

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

DESENVOLVIMENTO DE UMA NOVA METODOLOGIA DE CÁLCULO DE EMITÂNCIA
DE GASES DE COMBUSTÃO UTILIZANDO DADOS ESPECTRAIS

por

Pedro Wink Guaragna

Monografia apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Engenheiro Mecânico.

Porto Alegre, dezembro de 2019

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO

CIP - Catalogação na Publicação

Guaragna, Pedro Wink
DESENVOLVIMENTO DE UMA NOVA METODOLOGIA DE CÁLCULO
DE EMITÂNCIA DE GASES DE COMBUSTÃO UTILIZANDO DADOS
ESPECTRAIS / Pedro Wink Guaragna. -- 2019.
15 f.
Orientador: Francis Henrique Ramos França.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) --
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de
Engenharia, Curso de Engenharia Mecânica, Porto
Alegre, BR-RS, 2019.

1. Radiação. 2. Combustão. 3. Fortran. 4.
HITEMP-2010. I. França, Francis Henrique Ramos,
orient. II. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UFRGS com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Pedro Wink Guaragna

DESENVOLVIMENTO DE UMA NOVA METODOLOGIA DE CÁLCULO DE EMITÂNCIA
DE GASES DE COMBUSTÃO UTILIZANDO DADOS ESPECTRAIS

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
ENGENHEIRO MECÂNICO
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof. Mario Roland Sobczyk Sobrinho
Coordenador do Curso de Engenharia Mecânica

Área de concentração: Energia e Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Francis Henrique Ramos França

Comissão de Avaliação:

Prof^a. Thamy Cristina Hayashi

Prof. Paulo Smith Schneider

Porto Alegre, dezembro de 2019

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a meus familiares, especialmente minha mãe Rosângela e meu pai Guilherme que me deram uma fantástica formação, carinho e todas as ferramentas para crescer como individual completo e realizado pessoal e profissionalmente.

Gostaria de agradecer aos meus amigos Rafael e Carolina que me acompanharam na longa trajetória estudantil no colégio e com quem junto aprendi que amigos são a família que escolhemos.

Gostaria de agradecer ao professor Francis por seu papel fundamental na minha formação de engenheiro, desde sua presença marcante na disciplina introdutória quanto na orientação que me passou na Iniciação Científica e neste trabalho.

Gostaria de agradecer a Natália, minha companheira, que esteve do meu lado durante todas as noites mal dormidas estudando junto comigo e me incentivando a manter o foco.

Gostaria de agradecer aos meus colegas da “barra 13/1” que por mais que os semestres e trajetos da vida tentem nos separar, permanecemos tão unidos quanto no dia do trote.

Gostaria de agradecer à instituição CEMEC e seus membros que me inflaram novamente a paixão por este curso e esta universidade.

Gostaria de agradecer aos membros do Laboratório de Radiação Térmica (LRT), especialmente ao Alexandre, Guilherme, Roberta e Felipe que sempre foram muito solícitos e prestativos quando necessitei de auxílio para realizar este trabalho.

Por fim, não menos importante, agradecer a UFRGS por ser uma universidade federal, gratuita e de qualidade que imbui aos seus alunos desenvolverem não apenas as competências profissionais, mas também o comprometimento social e ético para com a sociedade.

Os grandes braseiros brotam das pequenas faíscas.

Armand Richelieu

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA - CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO – 2019

DESENVOLVIMENTO DE UMA NOVA METODOLOGIA DE CÁLCULO DE
EMITÂNCIA DE GASES DE COMBUSTÃO UTILIZANDO DADOS
ESPECTRAIS

Guaragna, Pedro Wink
pedroguags95@gmail.com

Resumo. Gases de combustão emitem e absorvem radiação em uma ampla faixa de temperaturas, porém não de forma contínua em relação ao comprimento de onda. As principais referências na literatura contêm tabelas de emitância para dióxido de carbono, vapor d'água e suas misturas que foram produzidas através de medições experimentais há mais de 50 anos. Utilizando dados espectrais atualizados do HITEMP-2010 e os inserindo numa rotina de cálculo em linguagem Fortran, este trabalho atualiza as tabelas disponíveis na literatura. Os valores calculados de emitância diferem em até 10% para dióxido de carbono e 25% para vapor d'água quando comparados por aqueles propostos por Hottel em 1954 e foi possível perceber que a simplificação proposta por Hottel de uma variável comprimento-pressão não fornecem uma boa estimativa para valores de pressão parcial menor que 0,2 atm. Neste trabalho é apresentado uma nova metodologia que obtém valores aceitáveis de erro para uma grande faixa de comprimentos característicos e pressões parciais típicas de produtos de combustão.

Palavras-chave: Radiação, Combustão, Fortran, HITEMP-2010

Abstract. Combustion gases emit and absorb radiation in a wide range of temperatures; however, they do not do so continuously regarding the wavelength. The main references in literature contain charts for the emittance of carbon dioxide, water vapor and their mixtures that were produced more than fifty years ago. Using new spectral data from HITEMP-2010 and inserting them in a code in Fortran language, this work refreshes the charts available in literature. The values calculated of emittance differ in up to 10% for carbon dioxide and 25% for water vapor while compared to those presented by Hottel in 1954. It was possible to realize that the simplification proposed by Hottel of a variable "pressurelength" does not provide a good approximation for values of partial pressure lower than 0,2 atm. In this work a new methodology is presented, with which one can manage to attain acceptable error levels while in a wide range of lengths and partial pressures typical of combustion products.

Keywords: Radiation, Combustion, Fortran, HITEMP-2010

1. INTRODUÇÃO

A radiação térmica em gases produtos da combustão é um tema de destaque dentro do campo da engenharia térmica, porém de grande complexidade. Para calcular as trocas radiativas em um forno repleto com produtos da combustão (chamas), por exemplo, é essencial o conhecimento das propriedades radiativas dos gases. A radiação de meio participante também afeta a transferência de energia por gases quentes dentro da câmara de um motor a combustão, na manufatura de vidro, em cerâmicas translúcidas a altas temperaturas e na transferência de calor em materiais porosos.

A dificuldade encontra-se no fato da radiação em gases não ser distribuída continuamente em relação ao comprimento de onda, mas, sim, em intervalos específicos, chamados bandas. Além disso, este não é um fenômeno de superfície, mas, em realidade, um fenômeno volumétrico.

Buscando simplificar, aplicações de engenharia, em geral, adotam valores de emitância e absorvância de gases espectralmente ponderados e tratam os gases radiantes como gás cinza. Segundo Incropera *et al.* (2007), um método que simplifica os efeitos espectral e direcional de uma troca radiante entre um gás e uma superfície foi desenvolvido por Hottel (1954, *apud* Incropera *et al.*, 2007). O procedimento consiste na determinação da emissão de radiação por uma massa gasosa hemisférica através da correlação de dados disponíveis para a temperatura, pressões parcial e total do gás e raio da semiesfera e, então, estendendo os resultados para outras geometrias através de uma correlação de comprimento característico.

Desta forma, Hottel conseguiu desenvolver gráficos que apresentam diversas curvas de emitância em função da temperatura, para uma pressão total de 1 atm e para diferentes valores do produto entre a pressão parcial do gás radiante e o raio da semiesfera. Esses resultados foram obtidos para o vapor d'água e o dióxido de carbono, cada um em uma mistura com gases não-radiantes. Em sequência, também foram estendidos os resultados para mistura de ambos e outros gases não-radiantes e fatores de correção de pressão para valores aquém da pressão atmosférica foram elaborados.

O trabalho realizado por Hottel certamente foi pioneiro e até hoje diversos livro-textos e manuais de transferência de calor contam com essas tabelas como referência para cálculos de projeto. Entretanto, desde a concepção daquele trabalho até os dias atuais foram feitas diversas atualizações referentes a banco de dados espectrais dos gases em questão, principalmente por Rothman *et al.* (2010).

Os bancos de dados apresentados por Rothman são o HITRAN, gerado a temperatura referência de 296 K para aplicações atmosféricas, e o HITEMP, que foi gerado para aplicações a altas temperaturas e inclui gases de combustão como o H_2O , CO_2 , CO e OH . Como aponta Dorigon *et al.* (2013), o HITEMP-2010, versão mais atual, teve importantes atualizações, expandindo o número de linhas de transições e o espectro coberto, além da possibilidade de aplicação para temperaturas até 4000 K.

