

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

MODELAGEM ESPECTRAL DA RADIAÇÃO EM PROCESSOS DE COMBUSTÃO  
BASEADA NO MÉTODO DO NÚMERO DE ONDA ACUMULADO

por

Marcelo Moraes Galarça

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, 2 de julho de 2010.

MODELAGEM ESPECTRAL DA RADIAÇÃO EM PROCESSOS DE COMBUSTÃO  
BASEADA NO MÉTODO DO NÚMERO DE ONDA ACUMULADO

por

Marcelo Moraes Galarça  
Mestre em Engenharia Mecânica

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos dos Transportes

Orientador: Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Aprovada por:

Prof. Dr. Amir Antônio Martins Oliveira Jr. .... POSMEC / UFSC

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo ..... PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Luís Mauro Moura ..... PPGEM / PUC-PR

Prof. Dr. Horácio A Vielmo  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 02 de Julho de 2010.

*À minha família  
e aos verdadeiros amigos.*

## AGRADECIMENTOS

A Deus e a toda equipe de luz, primeiramente.

Aos meus pais, Luiz Osório e Tânia, e irmã, Gabi, pelo suporte (afetivo e algumas vezes material) durante minha caminhada acadêmica até o momento.

À minha esposa, Dóris que muitas e muitas vezes me ajudou a olhar pra frente e enxergar que os obstáculos poderiam ser contornados, e quem, seguramente, me “levantou” de vários “tombos” ou não me deixou cair outros vários.

Ao professor, Francis França, pela orientação, pela amizade que surgiu e por não desistir de mim quando eu mesmo já pensava em fazê-lo.

Aos membros da banca avaliadora, e agradeço a estes não por “protocolo”, realmente agradeço pela disposição e pela atenção que foi dada ao meu trabalho e a mim de forma, sempre, bastante cordial. Professores Luís Moura, Amir Oliveira e Horácio Vielmo, obrigado.

À professora Maria Esther Sbampato, que muito provavelmente não lembra ou nem sabe o quanto foi importante para este trabalho, nos únicos dois contatos que tivemos.

Aos professores Vladimir Solovjov e Brent Webb, os quais contribuíram de forma “vital” para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos amigos e colegas do laboratório GESTE (Elizaldo dos Santos, Daniel Ludwig, Amir de Toni Jr., Stone Felix e Dionísio Neto), pois de uma forma ou outra, sempre tive com quem contar. Um agradecimento especial para um grande amigo que fiz neste período, e um colega de trabalho, Anderson Mossi, que sem dúvida contribuiu muito no andamento da pesquisa. Ao amigo e colega Ivoni Acunha, pelos vários bons conselhos durante este período.

À UFRGS, a qual me abriu as portas para desenvolver o trabalho, bem como me abriu as portas para minha vida profissional acadêmica.

Ao CNPq pela bolsa de estudos concedida no período.

“No livro da vida, as respostas não  
estão na parte detrás.”

(Charlie Brown)



## RESUMO

O trabalho apresenta uma modificação do modelo do número de onda cumulativo (*CW – Cumulative Wavenumber*) para atender ao balanço de energia na determinação da transferência radiante de gases participantes não uniformes. De um modo geral, o modelo *CW* fornece resultados que se mostram precisos para o divergente do fluxo de calor radiante (ou taxa volumétrica de geração de energia) quando comparados à solução benchmark (integração linha-por-linha). No entanto, conforme é apresentado nesta pesquisa, uma hipótese importante feita pelo modelo o torna não conservativo e, não garantindo o balanço de energia radiante quando um meio não uniforme é considerado. Como consequência, o fluxo de calor radiante pode apresentar desvios consideráveis em relação à solução exata. O modelo do número de onda cumulativo modificado (*CWM*) foi desenvolvido de forma a manter o mesmo valor para a taxa volumétrica de geração de energia, mas satisfazendo ao balanço de energia radiante. O modelo *CWM* é aplicado juntamente com o método das ordenadas discretas para resolver a transferência de calor radiante em sistemas unidimensionais formados por placas planas infinitas e paralelas, contendo camadas uniformes e não uniformes de gases típicos da combustão de metano ou óleo combustível. As paredes são negras para a radiação térmica. A aquisição de dados das linhas de absorção espectrais é feita pela utilização dos bancos de dados *HITRAN* e *HITEMP*. São apresentados os bancos de dados, bem como a forma em que é efetuada a extração destes e, posteriormente, a elaboração dos espectros de absorção das espécies químicas. São analisados meios uniformes (isotérmicos e homogêneos) primeiramente, evidenciando que o modelo original (*CW*) não apresenta problemas nesses casos. Posteriormente, meios não uniformes (não-isotérmicos e homogêneos; ou não-isotérmicos e não homogêneos) são avaliados. Os resultados para ambos os modelos, *CW* e *CWM*, são comparados com a solução linha-por-linha (*LBL*). Casos com diferentes perfis de temperatura e concentração da espécie química são considerados. A solução a partir da nova metodologia se apresentou mais dispendiosa computacionalmente devido ao acréscimo de novos passos iterativos. Os resultados mostram que o *CWM* leva a resultados mais precisos para o fluxo de calor radiante, satisfazendo ao balanço de energia com um desvio que se deve principalmente à discretização espacial da equação de transporte radiante.

