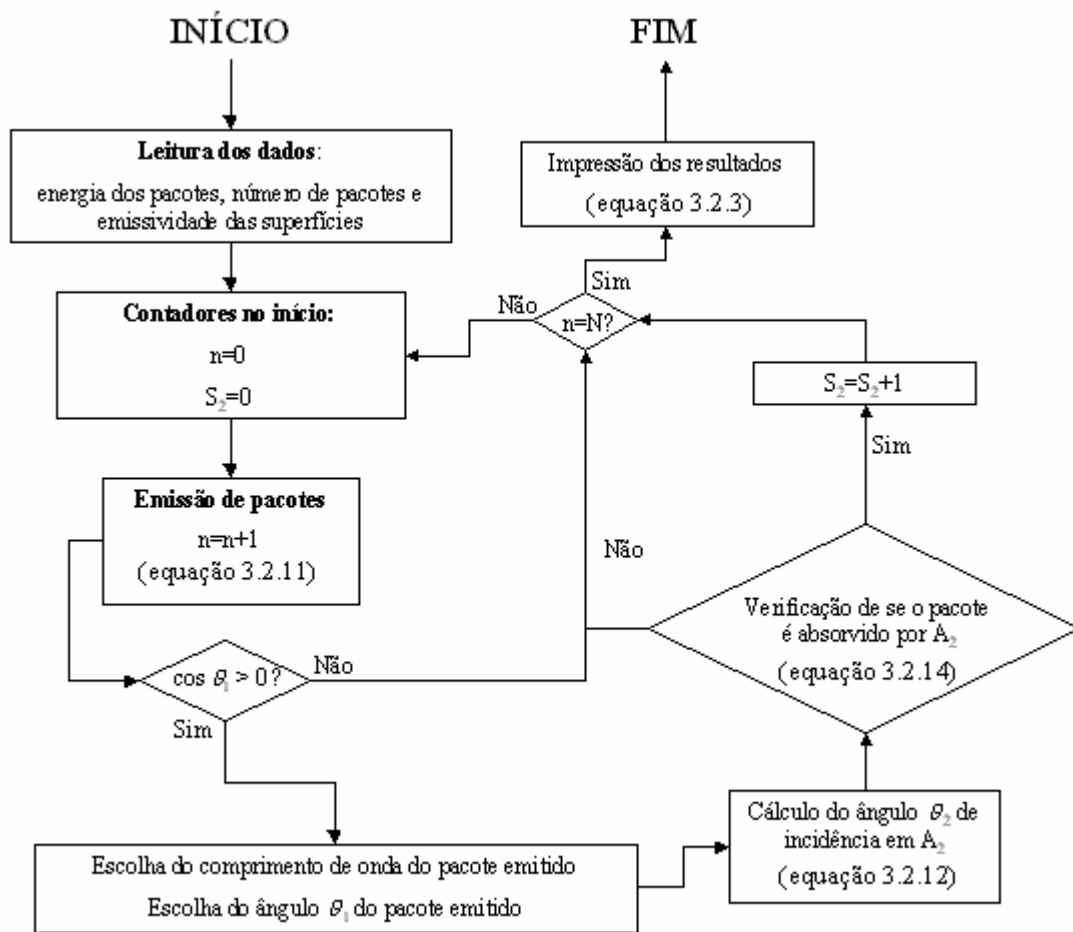


Figura A5 Fluxograma para a resolução do problema do exemplo 3.2 [Siegel e Howell, 2002].

APÊNDICE B

Correlações para a obtenção da função distribuição de energia de corpo negro nas linhas de absorção (função distribuição ALB)

Visto que a função distribuição ALB varia de maneira bastante regular, é possível aproxima-la através de correlações matemáticas simples. Baseados nesse fato, Denison e Webb, 1993b, 1995b, apresentaram correlações matemáticas apropriadas para implementação em códigos computacionais, para a determinação da função distribuição ALB para os casos de meios constituídos por vapor d'água e ar e dióxido de carbono e ar. Tais correlações foram obtidas para um intervalo entre 400 e 2500 K e, portanto, não é recomendável que sejam utilizadas para casos em que ocorrem temperaturas fora deste intervalo, especialmente acima de 2500 K, devido a ocorrência das chamadas linhas “quentes”.