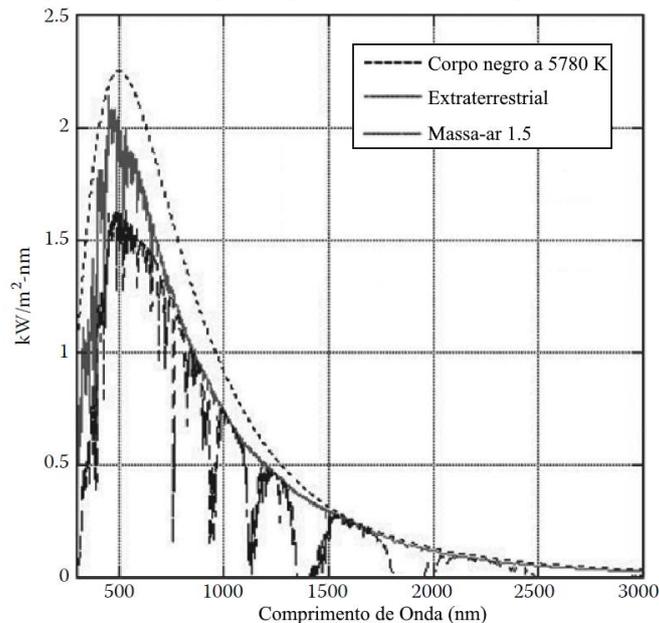
Além do trabalho realizado por Hottel, outros pesquisadores buscaram novos resultados no campo da radiação de meio participante. Alberti *et al.* (2016) obtiveram gráficos atualizados para o H_2O e o CO_2 utilizando os dados espectrais do HITEMP-2010, expandindo para pressões até 40 atm. Porém, Alberti introduziu maiores graus de complexidade ao cálculo de emitância, trazendo maiores dificuldades a um não especialista no assunto utilizar as tabelas para cálculo de projetos.

Assim sendo, o presente trabalho recriou os gráficos propostos por Hottel utilizando os dados espectrais disponíveis pelo banco de dados HITEMP-2010 para alcançar maior acurácia dos resultados. Também questionou a eficácia da simplificação proposta por Hottel da variável “comprimento-pressão”, que é a multiplicação do comprimento referência do forno pela pressão parcial do gás analisado, para valores de pressão parcial típicos de produtos de combustão, e, tendo-se confirmado as limitações, foi proposta uma nova metodologia de cálculo da emitância para o vapor d'água e dióxido de carbono que mantivesse um bom compromisso entre a certeza do valor calculado e a facilidade de uso da metodologia para que um não especialista em radiação de gases de combustão ainda possa realizar estimativas para projetos.

2. FUNDAMENTAÇÃO

O estudo da radiação de gases tem sido um tópico de interesse nos últimos 100 anos. Um dos fenômenos estudados no início era a absorção e espalhamento da radiação na atmosfera da Terra. Segundo Howell *et al.* (2016), o espectro solar recebido pela Terra foi inicialmente registrado por Samuel Langley (1883) e a Figura 1 apresenta os resultados mais recentes.

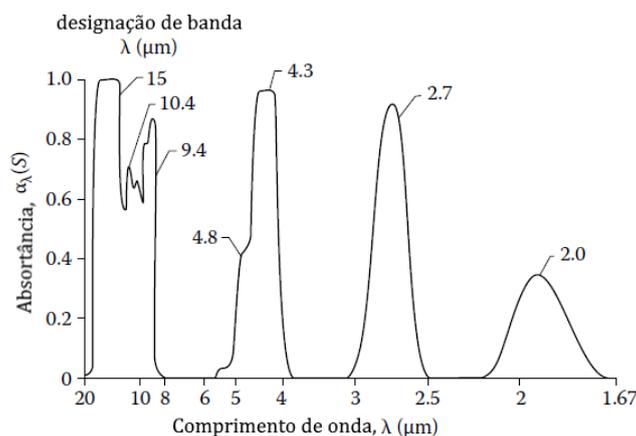
Figura 1 – Atenuação do fluxo de energia solar espectral incidente pela atmosfera da Terra e sua comparação com o espectro do corpo negro a 5780K. Adaptado de Howell *et al.* (2016).



É possível notar que a curva referente à atmosfera apresenta declives em determinadas regiões do comprimento de onda, demonstrando a dependência das propriedades radiativas dos gases ao comprimento de onda, como aponta Howell *et al.* (2016)

Conforme explica Dorigon *et al.* (2013), na maioria das aplicações de engenharia, a radiação de gases participantes resulta da transição vibração-rotação dos modos de energia em nível atômico. Nessas condições, as colisões entre partículas são a principal causa do ampliamiento (ou espalhamento) de linhas espectrais. Esse espalhamento pode causar que linhas se sobreponham, formando, então, bandas de absorção. A Figura 2 expõe um exemplo de uma banda de absorção.

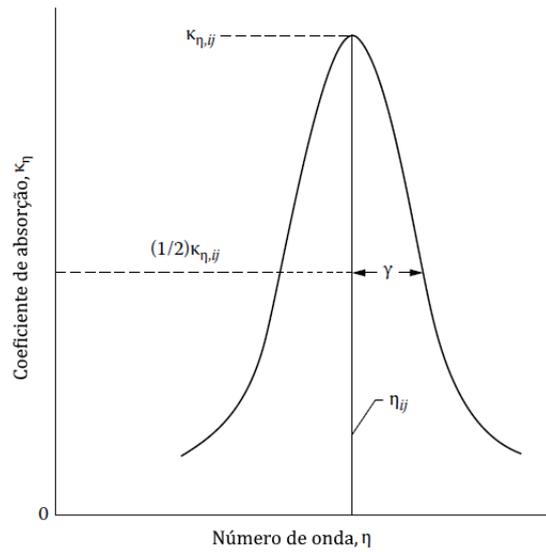
Figura 2 – espectro em baixa resolução das bandas de absorção do CO₂ a 830 K, 10 atm e para uma trajetória de 0.388 m. Adaptado de Howell *et al.* (2016).



2.1 Determinação do Coeficiente de Absorção-pressão

Segundo Howell *et al.* (2016), a variação do coeficiente de absorção com o mesmo número de onda dentro de uma linha ampliada é o formato da linha. O formato é importante, pois relaciona com o comportamento da absorção do gás com a temperatura, pressão e trajetória ao longo do gás. A Figura 3 apresenta um formato típico de uma linha.

Figura 3 – Coeficiente de absorção para uma linha espectral simetricamente espalhada para a transição de níveis de energia “*i*” e “*j*”. Adaptado de Howell *et al.* (2016).

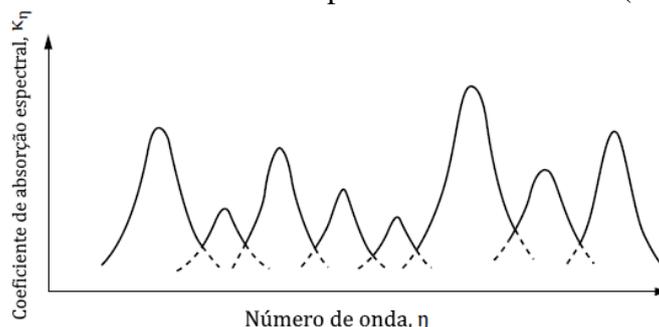


Onde os índices “*i*” e “*j*” são referentes a dois estados de energia de uma molécula. A área integrada abaixo da linha é a intensidade de linha. A variável γ é a meia-largura da linha, sendo importante para definir a linha em equacionamento dos mecanismos, pois determina o até quanto as linhas adjacentes influenciam numa transição espectral. Howell *et al.* (2016) também apresenta 4 mecanismos de alargamento das linhas espectrais, não cabendo ao enfoque deste trabalho explicá-los aqui.

O banco de dados do HITEMP-2010 contém os parâmetros necessários para determinação dos coeficientes de absorção-pressão $\kappa_{p\eta,a}$ de uma espécie *a* em questão correspondentes ao número de onda η (análogo ao comprimento de onda) e à pressão total do meio. Este provém fatores como número de onda no centro de uma linha, a meia largura da linha ampliada e a intensidade de linha de todas as principais linhas espectrais.