Palavras-chave: Modelos de gás participante; modelo do número de onda cumulativo modificado; transferência de calor radiante; bancos de dados espectrais.

## ABSTRACT

This work presents a modification of the cumulative wavenumber (CW) method to determine the radiative transfer in non-uniform participating gases to enforce the radiative energy balance to be satisfied. In particular, the CW model leads to results for the divergent radiative heat flux (or radiative volumetric heat source) that proved accurate in comparison to the benchmark solution (LBL integration) for non-isothermal medium. However, as will be shown in this work, one important assumption of the method prevents it of satisfying the radiative energy balance when a non uniform medium is considered. As consequence, the radiative heat flux can present considerable deviation of the correct solution. The modified cumulative wavenumber (CWM) model was developed to keep the same value of the radiative volumetric heat source, but also to satisfy the radiative energy balance. The CWM model is applied together with the discrete ordinates method to solve the radiation heat transfer in a one-dimensional slab containing a uniform/non-uniform layer of typical gases from the methane or fuel oil combustion. The walls are black for the thermal radiation. The HITRAN and HITEMP are used to extract the spectral lines information that is required for modeling. The database are briefly presented as well as the procedure that is used to extract the data and the spectra drawing. Firstly, uniform media (isothermal and homogeneous) are analyzed proving that the original model (CW) presents accurate results in those cases. Next, non-uniform media (non-isothermal and homogeneous; or non-isothermal and non-homogeneous) are taken into account. The results of both the CW and the CWM modeling are compared to the benchmark line-by-line (LBL) integration. Different temperature and concentration profiles are considered. The solution obtained from the new model presents an increase in the computational time due to the insertion of new iterative loops. The results show that the CWM leads to accurate estimation of both the radiative heat flux and volumetric heat source, satisfying the radiative energy balance with an error that is mostly due to the spatial discretization of the radiative transfer equation.

Keywords: Participating gas models, modified cumulative wavenumber model, radiative heat transfer, spectral database.

## SUMÁRIO

|   |            |
|---|------------|
| <b>LISTA DE SÍMBOLOS .....</b>  | <b>IX</b>  |
| <b>SÍMBOLOS GREGOS.....</b>   | <b>X</b>   |
| <b>SUB-ÍNDICES.....</b>   | <b>X</b>   |
| <b>ABREVIATURAS.....</b>  | <b>XI</b>  |
| <b>LISTA DE FIGURAS.....</b>  | <b>XII</b> |
| <b>LISTA DE TABELAS.....</b>  | <b>XIV</b> |
| <b>1 INTRODUÇÃO.....</b>  | <b>1</b>   |
| 1.1 Motivação e Revisão Bibliográfica.....  | 1          |
| 1.2 Organização do Trabalho.....  | 6          |
| <b>2 RADIAÇÃO EM MEIOS PARTICIPANTES E MODELOS ESPECTRAIS PARA SOLUÇÃO.....</b>               | <b>8</b>   |
| 2.1 Fundamentação Teórica para Meios Participantes.....                                       | 8          |
| 2.1.1 Absorção da Radiação Térmica.....   | 9          |
| 2.1.2 Emissão de um Volume do Meio Participante.....  | 12         |
| 2.1.3 Equação do Transporte Radiante – RTE.....   | 13         |
| 2.2 Bandas de Absorção-Emissão e Linhas Espectrais de Gases.....                              | 14         |
| 2.2.1 Mecanismos Físicos.....   | 14         |
| 2.2.2 Alargamento de Linha Espectral.....   | 15         |
| 2.3 Modelos de Gases Participantes.....   | 17         |
| 2.3.1 Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas (WSGG).....  | 17         |
| 2.3.2 A Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas Baseada em Linhas Espectrais (SLW).....                | 18         |
| 2.3.3 Integração Linha-por-Linha (LBL).....   | 20         |
| 2.3.4 Método da Distribuição- $k$ .....   | 21         |
| 2.3.5 O Método do $k$ -Correlacionado.....  | 22         |
| 2.3.6 A Função Distribuição Multi-Escala do $k$ -Correlacionado para o Espectro Completo..... | 24         |
| 2.3.7 O Modelo do Número de Onda Cumulativo.....  | 24         |