B 1. Caso em que o meio é constituído por vapor d'água e ar

Para o caso do meio ser um gás constituído por vapor d'água e ar, a função distribuição ALB pode ser obtida através da relação que segue:

$$F_{H_2O} = \frac{1}{2} \tanh[P(T_g, T_b, \xi)] + \frac{1}{2} \quad (\text{B1a})$$

onde T_g é a temperatura do gás e T_b é a temperatura de corpo negro. P e ξ são obtidos através das relações abaixo:

$$P = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^3 a_{lmn} \left(\frac{T_g}{2500} \right)^n \cdot \left(\frac{T_b}{2500} \right)^m \cdot \xi^l \quad (\text{B1b})$$

$$\xi = \ln(K_m) \quad (\text{B1c})$$

onde K_m é o coeficiente de absorção molar. As temperaturas devem ser em Kelvin e o coeficiente de absorção molar em [m²/mol].

Na Tabela B1 são apresentados os coeficientes a_{lmn} , que aparecem na Correlação 3b. Esses coeficientes foram determinados considerando-se 20 valores para o coeficiente de extinção

molar, K_m , logarithmicamente espaçados num intervalo entre $3 \cdot 10^{-5}$ e $60 \text{ m}^2/\text{mol}$ e para as seguintes temperaturas, T_g e T_b : 400, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000, 2250 e 2500 K.

Tabela B.1 Coeficiente a_{lmn} que aparece na relação B1b.

$l = 0$

m/n	0	1	2	3
0	1,6103	-4,0931	5,1435	-2,0857
1	-0,81812	15,5525	-21,819	9,8775
2	2,6001	-21,204	31,0828	-14,279
3	-1,3171	9,6524	-14,474	6,6747

$l = 1$

m/n	0	1	2	3
0	0,440187	-0,63348	0,871627	-0,38798
1	-0,82164	5,0239	-5,9818	2,6355
2	1,5149	-7,8032	9,8642	-4,1931
3	-0,81023	3,727	-4,874	1,9868

$l = 2$

m/n	0	1	2	3
0	0,106647	-0,43116	0,689598	-0,29831
1	-0,38573	1,8865	-2,9712	1,2834
2	0,578351	-2,6218	4,2698	-1,7929
3	-0,28014	1,1785	-0,28014	0,787249

$l = 3$

m/n	0	1	2	3
0	$8,25027 \cdot 10^{-3}$	$-3,28556 \cdot 10^{-2}$	$6,81563 \cdot 10^{-2}$	$-3,04815 \cdot 10^{-2}$
1	$-3,10578 \cdot 10^{-2}$	0,123369	-0,26154	0,117452
2	$4,39319 \cdot 10^{-2}$	-0,15792	0,350948	-0,15308
3	$-2,03699 \cdot 10^{-2}$	$6,61142 \cdot 10^{-2}$	-0,15283	$6,34035 \cdot 10^{-2}$

As Relações B1 são válidas apenas para pressão de uma atmosfera e considerando que apenas o ar é responsável pelo alargamento das linhas espectrais, ou seja, considera-se que o

alargamento de linha provocado na molécula H₂O é o mesmo que ocorreria se a fração de vapor d'água tendesse a zero.