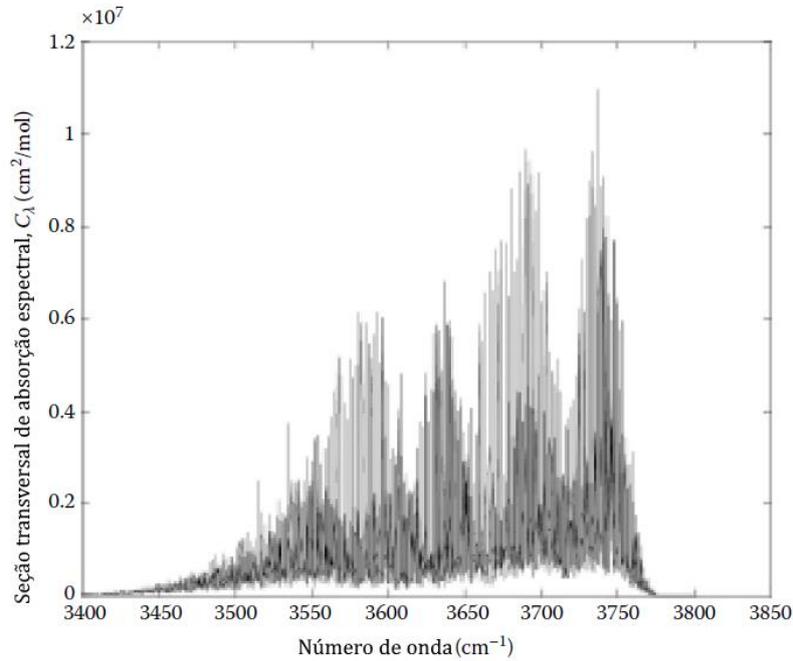
Desta forma, o comportamento do coeficiente de absorção em função do número de onda e sua subsequente intensidade de linha é representado, genericamente, através de um modelo estatístico conforme a Figura 4 representa.

Figura 4 – modelo estatístico representando as intensidades de linha em perfis de Lorentz para uma determinada molécula. Adaptado de Howell *et al.* (2016)



Para uma avaliação em todo espectro das intensidades de linha que influenciam um determinado comprimento de onda, a Figura 5 apresenta um exemplo.

Figura 5 – Exemplo de seção transversal da absorção espectral para linhas na banda de 2.7 μm de dióxido de carbono homogêneo com temperatura uniforme em 1000K e pressão de 1 atm. Adaptado de Howell *et al.* (2016).



2.2 Equacionamento da Emitância de um Meio Participante

Como explicado anteriormente, a absorção de radiação espectral em um gás é uma função do coeficiente de absorção, mas também, é da espessura S (ou trajetória, comprimento) do meio.

Se um feixe monocromático com intensidade $I_{\eta,0}$ incide no meio, a intensidade é reduzida devido à absorção. Considerando tal efeito numa camada infinitesimal de espessura dx , a redução é tal que:

$$dI_{\eta}(x) = -\kappa_{\eta} \cdot I_{\eta}(x)dx \quad (1)$$

Separando e integrando ao longo de toda a camada, e considerando κ_{η} como independente de x :

$$\int_{I_{\eta,0}}^{I_{\eta,S}} \frac{dI_{\eta}(x)}{I_{\eta}(x)} = -\kappa_{\eta} \int_0^S dx \quad (2)$$

Resolvendo esta integração, obtém-se que:

$$\frac{I_{\eta,S}}{I_{\eta,0}} = e^{-\kappa_{\eta} \cdot S} \quad (3)$$

Este decaimento exponencial é conhecido como Lei de Beer (Incropera *et al.*, 2007), sendo representativo da transmitância espectral do meio. É útil para inferir a absorptividade espectral de tal forma que:

$$\alpha_{\eta} = 1 - \tau_{\eta} = 1 - e^{-\kappa_{\eta} \cdot S} \quad (4)$$

Por fim, sendo a Lei de Kirchhoff válida, que *nenhuma superfície real pode ter um poder emissivo superior àquele de uma superfície negra à mesma temperatura* (Incropera *et al.*, 2007), então, em termos espectrais: $\alpha_\eta = \varepsilon_\eta$. Essa formulação encontra-se no livro-texto do Incropera *et al.* (2007). Importante notar que o coeficiente de absorção aqui formulado já incorpora o termo de pressão parcial.

Para melhor entendimento das variáveis que circundam o problema, apresenta-se a formulação apresenta por Alberti *et al.* (2016). A emitância espectral ($\varepsilon_{\eta,i}$) do gás absorvente numa mistura com outros gases “*r*”, considerando o meio isotérmico, a uma temperatura T , e homogêneo ao longo de uma trajetória S é descrita como:

$$\varepsilon_{\eta,i}(\eta, T, P_t, p_a, p_r, p_a \cdot S) = 1 - \exp(-\kappa_{p\eta,a} \cdot p_a \cdot S) \quad (5)$$

Como discute Alberti *et al.* (2016), a pressão parcial do gás é listada duas vezes como variável da emitância. Isso deve-se pois ela aparece no produto $p_a \cdot S$ que indica o número de partículas na trajetória da radiação e também aparece solitariamente já que o coeficiente de absorção-pressão depende dela. Este segundo remete as colisões entre partículas mencionados anteriormente.

É importante mencionar que a emitância do gás apresenta uma relação proporcional com ambas as variáveis pressão parcial e comprimento (espessura do meio). Lembra-se que em trajetórias tendendo ao infinito, um corpo emissivo comporta-se como um corpo negro (emissividade igual a 1), e esse comportamento é também repetido para gases. Aumentos na pressão parcial são também aumentos na fração molar do gás em questão, isso implica em um aumento na razão de gases emitantes em relação à gases inertes à radiação.

Hottel *et al.* (1954, *apud* Alberti *et al.* (2016)) propuseram então o conceito de uma “emitância padrão”, no qual a pressão do gás é posta como nula para simplificação. Isso implica em desconsiderar o efeito de auto-espalhamento, ou seja, colisão entre as mesmas partículas, e apenas considera o espalhamento devido colisões da espécie “*a*” com os outros gases “*r*”. Tendo essa consideração em mente e integrando em todo o espectro:

$$\varepsilon_a^0(T, p_r, p_a \cdot S) = \frac{\int_{\eta=0}^{\infty} I_{\eta b}(\eta, T) \cdot \varepsilon_{\eta,i}(\eta, T, P_t=1 \text{ atm}, p_a=0, p_r, p_a \cdot S) d\eta}{\sigma T^4 / \pi} \quad (6)$$

Então, aplicando a equação (5) na equação (6), resulta em:

$$\varepsilon_a^0(T, p_a \cdot S) = \frac{\int_{\eta=0}^{\infty} I_{\eta b}(\eta, T) [1 - \exp(-\kappa_{p\eta,a} p_a S)] d\eta}{\sigma T^4 / \pi} \quad (7)$$