|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>3</b> | <b>MODELAGEM DAS PROPRIEDADES ESPECTRAIS DOS GASES ATRAVÉS DO MÉTODO CW.....</b> | <b>26</b> |
| 3.1      | O Método do Número de Onda Cumulativo (CW).....                                  | 26        |
| 3.1.1    | Definição.....   | 26        |
| 3.1.2    | Integração e Derivação.....  | 27        |
| 3.1.3    | O Número de Onda Cumulativo e a Dependência da Fração Molar.....                 | 28        |
| 3.1.4    | Mistura de Gases.....  | 29        |
| 3.2      | Modelo Espectral.....  | 30        |
| 3.3      | Correlação Espectral-Local.....  | 31        |
| 3.4      | A RTE no Modelo CW.....  | 34        |
| 3.5      | O Método das Ordenadas Discretas (Aproximação $S_n$ ).....                       | 36        |
| 3.6      | Inconsistência do Modelo CW em Relação ao Balanço de Energia Radiante.....       | 40        |
| 3.7      | Proposta de Modificação do Modelo do Número de Onda Acumulado.....               | 46        |
| 3.8      | Procedimento Numérico.....   | 50        |
| <b>4</b> | <b>BANCOS DE DADOS MOLECULARES.....</b>  | <b>52</b> |
| 4.1      | Introdução ao HITRAN/HITEMP.....   | 52        |
| 4.2      | Organização dos Parâmetros Fornecidos pelo HITRAN/HITEMP.....                    | 53        |
| 4.3      | Geração de Espectros e Procedimento de Cálculo.....                              | 54        |
| 4.4      | Validação da Construção Espectral.....   | 55        |
| <b>5</b> | <b>RESULTADOS.....</b>   | <b>57</b> |
| 5.1      | Avaliação do banco de dados utilizado.....                                       | 57        |
| 5.2      | Validação.....   | 60        |
| 5.2.1    | Placa participante unidimensional.....   | 60        |
| 5.2.2    | Características de máquina e simulação.....                                      | 61        |
| 5.2.3    | Meio homogêneo, Isotérmico.....  | 63        |
| 5.2.4    | Meios não uniformes.....   | 66        |
| <b>6</b> | <b>CONCLUSÕES E PROPOSTAS DE TRABALHOS FUTUROS .....</b>                         | <b>85</b> |
|          | <b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>  | <b>88</b> |
|          | <b>APÊNDICE A – BALANÇO DE ENERGIA LOCAL PARA OS CASOS NÃO UNIFORMES.....</b>    | <b>93</b> |