Quando é necessário considerar o alargamento de linha próprio, ou seja, o alargamento de linha nas linhas de emissão e absorção de uma molécula de H₂O causada pela colisão com outra molécula H₂O, pode-se substituir ξ , na Equação 3b, por $\xi - \xi_{sb}$. Dessa forma, a correlação para a função distribuição ALB se torna

$$F_{H_2O} = \frac{1}{2} \tanh\left[P(T_g, T_b, \xi - \xi_{sb})\right] + \frac{1}{2} \quad (\text{B2a})$$

O ξ_{sb} é fornecido pela equação abaixo.

$$P = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^2 b_{lmn} \left(\frac{T_b}{2500}\right)^n \cdot \xi^m \cdot (Y_{H_2O})^{l+1} \quad (\text{B2b})$$

onde, novamente, as temperaturas devem ser em Kelvin e os coeficientes b_{lmn} , que são apresentados na Tabela B.2, foram obtidos para os mesmos valores de pressão (1 atm), temperaturas e coeficientes de extinção molares considerados para a obtenção das Correlações 3 e para as seguintes concentrações de vapor d'água: 0; 0,05; 0,1; 0,2; 0,3; 0,45; 0,6; 0,8 e 1.

Tabela B.2 Coeficiente b_{lmn} que aparece na relação B2b.

$l = 0$

m/n	0	1	2	m/n
0	4,72	-8,5482	5,2394	0
1	-0,84969	0,312478	-0,13804	1
2	$-3,47243 \cdot 10^{-2}$	$4,02461 \cdot 10^{-2}$	$-5,80104 \cdot 10^{-2}$	2
3	$5,79830 \cdot 10^{-4}$	$3,94125 \cdot 10^{-3}$	$-5,29017 \cdot 10^{-3}$	3

$l = 1$

m/n	0	1	2	m/n
0	-8,9615	16,9547	-10,76	0
1	1,5861	-2,0166	1,46	1
2	$4,34730 \cdot 10^{-2}$	-0,67133	0,633231	2
3	$2,87067 \cdot 10^{-3}$	$-7,06830 \cdot 10^{-2}$	$6,23710 \cdot 10^{-2}$	3

$l = 2$

m/n	0	1	2	m/n
0	9,1461	-17,327	11,1864	0
1	-1,3975	1,9965	-1,6935	1
2	$8,46419 \cdot 10^{-2}$	0,599994	-0,70054	2
3	$7,14719 \cdot 10^{-3}$	$6,62086 \cdot 10^{-2}$	$-6,87294 \cdot 10^{-2}$	3

$l = 3$

m/n	0	1	2	m/n
0	-3,5504	6,624	-4,3058	0
1	0,485392	-0,7071	0,689109	1
2	$-6,77456 \cdot 10^{-2}$	-0,18179	0,269308	2
3	$-5,92726 \cdot 10^{-3}$	$-2,04694 \cdot 10^{-2}$	$2,56411 \cdot 10^{-2}$	3

B 2. Caso em que o meio é constituído por dióxido de carbono e ar

Diferentemente do que ocorre para a molécula H_2O , o alargamento próprio da molécula CO_2 não é significativo, de forma que, a função distribuição ALB do dióxido de carbono é independente de sua concentração. Assim, as correlações apropriadas para a obtenção da função distribuição ALB para o dióxido de carbono são similares às apresentadas para o vapor d'água quando considerado que a concentração de H_2O tende a zero. De fato, as Correlações B1a e B1c podem ser utilizada, também, para o dióxido de carbono. A Relação B2b, por outro lado, deve ser substituída por

$$P = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=0}^3 \sum_{n=0}^3 d_{lmn} \left(\frac{T_g}{2500} \right)^n \cdot \left(\frac{T_b}{2500} \right)^m \cdot \xi^l \quad (B3)$$

A única diferença é que na Relação B3 o coeficiente a_{lmn} , utilizado na Equação B1b, é substituído por d_{lmn} . Esse último coeficiente, que aparece na Tabela B3, foi determinado atribuindo-se 20 valores logaritmicamente espaçados em um intervalo de $3 \cdot 10^{-5}$ a $600 \text{ m}^2/\text{mol}$ e para as mesmas temperaturas de corpo negro e de gás consideradas anteriormente: 400, 500, 750, 1000, 1250, 1500, 1750, 2000, 2250 e 2500 K.