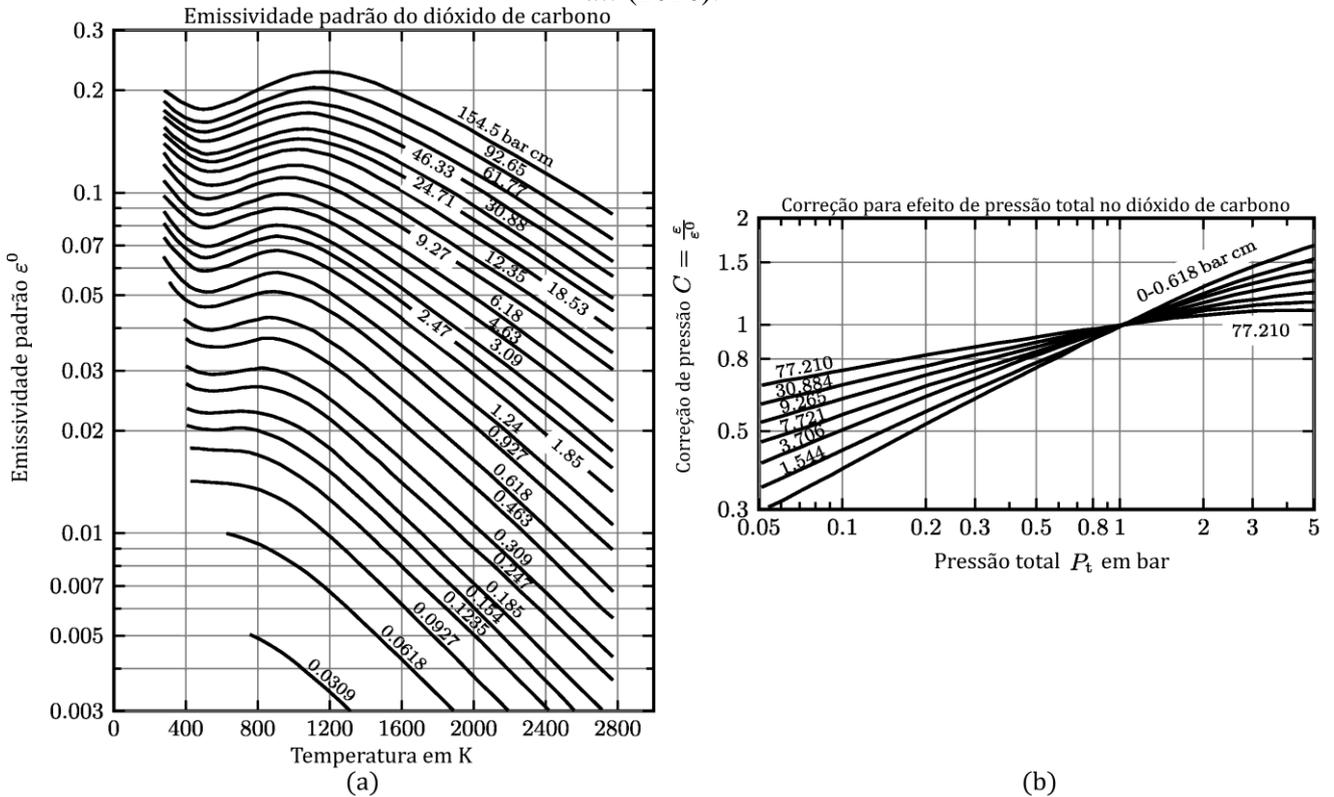
onde $p_a \cdot S$ é o comprimento-pressão, e $I_{\eta b}$ é a intensidade de radiação do corpo negro (dado pela distribuição de Planck).

2.3 A abordagem de Hottel

Segundo Alberti *et al.* (2016), os dados das primeiras tabelas por Hottel e seus colaboradores foram obtidos através de medições de emitâncias total de um gás radiante que consistia numa mistura de dióxido de carbono e ar numa pressão total de 1 atm dentro de um forno de aproximadamente 51 cm. A pressão parcial de CO_2 era variada de 0.002 até 1 atm e a temperatura de 297.6 K até 1318.8 K. Assim, as variações do produto $p_{CO_2} \cdot S$ eram exclusivamente por variações da pressão parcial do gás. Ao longo dos anos, a tabela foi expandida com novas medições, extrapolações e interpolações

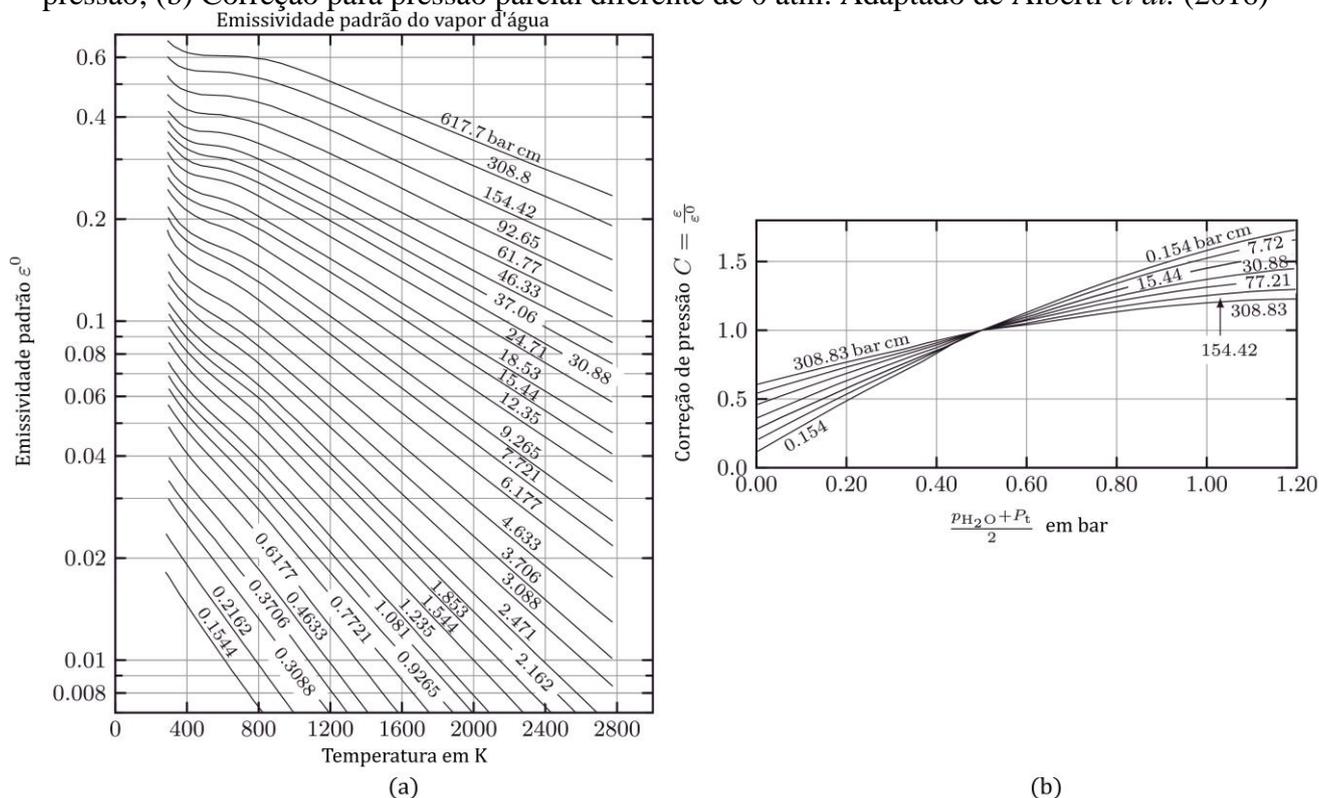
dos gráficos iniciais. A Figura 6(a) e a Figura 6(b) apresentam os resultados deles para o dióxido de carbono.

Figura 6 – (a) Emitância padrão do dióxido de carbono em função da temperatura e do comprimento-pressão; (b) Correção para pressões total diferente de 1 atm. Adaptado de Alberti *et al.* (2016).



No desenvolvimento dos dados para as tabelas de vapor d'água, Fig. 7(a), Hottel e seus colaboradores utilizaram um novo forno no qual o comprimento óptico poderia ser alterado. Neste caso, perceberam, como aponta Alberti *et al.* (2016), que a emitância total não dependia apenas da temperatura e do comprimento-pressão, mas também da pressão parcial p_{H_2O} . Assim, eles optaram por criar uma tabela auxiliar de correção em função dessa variável e do comprimento-pressão, Fig. 7(b). Vale notar que cada curva apresentada é a média de cinco curvas em temperaturas levemente diferentes.

Figura 7 – (a) Emitância padrão para o vapor d’água em função da temperatura e comprimento-pressão; (b) Correção para pressão parcial diferente de 0 atm. Adaptado de Alberti *et al.* (2016)



É importante ressaltar que Hottel apontou que nessa situação, a temperatura não teria tanta influência para a correção de pressão parcial. Desta forma, na descrição apresentada por Alberti *et al.* (2016), as curvas de correção de pressão apresentadas são ponderadas em 5 valores de temperaturas, porém não especificados quais.

Também é crucial informar que nem no capítulo escrito por Hottel no livro-texto do McAdams (Hottel *et al.* (1954)) e nem no texto de Alberti *et al.* (2016), que descreve sucintamente o experimento de Hottel, são informados os erros relativos às medições realizadas para desenvolver os gráficos apresentados aqui nas Figuras 6 e 7.