## LISTA DE SÍMBOLOS

|           |  |
|-----------|--|
| $a$       | coeficiente de absorção [ $\text{m}^{-1}$ ]  |
| $A$       | área [ $\text{m}^2$ ]  |
| $C$       | seção-transversal de absorção (ou coeficiente de absorção molar) [ $\text{cm}^2/\text{mol}$ ]    |
| $C_e$     | função de ponderação do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas                                 |
| $D$       | gases cinzas fracionais  |
| $e$       | poder emissivo [ $\text{W}/\text{m}^2$ ]   |
| $f$       | termo de correção da equação do transporte radiante para o método CWM                            |
| $F$       | função distribuição ALB  |
| $F$       | forma de linha normalizada   |
| $g$       | função de correção da equação do transporte radiante para o método CWM                           |
| $H$       | função-marcha Heaviside  |
| $I$       | intensidade de radiação total [ $\text{W}/(\text{m}^2 \text{ sr})$ ]                             |
| $J$       | número de gases cinzas utilizados nos modelos  |
| $J$       | intensidade de radiação do gás cinza fracional [ $\text{W}/(\text{m}^2 \text{ sr})$ ]            |
| $J^{(M)}$ | intensidade de radiação do gás cinza fracional modificada [ $\text{W}/(\text{m}^2 \text{ sr})$ ] |
| $l$       | número de ordenadas  |
| $m$       | número de espécies químicas  |
| $N$       | densidade molar [ $\text{mol}/\text{cm}^3$ ]   |
| $n$       | coeficiente de ajuste da temperatura   |
| $P$       | pressão [atm]  |
| $Q_R$     | taxa de energia radiante dissipada [W]   |
| $q_R$     | fluxo radiante [ $\text{W}/\text{m}^2$ ]   |
| $S$       | trajetória, ou comprimento de caminho, em um meio participante [m]                               |
| $S$       | intensidade de linha [ $\text{cm}/\text{mol}$ ]  |
| $s$       | localização (estado termodinâmico)   |
| $T$       | temperatura [K]  |
| $u$       | fator-correção local para o modelo CW  |
| $V$       | volume de um elemento de meio [ $\text{m}^3$ ]   |
| $v$       | função-referência espectral para o modelo CW   |
| $Y$       | fração molar da espécie química  |
| $x$       | localização dos elementos de controle  |

|     |  |
|-----|--|
| $w$ | função do número de onda cumulativo                        |
| $w$ | pesos das quadraturas para o método de ordenadas discretas |

### Símbolos Gregos

|            |  |
|------------|--|
| $\alpha$   | intervalos de número de onda para o método CW                        |
| $\beta$    | ângulo de cone   |
| $\beta$    | intervalos de número de onda para o método CW                        |
| $\delta$   | espaçamento de linha [ $\text{cm}^{-1}$ ]                            |
| $\epsilon$ | emissividade total   |
| $\gamma$   | meia-largura de linha  |
| $\eta$     | número de onda [ $\text{cm}^{-1}$ ]                                  |
| $\Gamma$   | transmitância  |
| $\kappa$   | coeficiente de extinção [ $\text{cm}^{-1}$ ]                         |
| $\lambda$  | comprimento de onda [m]  |
| $\rho$     | refetividade   |
| $\mu$      | direção para irradiação no método de ordenadas discretas             |
| $\sigma$   | constante de Stefan-Boltzmann [ $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K}^4)$ ] |
| $\sigma$   | coeficiente de espalhamento espectral [ $\text{m}^{-1}$ ]            |
| $\omega$   | ângulo sólido  |
| $\xi$      | espessura óptica   |

### Sub-índices

|     |                              |
|-----|------------------------------|
| $b$ | condição de corpo negro      |
| $g$ | condição para o gás          |
| $i$ | referência à linha espectral |
| $i$ | espécie química corrente     |
| $i$ | posição espectral            |
| $j$ | gás cinza corrente           |
| $j$ | segmento espectral           |

|           |  |
|-----------|--|
| $l$       | banda de absorção  |
| $l$       | direção ordenada   |
| $\lambda$ | dependência espectral com relação ao comprimento de onda |
| $\eta$    | dependência espectral com relação ao número de onda      |
| $W$       | quantidades avaliadas no contorno                        |

### Abreviaturas

|               |   |
|---------------|---|
| ALB/ALBDF     | função distribuição das linhas de absorção de corpo negro             |
| CDF           | função densidade cumulativa   |
| CK            | modelo do $k$ -correlacionado   |
| CW            | modelo do número de onda cumulativo                                   |
| CWM           | modelo do número de onda cumulativo modificado                        |
| DOM           | método das ordenadas discretas  |
| ETR           | equação do transporte radiante  |
| HITRAN/HITEMP | banco de dados espectrais   |
| MC-ALBDF      | método de Monte Carlo aplicado à função ALB                           |
| PDF           | função densidade de probabilidade                                     |
| SLW           | modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado em linhas espectrais |
| WSGG          | modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas                              |