Tabela B3 Coeficiente d_{lm} que aparece na relação B3. $l = 0$

m/n	0	1	2	3
0	2,45702	-5,45334	6,53751	-2,52344
1	-4,0232	15,67297	-24,3247	11,33757
2	7,54549	-23,8023	39,51896	-19,1137
3	-3,63104	11,9078	-20,3606	9,97877

 $l = 1$

m/n	0	1	2	3
0	$7,65678 \cdot 10^{-2}$	2,36184	-3,95061	2,17482
1	0,2901819	-12,0041	22,44342	-13,0467
2	-0,64282	21,5003	-40,8667	23,66762
3	0,3942158	-11,5818	22,05176	-12,6536

 $l = 2$

m/n	0	1	2	3
0	$-3,30582 \cdot 10^{-2}$	0,4367742	-0,725331	0,4138566
1	0,3672993	-3,52466	6,74885	-3,96295
2	-0,69811	6,60703	-12,9667	7,58713
3	0,3831158	-3,65683	7,19415	-4,16496

 $l = 3$

m/n	0	1	2	3
0	$-1,87927 \cdot 10^{-2}$	$1,92123 \cdot 10^{-2}$	$-3,25863 \cdot 10^{-2}$	$1,98493 \cdot 10^{-2}$
1	$2,85033 \cdot 10^{-2}$	-0,223537	0,4402715	-0,26267
2	$-5,49594 \cdot 10^{-2}$	0,4370937	-0,881494	0,521958
3	$3,04198 \cdot 10^{-2}$	-0,247793	0,4990777	-0,291566

APÊNDICE C

Correlações para as distribuições de temperatura e concentração em uma cavidade semelhante a uma câmara de combustão típica

Neste apêndice são apresentadas correlações que permitem gerar distribuições de temperatura e concentração das espécies participantes em uma cavidade cilíndrica semelhante a câmaras de combustão. Os perfis de temperatura e concentração são baseados nos apresentados por Silva, 2005, e Silva et al., 2007, que são típicos do ambiente de câmaras de combustão.

Todas as correlações apresentadas neste apêndice foram obtidas para uma cavidade discretizada em trinta (30) partes iguais na direção axial e dez (10) partes iguais na direção radial. Constituindo, assim, 300 zonas de volume de meio; 10 zonas de superfície na parede plana, na lateral esquerda; 10 zonas de superfície na parede plana, na lateral direita, e 30 zonas de superfície, na superfície cilíndrica.

C1 Correlações para a distribuição de temperatura ($600 \text{ K} \leq T < 1800 \text{ K}$)

As correlações apresentadas no apêndice C1 fornecem a distribuição de temperatura para qualquer câmara de combustão cujas dimensões são proporcionais à da câmara mostrada na Figura 5.12, do Capítulo 5, seção 5.2.2. O campo de temperaturas tem um perfil semelhante ao obtido por Silva, 2005. Entretanto, foram feitos alguns ajustes para que todas as temperaturas fiquem dentro dos limites recomendáveis para a utilização das correlações de Smith et al., 1982, ou seja, $600 \text{ K} \leq T \leq 2400 \text{ K}$. Nesse ajuste, a menor temperatura foi elevada a 600 K e a maior, aproximadamente 1800 K, foi mantida inalterada. As demais temperaturas foram ajustadas de maneira proporcional dentro desses limites.