3. METODOLOGIA

Foi utilizado a linguagem Fortran para os cálculos de emitância. Uma das vantagens do Fortran nos cálculos de engenharia é a sua constância e universalidade ao longo do tempo, mantendo a mesma linguagem e arquivos de banco de dados íntegros desde sua criação. De tal forma, códigos escritos anos atrás permanecem totalmente funcionais nas últimas atualizações do programa.

A rotina de cálculo utilizada para determinar a emitância de um gás através da integração em todo o espectro pelo método *line-by-line* (LBL) foi desenvolvida pelo Laboratório de Radiação Térmica da UFRGS (LRT). Neste trabalho realizou alterações no código somente para alterar os valores de pressão parcial e comprimento calculados, sendo o enfoque deste trabalho a interpretação de valores de emitância e não o desenvolvimento de códigos para o cálculo de emitância.

A seguinte etapa foi a que requisitou maior tempo computacional, que foi o desenvolvimento de um banco de dados de emitância do vapor d’água e do dióxido de carbono. Com os recursos computacionais disponíveis (um processador Intel® Core™ i3-6100 CPU @ 3.70GHz e uma memória RAM instalada de 8,00 GB), demorava-se em torno de três dias para a geração das curvas de emitância para uma determinada pressão parcial, sendo possível operar até três códigos em paralelo. Desejava-se uma quantidade considerável de dados para comparar, então calculou-se curvas

para pressões parciais de 0,0125 atm até 0,1 atm variando em 0,0125 atm, de 0,1 atm até 0,25 atm variando em 0,025 atm, e de 0,3 atm até 1,0 atm variando em 0,1 atm. Desta forma, criou-se um total de 22 resultados de emitância para o vapor d'água, 22 para o dióxido de carbono e a possibilidade de diversas combinações entre ambos os gases.

Importante lembrar que, neste trabalho, todos os cálculos realizados são para uma pressão total de 1 atm. A fração molar de um gás “a” é descrita como:

$$x_a = p_a / p_t \quad (8)$$

Então, para todos casos apresentados, a fração molar se iguala em número à pressão parcial do gás. Isso implica que variações na pressão parcial são, inerentemente, alterações na fração molar do gás analisado. Não é o escopo deste trabalho, porém atenta-se que mudanças em frações molares pode originar de alterações nas condições de combustão (razão ar-combustível, combustão completa, combustível selecionado, *etc.*) e essas condições alteram em outros aspectos a transferência de calor (geração de fuligem, por exemplo), que é o produto final estimado em um projeto de forno.

Como é possível ter-se valores iguais de comprimento-pressão para pressões parciais diferentes, havendo uma compensação no comprimento, foi por esta razão que foi desenvolvido um banco de dados tão repleto. Assim, pôde-se comparar em situações extremas o comportamento da simplificação proposta por Hottel *et al.* (1954).

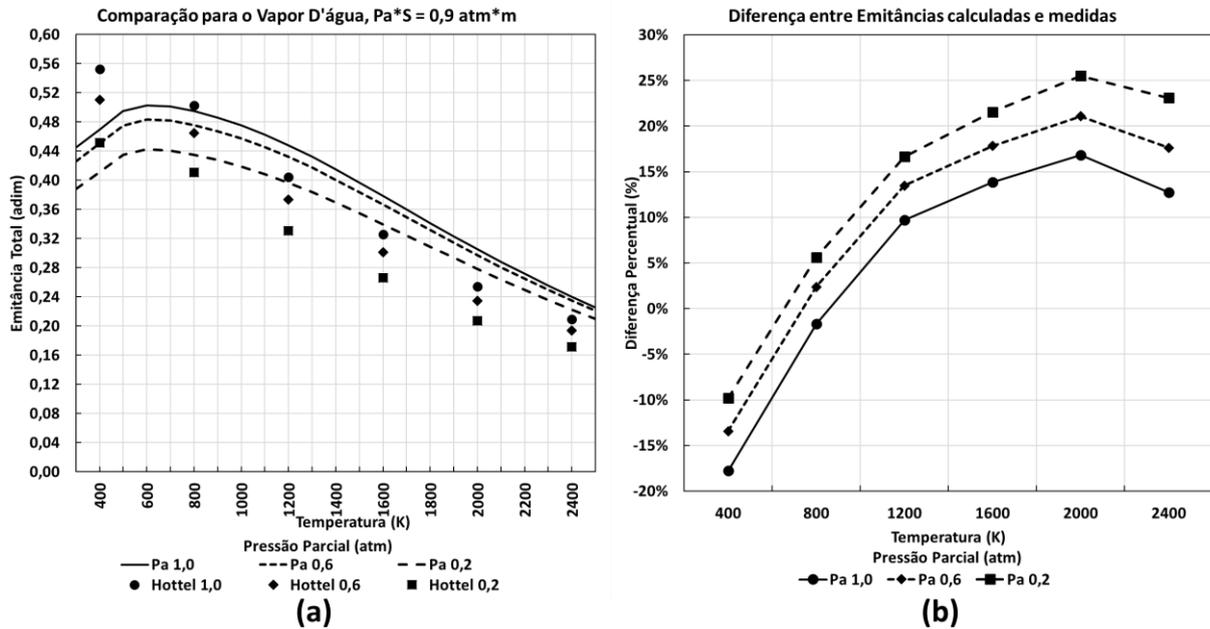
A rotina de cálculo é separada em duas etapas e requer três códigos para realizá-la. A primeira etapa, que é a mais demorada, gera os valores de coeficiente absorção-pressão para a determinada fração molar da espécie e para diferentes valores de temperatura e de número de onda. Optou-se por calcular estes coeficientes com a temperatura de 300 K até 2500 K variando em 100 K, pois uma discretização maior da temperatura iria resultar num maior tempo computacional. Notou-se que essa discretização da temperatura resultou num comportamento mais abrupto das curvas de emitância para baixas temperaturas, porém tal problema não aconteceu em temperaturas maiores, onde notou-se que as curvas apresentam um comportamento suave.

A segunda etapa de cálculo era resolvida em questão de segundos, e era responsável por calcular a equação (3) para cada temperatura estabelecida e para os valores de comprimento equivalente que fossem determinados e compilar os resultados num arquivo “.dat”. Desta forma, gerou-se valores de emitância para o comprimento-pressão variando de 0.001 atm*m até 10 atm*m.

3.1 Comparações com os resultados de Hottel

Tendo-se determinado os valores de emitância, comparou-se os resultados obtidos pelo método LBL com aqueles apresentados em Hottel *et al.* (1954, *apud* Alberti *et al.* (2016)) e notou-se que havia divergências entre os produzidos neste trabalho com os de Hottel. Também foi percebido que havia divergências entre as emitâncias calculadas neste trabalho para mesmos comprimento-pressão, mas pressão parcial e comprimento diferentes. Ou seja, em um comprimento-pressão de 0,9 atm*m, por exemplo, o resultado de emitância calculado com uma pressão parcial de 0,2 atm (e comprimento de 4,5 m) é diferente do resultado de emitância com uma pressão parcial de 1,0 atm (e comprimento de 0,9 m). A Figura 8(a) ilustra tais curvas para o vapor d'água enquanto a Figura 8(b) apresenta as diferenças percentuais.