## LISTA DE FIGURAS

|  |    |
|--|----|
| Figura 1 - Comparação entre as propriedades radiantes do tungstênio e dióxido de carbono: efeito do comprimento de onda na (a) emitância espectral hemisférica do tungstênio; (b) absorptância espectral direcional do dióxido de carbono (Siegel e Howell, 2002)..... | 9  |
| Figura 2 - Geometria para definição da intensidade de radiação em meio participante.....   | 10 |
| Figura 3 - Absorção de radiação em uma camada de meio participante com espessura infinitesimal $dS$ .....  | 10 |
| Figura 4 – Geometria para dedução da emissão de um volume de meio participante.....  | 13 |
| Figura 5 – Fragmentação da função distribuição de Planck para cálculo da função ALBDF. (Solovjov e Webb, 2000).....  | 19 |
| Figura 6 - Função ALB gerada por Denison e Webb (1993a) e gerada no presente trabalho. Meio: 100% de H <sub>2</sub> O, T <sub>g</sub> = 1000 K, T <sub>b</sub> = 500 K.....  | 20 |
| Figura 7 – Esquema representativo da hipótese do modelo $k$ -Correlacionado.....   | 23 |
| Figura 8 – Número de onda cumulativo da seção-transversal de absorção.....   | 27 |
| Figura 9 – Dependência da função CW com respeito à fração molar. (Solovjov e Webb, 2002)   | 29 |
| Figura 10 – Modelagem espectral dos gases cinza fracionais.....  | 31 |
| Figura 11 – Número de onda cumulativo para: (a) H <sub>2</sub> O e (b) CO <sub>2</sub> a 1000 K (Solovjov e Webb, 2002).....   | 32 |
| Figura 12 – Intensidade isotrópica nas direções positiva e negativa. (Modest, 1993).....   | 38 |
| Figura 13 - Número de pontos para a solução S-6 no primeiro octante (Fiveland, 1991).....  | 38 |
| Figura 14 – Comparação entre o programa ReadHi e somente o perfil de Lorentz para espectros de alta-resolução, para 100% de H <sub>2</sub> O a 1000 K.....   | 56 |
| Figura 15 - Espectro obtido para 100% CO <sub>2</sub> (Temperatura 750 K).....   | 57 |
| Figura 16 - Espectro obtido para 100% de CO <sub>2</sub> (Temperatura 2000 K).....   | 58 |
| Figura 17 - Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de CO <sub>2</sub> em relação à concentração à temperatura de 1000 K.....   | 59 |
| Figura 18 - Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de H <sub>2</sub> O em relação à concentração à temperatura de 1000 K.....  | 59 |
| Figura 19 – Divergente do fluxo de calor radiante para um meio de 100% de H <sub>2</sub> O a 1000 K.....   | 64 |
| Figura 20 – Divergente do fluxo de calor radiante para um meio de 20% de H <sub>2</sub> O, 1500K.....  | 64 |
| Figura 21 – Comparação de resultados obtidos com modelos CW e MC-ALBDF.....  | 65 |

|   |    |
|---|----|
| Figura 22 – Efeito da concentração de H <sub>2</sub> O na taxa volumétrica de geração de calor radiante...  | 66 |
| Figura 23 – Comparação de resultados para diferentes bancos de dados.....   | 68 |
| Figura 24 – (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura parabólico.....                                 | 70 |
| Figura 25 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura linear.....                                     | 71 |
| Figura 26 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura senoidal.....                                   | 73 |
| Figura 27 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura exponencial.....                                | 74 |
| Figura 28 – Esquema representativo da câmara de combustão cilíndrica e campo de temperatura obtido por Barve e Ezekoye (2006).....                        | 74 |
| Figura 29 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura de acordo com Barve e Ezekoye (2006).....       | 75 |
| Figura 30 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – parabólico; concentração - parabólico.....   | 77 |
| Figura 31 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – parabólico; concentração - linear.....       | 78 |
| Figura 32 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – linear; concentração - linear.....           | 79 |
| Figura 33 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – exponencial; concentração - linear.....      | 80 |
| Figura 34 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – exponencial; concentração - exponencial..... | 81 |
| Figura 35 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – parabólica; concentração - senoidal.....     | 82 |
| Figura 36 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – linear; concentração - senoidal.....         | 83 |
| Figura 37 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – linear; concentração - exponencial.....      | 83 |