A temperatura pode ser obtida em função das posições radial e axial adimensionais através da Equação C1:

$$T(z_D, r_D) = 540 \sum_{j=1}^3 P_j \cdot r_D^{(3-j)} + 144 \quad (\text{C1})$$

onde $r_D = r/D$ e $z_D = z/D$, sendo que r, z e D são, respectivamente, a posição radial, a posição axial e o diâmetro da câmara de combustão. Os coeficientes P_j são calculados através da equação

2 e os coeficientes C_j são fornecidos pela Tabela C1.

$$P_i(z_D) = \sum_{j=1}^5 C_j \cdot z^{(5-j)} \quad (C2)$$

Tabela C1 Coeficientes para a distribuição de temperatura em uma câmara de combustão cilíndrica típica

	P₁	P₂	P₃
C₁	-2.05391153365379	1.44683117744404	-0.25735215475871
C₂	14.22539903612502	-9.52802365644797	1.53956420437030
C₃	-28.25584515773313	17.58536039820567	-2.50457064160085
C₄	15.64153403181849	-8.77182490949101	1.41921701061742
C₅	-10.47144934308275	7.18320934586378	0.60961706014361

C2 Correlações para a distribuição de temperatura ($400 \text{ K} \leq T < 1800 \text{ K}$)

As correlações apresentadas no apêndice C2 fornecem a distribuição de temperatura para qualquer câmara de combustão cujas dimensões são as mostradas na Figura C1. O campo de temperaturas bastante semelhante ao obtido por Silva, 2005. Assim, as temperaturas variam de pouco mais de 330 K a quase 1800 K, de maneira que, algumas estão abaixo de 600 K, limite inferior do intervalo para o qual é recomendável a utilização das correlações de Smith et al., 1982,

A temperatura pode ser obtida em função das posições radial e axial através da Equação C3:

$$T(z, r) = \sum_{i=1}^9 P_i \cdot r^{(9-i)} \quad (C.3)$$

Os termos P_i são relacionados à distância axial, z , através da seguinte equação:

$$P_i(z) = \sum_{j=1}^{16} C_j \cdot z^{(16-j)} \quad (C4)$$

Os coeficientes C_j para cada P_i são apresentados na Table C.2

Tabela C2 Coeficientes para a distribuição de temperatura em uma câmara de combustão cilíndrica típica

	$P_1 \times 10^{-17}$	$P_2 \times 10^{-17}$	$P_3 \times 10^{-17}$	$P_4 \times 10^{-16}$	$P_5 \times 10^{-15}$
C₁	-0.00361842277530	+0.00370990798325	-0.00154550529880	+0.00334683530569	-0.00399064828601
C₂	+0.04823727653507	-0.04933123267190	+0.02049690328902	-0.04426675938932	+0.05263627593716
C₃	-0.29058244675589	+0.29640483911023	-0.12282182441619	+0.26450506710791	-0.31358341066326
C₄	+1.04581065281855	-1.06394133260306	+0.43962851479173	-0.94393630989868	+1.11549613628588
C₅	-2.50521853546481	+2.54167858799902	-1.04714879064911	+2.24118425128212	-2.63926562374651
C₆	+4.21244217508347	-4.26157639139514	+1.75027542732780	-3.73323657391654	+4.37948699754874
C₇	-5.11028174791180	+5.15446167740605	-2.11000937569379	+4.48389703340528	-5.23789697658834
C₈	+4.52837733037807	-4.55320607634763	+1.85734095982242	-3.93121096992640	+4.57096480067028
C₉	-2.93599775532053	+2.94240800694965	-1.19580641715155	+2.52018147575845	-2.91548183985247
C₁₀	+1.38260164243369	-1.38094113691994	+0.55905277275659	-1.17290227528450	+1.34954509953578
C₁₁	-0.46508772328019	+0.46298294948443	-0.18671198357075	+0.38994911029673	-0.44620299028245
C₁₂	+0.10856451323317	-0.10775133700065	+0.04330407231835	-0.09006833452526	+0.10253627050616
C₁₃	-0.01671690139919	+0.01655549788970	-0.00663690868493	+0.01376301036476	-0.01560882370676
C₁₄	+0.00153541241235	-0.00151848501591	+0.00060790540733	-0.00125872378998	+0.00142472109793
C₁₅	-0.00006591379897	+0.00006489947079	-0.00002586897871	+0.00005332756676	-0.00006004923905
C₁₆	+0.00000002452998	+0.00000003338451	-0.00000004088978	+0.00000015272445	-0.00000026413283