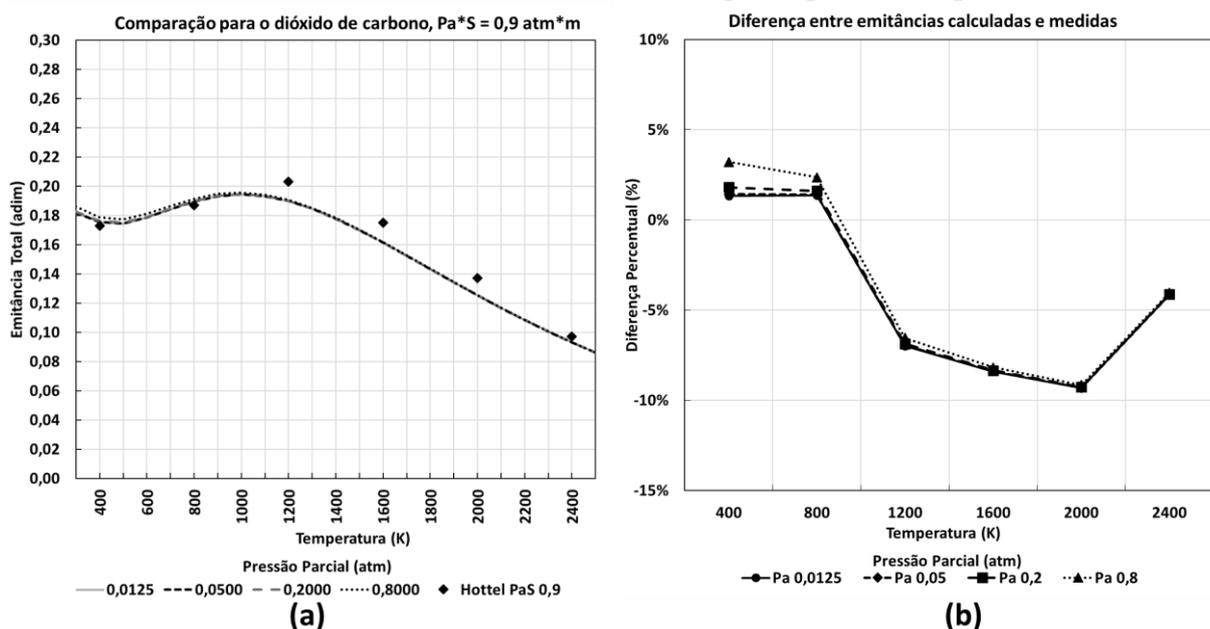
Figura 8 – (a) Emitância de vapor d’água em função da temperatura; (b) diferenças percentuais entre os valores calculados neste trabalho e aqueles publicados por Hottel.



Importante mencionar que as curvas “Hottel” deste trabalho foram criadas usando a metodologia proposta por este, as figuras 7(a) e 7(b) e interpolação visual através de contagem de pixels (para garantir melhor precisão). É possível notar na Figura 8(b) que o comportamento das três curvas é semelhante e que há uma influência notável da temperatura na diferença percentual, podendo uma mesma curva variar de -10% até 25%.

De forma análoga, as Figura 9(a) e Figura 9(b) apresentam a mesma comparação para o caso do dióxido de carbono.

Figura 9 – (a) Emitância de dióxido de carbono ao longo da temperatura; (b) diferenças percentuais entre os valores calculados neste trabalho e aqueles publicados por Hottel.



Tendo em vista as diferenças acentuadas para o caso do vapor d'água, a próxima etapa deste trabalho focou em buscar alternativas para representar graficamente os valores de emitância norteando dois objetivos: manter a simplicidade de uso das tabelas e, ainda assim, garantir bons resultados em comparação à diferença do valor calculado pelo método *LBL* (considerado como exato).

Desta forma, para manejar bem todos os dados gerados, utilizou-se do software Excel para compila-los. Criou-se uma planilha para vapor d'água e nesta incluía em cada aba as curvas de emitância para uma determinada pressão parcial.

A tarefa de manter um número adequado de tabelas resultou na necessidade de realizar um comprometimento com os resultados, assim, optou-se por tratar apenas das pressões parciais igual ou menores que 0,25 atm. O motivo é que se espera que tais tabelas sejam utilizadas para, principalmente, dimensionamento de fornos em combustão estequiométrica ou misturas pobres. Então, para essas queimas, as frações molares de dióxido de carbono e vapor d'água não devem ultrapassar valores de 0,25 cada.

Como referência, a Tabela 1 apresenta alguns combustíveis gasosos comuns em aplicações na engenharia e suas frações molares para combustão estequiométrica.

Tabela 1 – Combustíveis e suas frações molares aproximadas em combustão estequiométrica.

Combustível	Fração molar de H₂O	Fração molar de CO₂
Metano (CH₄)	0,190	0,095
Propano (C₃H₈)	0,155	0,116
Butano (C₄H₁₀)	0,150	0,120

Por fim, optou-se por analisar individualmente os efeitos da pressão parcial e do comprimento e apresentar graficamente esses efeitos separadamente. A nova metodologia proposta neste trabalho é que a emitância seja calculada através do uso de dois gráficos. O primeiro, muito similar ao gráfico de emitância padrão apresentado por Hottel, porém as curvas são apresentadas apenas pelo seu valor de pressão parcial e todas calculadas a um mesmo comprimento característico, sendo este o de referência. O segundo gráfico reúne diversas curvas de correção para o comprimento, sendo feito pela normalização das curvas pelo resultado da emitância do comprimento referência e de uma pressão parcial referência.

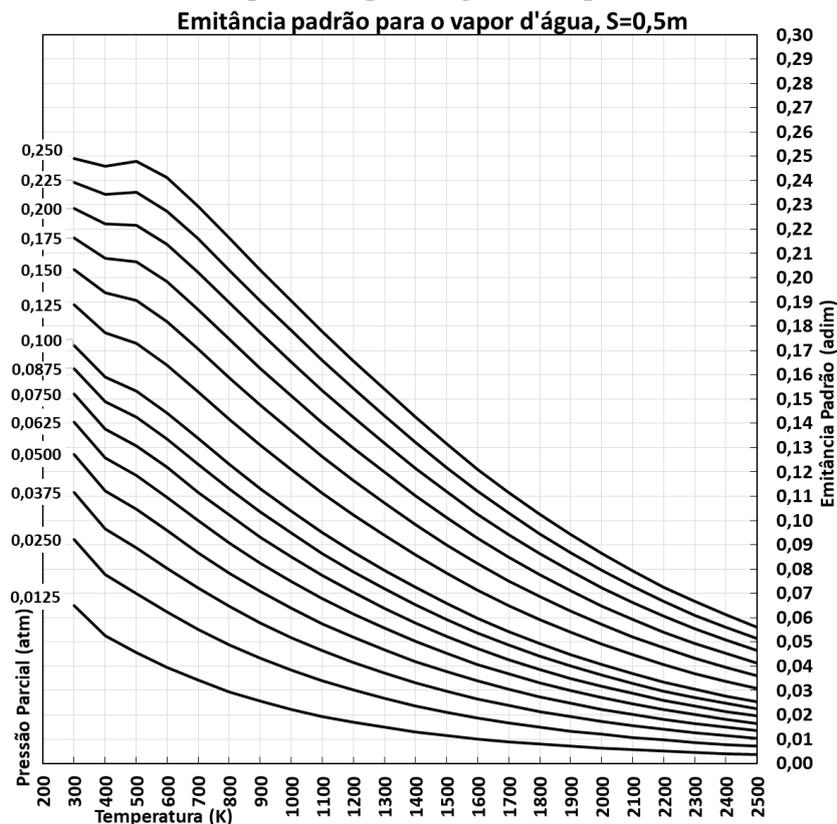
O capítulo seguinte apresenta os gráficos obtidos juntamente com o equacionamento adequado para utiliza-los em conjunto.

4. RESULTADOS

4.1 Resultados para o vapor d'água

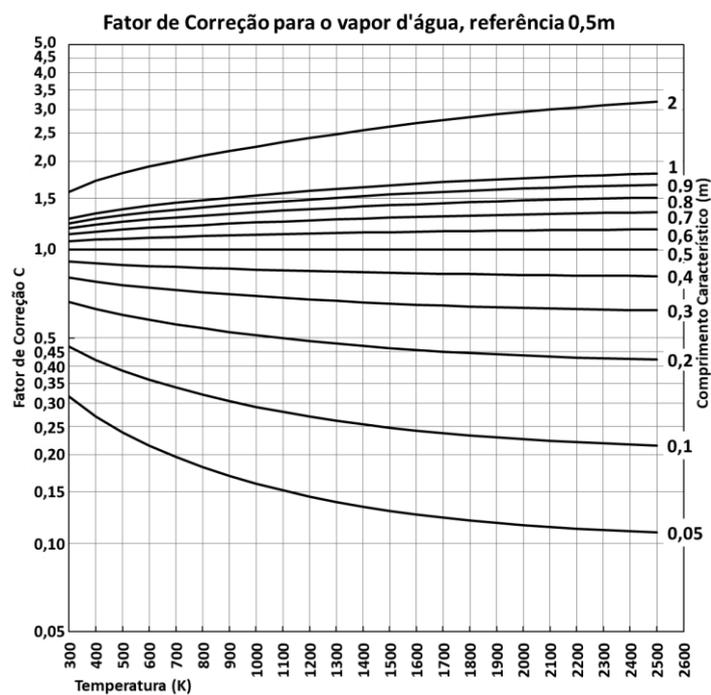
A Figura 10 ilustra os resultados obtidos para o vapor d'água.

Figura 10 – Emitância Padrão para o vapor d'água. Comprimento referência 0,5 metros.



A Figura 10 apresenta os resultados de Emitância Padrão em função da temperatura e da pressão parcial do gás. Este valor padrão foi calculado para um comprimento equivalente de 0,5 metros. Para manter a acurácia dos resultados, optou-se por desacoplar as variáveis comprimento característico e pressão parcial. A Figura 11 foi a correção criada para diferentes comprimentos característicos. O gráfico está em escala logarítmica de base 10.

Figura 11 – Fator de Correção para o Comprimento Característico.



Para gerar essas curvas de correção utilizou-se como referência os resultados da emitância para uma pressão parcial de 0,05 atm. Então, normalizou-se as curvas para o valor de 0,5 metros (que é a referência da Figura 9). Usou-se de uma equação de normalização de tal forma que:

$$C(S, \delta) = \left(\frac{\varepsilon_{p_0, S}}{\varepsilon_{p_0, S_0}} \right) \cdot \left(\frac{S}{S_0} \right)^\delta \quad (9)$$

Onde δ é um fator de ajuste que foi otimizado através de uma planilha Excel que contava com todos dados calculados de emitância e buscava diminuir os erros médio e máximo da correção proposta com o valor exato disposto pelo método *LBL*. O fator de ajuste resultou em 0,021 para valores de comprimento maiores que 0,5 metros e em -0,015 para valores menores. Os termos p_0 e S_0 são referentes à pressão parcial referência e comprimento referência, respectivamente, sendo neste trabalho, 0,05 atm e 0,5 m ou 12m.

Assim, a metodologia proposta neste trabalho para obtenção da emitância do vapor d'água é primeiro buscar o valor apresentado como o padrão e depois corrigi-lo para o comprimento em questão. O equacionamento fica tal que:

$$\varepsilon_{H_2O} = C \cdot \varepsilon_{H_2O}^0 \quad (10)$$

A Tabela 2 apresenta os erros obtidos em cálculos utilizando esta metodologia proposta.

Tabela 2 – Erros médio e máximo para a correção.

Comprimento	Erro Médio	Erro Máximo
S > 0,5m	4,1%	23,2%
S < 0,5m	7,1%	30,4%
0,10 m < S < 1,0 m	3,7%	20,1%
0,05 m < S < 2,0 m	5,0%	30,4%

Pode-se perceber os valores de erro máximo são elevados, porém estes são devidos aos limites de extrapolação do ajuste de curva proposto neste trabalho. A metodologia desenvolvida neste trabalho apresenta bons resultados quanto mais próximo dos valores referências (pressão parcial de 0,05 atm e comprimento de 0,5 m).

Os mesmos resultados foram repetidos para valores maiores de comprimento característico. A mesma metodologia foi aplicada, apenas mudando a referência de 0,5 metros para 12 metros. A Figura 12 apresenta a emitância padrão enquanto a Figura 13 apresenta o fator de correção.

Figura 12 – Emitância Padrão para o vapor d'água. Comprimento referência 12 metros.

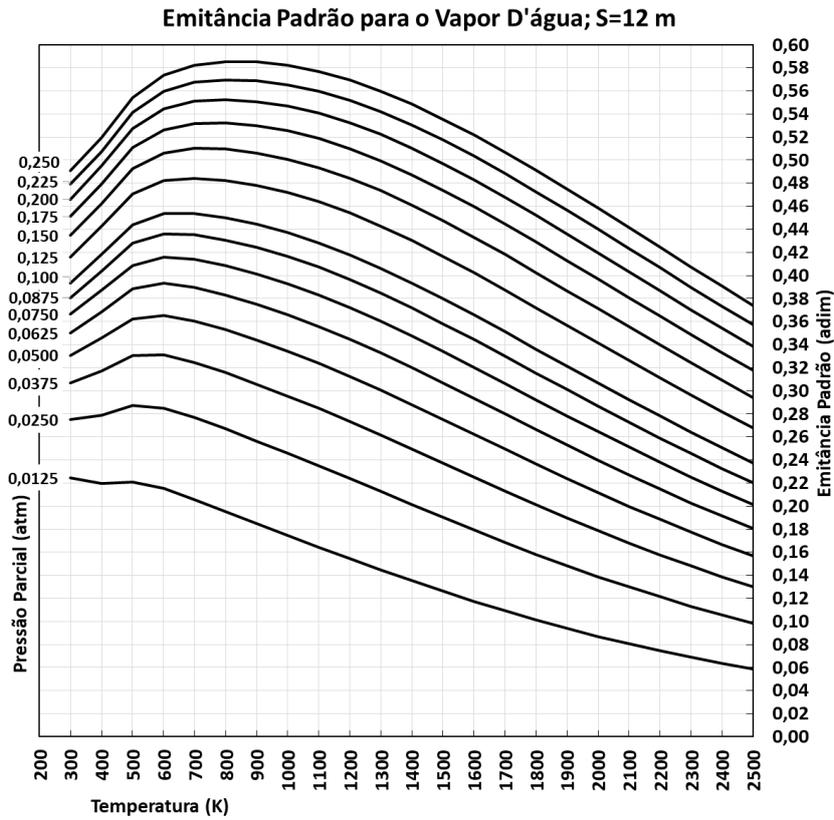
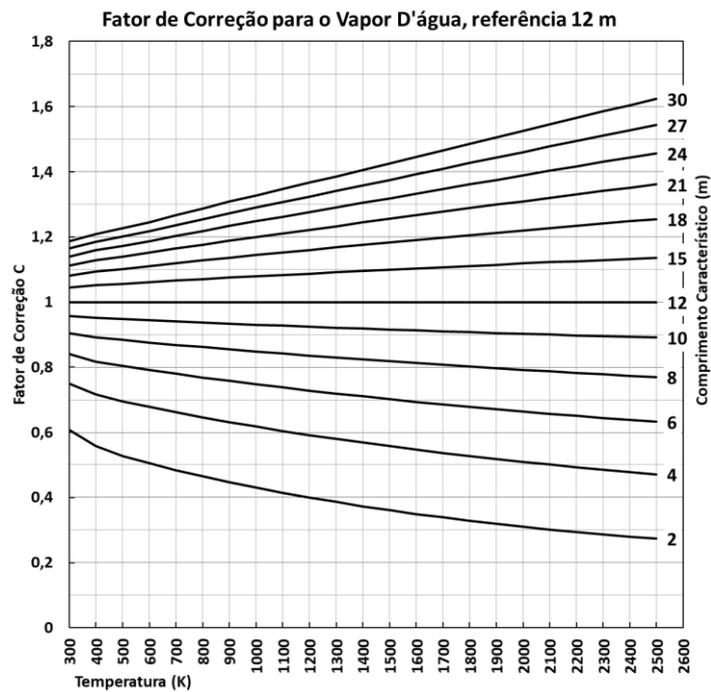


Figura 13 – Fator de Correção para o Comprimento Característico.



Coincidentemente, os valores adotados para o fator de ajuste da curva de correção foram os mesmos que os usados na metodologia para pequenos comprimentos característicos. A Tabela 3 apresenta os erros relacionados a esta metodologia.

Tabela 3 – Erros médio e máximo para a correção.

Comprimento	Erro Médio	Erro Máximo
S > 12m	4,2%	18,5%
S < 12m	6,8%	32,0%
6 m < S < 24 m	4,5%	21,5%
2 m < S < 30 m	5,6%	32,0%

Os comprimentos de 0,5 e 12 metros foram escolhidos como referência, pois escolhendo-os manteve-se o menor erro possível associado a esta metodologia. Portanto, com estes 4 gráficos apresentados (Figuras 10 a 13), pode-se trabalhar com dados atualizados de emitância do vapor d'água numa faixa de 0,05 m até 30 m e de 0,0125 atm até 0,25 atm.