	$P_6 \times 10^{-14}$	$P_7 \times 10^{-12}$	$P_8 \times 10^{-11}$	$P_9 \times 10^{-9}$
C₁	-0.00361842277530	+0.00370990798325	-0.00154550529880	+0.00334683530569
C₂	+0.04823727653507	-0.04933123267190	+0.02049690328902	-0.04426675938932
C₃	-0.29058244675589	+0.29640483911023	-0.12282182441619	+0.26450506710791
C₄	+1.04581065281855	-1.06394133260306	+0.43962851479173	-0.94393630989868
C₅	-2.50521853546481	+2.54167858799902	-1.04714879064911	+2.24118425128212
C₆	+4.21244217508347	-4.26157639139514	+1.75027542732780	-3.73323657391654
C₇	-5.11028174791180	+5.15446167740605	-2.11000937569379	+4.48389703340528
C₈	+4.52837733037807	-4.55320607634763	+1.85734095982242	-3.93121096992640
C₉	-2.93599775532053	+2.94240800694965	-1.19580641715155	+2.52018147575845
C₁₀	+1.38260164243369	-1.38094113691994	+0.55905277275659	-1.17290227528450
C₁₁	-0.46508772328019	+0.46298294948443	-0.18671198357075	+0.38994911029673
C₁₂	+0.10856451323317	-0.10775133700065	+0.04330407231835	-0.09006833452526
C₁₃	-0.01671690139919	+0.01655549788970	-0.00663690868493	+0.01376301036476
C₁₄	+0.00153541241235	-0.00151848501591	+0.00060790540733	-0.00125872378998
C₁₅	-0.00006591379897	+0.00006489947079	-0.00002586897871	+0.00005332756676
C₁₆	+0.00000002452998	+0.00000003338451	-0.00000004088978	+0.00000015272445

C3 Correlações para a distribuição de concentração de vapor de água e dióxido de carbono

As correlações apresentadas no apêndice C 3 fornecem as distribuições de vapor d'água e dióxido de carbono de forma aproximada para os casos de combustão estequiométrica de metano e etano em uma câmara de combustão cujas dimensões são mostradas na Figura C1. A distribuição de concentração considerada para a obtenção das correlações foi baseada no perfil da distribuição de concentração do dióxido de carbono obtida por Silva et al., 2005, para a combustão do metano.

Tanto para a combustão do etano quanto para a do metano a concentração aproximada de dióxido de carbono pode ser obtida através das Equações C5

$$Y_{CO_2}(z, r) = \sum_{i=1}^4 P_i \cdot z^{(4-i)} \quad (C5)$$

onde os coeficientes P_i são calculados através da equação C6 e os coeficientes C_j são fornecidos pela Tabela C3.

$$P_i(z_D) = \sum_{j=1}^3 C_j \cdot r^{(3-j)} \quad (C6)$$

Tabela C3 Coeficientes para a distribuição de dióxido de carbono em uma câmara de combustão cilíndrica típica.

	P₁	P₂	P₃	P₄
C₁	-2.96	6.77	-1.73	-2.73
C₂	1.13	-2.61	0.772	.887
C₃	-0.14	0.34	-0.12	0.018

Para o caso de combustão de etano, a concentração do vapor de água é igual à concentração do dióxido de carbono. Para o caso de combustão de metano, a concentração do vapor de água é igual ao dobro da concentração do dióxido de carbono e pode ser obtida pela equação C7

$$Y_{CO_2}(z, r) = 2Y_{CO_2}(z, r) \quad (C7)$$