É importante notar que a Figura 11 e a Figura 13 vão contra o argumento proposto por Hottel de que a influência da temperatura não era tão crucial em correções de pressão parcial.

Para se ter noção dos erros associados para ambas correções (0,5m e 12m) e para diferentes faixas de pressão parcial, a Tabela 4 apresenta erros máximos para diferentes combinações de faixa de pressão parcial com faixas de comprimento utilizando a metodologia apresentada e comparando com os cálculos realizados com o método *LBL*.

Tabela 4 – Erros máximos para diferentes pressões parciais e comprimentos.

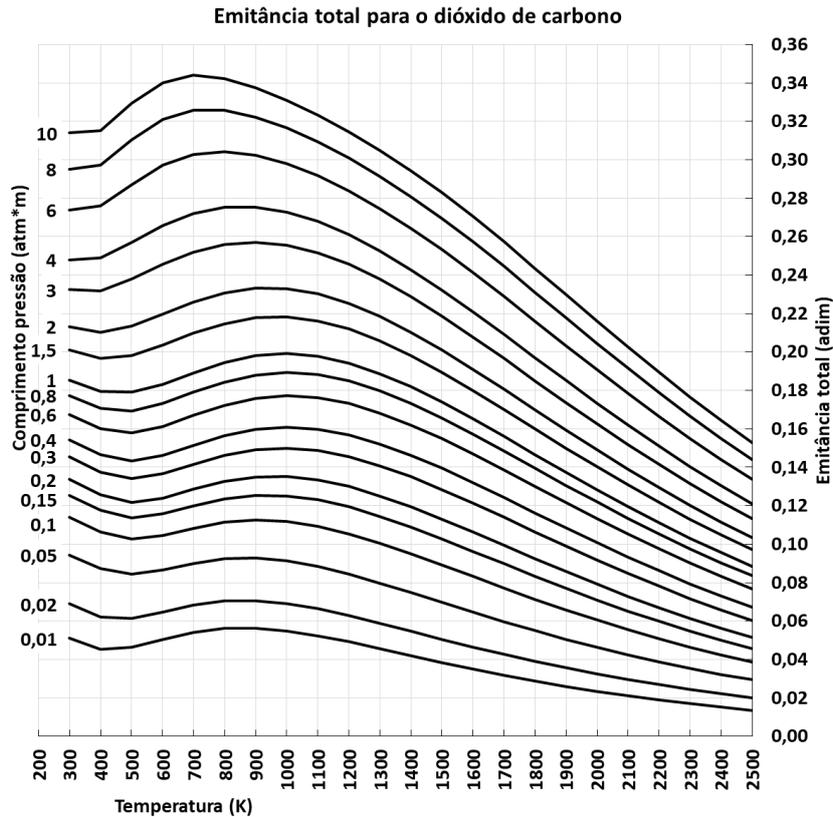
S \ Pa	0,0125 - 0,0375 atm	0,0375 – 0,1 atm	0,1 – 0,2 atm	0,2 – 0,25 atm
0,05 – 0,3 m	26,7%	15,7%	26,9%	30,4%
0,3 – 0,8 m	6,7%	2,2%	7,2%	8,3%
0,8 – 2,0 m	18,5%	6,6%	18,6%	23,2%
2,0 – 8,0 m	25,0%	15,9%	28,3%	32,0%
8,0 – 21 m	9,6%	4,1%	9,2%	11,0%
21 – 30 m	15,4%	6,4%	15,4%	18,5%

Desta forma, quem for utilizar os gráficos apresentados neste trabalho, pode calcular emitância do vapor d'água na pressão total de 1 atm para as faixas de 0,0125 a 0,25 de fração molar, 0,05 a 30 metros de espessura (comprimento do meio) e de 300 a 2500 K e saber o erro máximo para os valores selecionados de fração molar e comprimento.

4.2 Resultados para o dióxido de carbono

Por fim, a Figura 14 apresenta os resultados de Emitância Total para o dióxido de carbono. Estes foram calculados para uma pressão parcial de 0,1 atm. Além do resultado para pressão parcial de 0,1 atm, calculou-se para diferentes pressões parciais, conforme explicado na seção 3. Comparando os resultados entre as diferentes pressões parciais, foi confirmado que as discrepâncias entre valores de emitância para comprimento-pressão igual e pressões muito distintas mantem-se adequados (menores que 5%), sendo julgado não haver necessidade de realizar uma correção. Desta forma, a emitância padrão é a própria total.

Figura 14 – Emitância Total para o dióxido de carbono.



5. CONCLUSÃO

O presente trabalho realizou cálculos de emitância para o dióxido de carbono e o vapor d'água, atualizando-os com o auxílio do banco de dados HITEMP-2010 e comparando-os com os disponíveis na literatura, percebendo divergências de resultado. Além de calcular curvas para diferentes valores de pressão parcial, temperatura e comprimento, também propôs uma nova metodologia para cálculo simplificado e de fácil acesso e entendimento a não especialistas em engenharia térmica que consegue manter erros médios aceitáveis e numa faixa inferior à 10%.

Assim sendo, este trabalho conseguiu atualizar os dados disponíveis na literatura para a emitância dos dois principais produtos da combustão, o vapor d'água e o dióxido de carbono. Além disso, sucedeu em apresentar uma nova metodologia para a leitura gráfica de valor de emitância de vapor d'água mantendo uma boa simplicidade de entendimento.

Como próximas etapas, sugerem-se três. A primeira é dedicar-se aos gráficos de correção de mistura, também apresentados por Hottel *et al.* (1954) para buscar atualizá-los, complementá-los e torná-los mais simples de entendimento.

A segunda sugestão remete a buscar expandir os gráficos gerados e a metodologia proposta para valores de pressão parcial do vapor d'água maiores que 0,25 atm e atualizar os dados de Hottel *et al.* (1954) para pressões totais maiores que 1 atm.

A última sugestão é a criação de uma planilha Excel para automatizar o cálculo da emitância de uma espécie ou mistura. Desta forma, poder-se-ia eliminar os dois erros de maior impacto na estimativa: o primeiro referente a interpolação visual de quem utiliza os gráficos e o segundo relativo ao erro inerente de ambas metodologias, a de Hottel e a apresentada neste trabalho.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALBERTI, M.; WEBER, R.; MANCINI, M. Re-creating Hottel's emissivity charts for carbon dioxide and extending them to 40 bar pressure using HITEMP-2010 data base. **Combustion and Flames**, v. 162, n. 3, p. 597-612, 2015. Disponível em:

< <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2014.09.005>>

_____. Re-creating Hottel's emissivity charts for water vapor and extending them to 40 bar pressure using HITEMP-2010 data base. **Combustion and Flames**, v.169, p.141-153, Julho, 2016. Disponível em:

< <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.04.013>>

DORIGON, Leonardo J.; DUCIAKI, Gustavo; BRITTES, Rogério; CASSOL, Fabiano; GALARÇA, Marcelo; FRANÇA, Francis H. R. WSGG correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non-isothermal, non-homogeneous H₂O/CO₂ mixtures. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 64, p. 863-873, Setembro, 2013. Disponível em:

< <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.05.010>>

HOTTEL, Henry C. Radiant-Heat Transmission. IN: MCADAMS, William. **Heat Transmission**. New York: McGraw Hill, 3rd ed., 1954.

INCROPERA, Frank P.; DEWITT, David P.; BERGMAN, Theodore L.; LAVINE, Adrienne S. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**. Rio de Janeiro: LTC, 6^a ed., capítulo 13, p. 531-535, 2007.

HOWELL, John R.; MENGÜÇ, M. Pinar; SIEGEL, Robert; **Thermal Radiation Heat Transfer**, New York: Taylor & Francis, p. 441-488, 2002.

ROTHMAN, L. S.; GORDON, I. E.; BARBER, R. J.; DOTHE, H.; GAMACHE, R. R.; GOLDMAN, A.; PEREVALOV, V.; TASHKUN, S. A.; TENNYSON, J. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, v. 111, p. 2139-2150, 2010, Disponível em:

<[doi: 10.1016/j.jqsrt.2010.05.001](https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.05.001)>