## LISTA DE TABELAS

|   |    |
|---|----|
| Tabela 1 – Dados contidos nos arquivos HITRAN (Ribeiro, 2006).....  | 53 |
| Tabela 2 – Significado dos parâmetros dos arquivos HITRAN. (Ribeiro, 2006).....   | 53 |
| Tabela 3 – Comparação entre os desvios globais para o balanço de energia entre os modelos CW e CWM para casos não-isotérmicos.....                  | 76 |
| Tabela 4 - Comparação entre os desvios globais para o balanço de energia entre os modelos CW e CWM para casos não-homogêneos e não-isotérmicos..... | 84 |

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Motivação e Revisão Bibliográfica

O mecanismo de radiação térmica apresenta grandes desafios para o entendimento do fenômeno e das principais variáveis governantes do processo. Com o aumento crescente do interesse em problemas envolvendo combustão e das exigências por processos de combustão limpa, a determinação precisa do comportamento radiante de gases participantes ocupa uma posição cada vez importante.

De um modo geral, as trocas radiantes em gases participantes são dominantes na transferência de calor em fornalhas, câmaras de combustão, motores e turbinas a gás, sistemas de ampla utilização industrial. Nestes equipamentos, as temperaturas são bastante elevadas, em alguns casos ultrapassando 2500 K. Conforme postulado por Planck, a energia emitida por um corpo relaciona-se à quarta potência de sua temperatura absoluta, o que ressalta a importância da radiação térmica em sistemas de combustão. Independente do combustível utilizado (sólido, líquido ou gasoso), os produtos do processo de combustão formam uma mistura gasosa que emite e absorve radiação térmica. O gás pode ainda conter fuligem e particulados, os quais também absorvem, emitem e podem, também, espalhar a radiação.

O estudo da radiação térmica em gases participantes impõe grandes dificuldades, dentre elas o tratamento da natureza espectral da radiação através dos coeficientes de absorção, que apresenta uma dependência complexa em relação ao comprimento de onda, à temperatura e à composição dos gases. A integração espectral da energia radiante em misturas de gases participantes pode ser calculada com considerável precisão pela aplicação do método linha-por-linha, porém esses cálculos requerem muito esforço computacional, inviabilizando por ora a sua aplicação na maioria dos problemas práticos de engenharia. Outro ponto a ser observado diz respeito à não-homogeneidades nas distribuições de temperatura e concentração das espécies químicas, as quais fortemente afetam o coeficiente de absorção espectral das misturas. Assim, vários modelos espectrais de gases reais têm sido e continuam sendo desenvolvidos.

A modelagem do comportamento espectral dos gases, tratando-os como “cinzas” (modelo de gás cinza) é a mais antiga e simples. O modelo assume que o meio participante possui coeficiente de absorção independente do comprimento de onda. Como consequência, a quantidade de energia emitida depende apenas da quarta potência da temperatura e do



coeficiente de absorção. Devido à sua simplicidade, o modelo não é capaz de fornecer resultados precisos, pois as propriedades dos gases, ao contrário da simplificação do modelo, variam significativamente no espectro.

Hottel e Sarofim (1967), através da verificação de resultados experimentais, apresentaram o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas (*weighted-sum-of-gray-gases*, WSGG), juntamente com o método das zonas desenvolvido por Hottel e Cohen (1958). Nesta modelagem, assume-se que o gás real seja composto por gases cinzas (normalmente três), e que cada gás ocupe uma região espectral fixa e independente. A ponderação (ou peso) para cada gás cinza é determinada de acordo com a fração da energia radiante no intervalo espectral onde cada gás cinza está contido. Valores para os coeficientes de ponderação e absorção que possibilitam determinar a emitância de gases constituídos por vapor d'água, dióxido de carbono e ar foram apresentados por Smith *et al.* (1982).

A soma-ponderada-de-gases-cinzas é um modelo que não requer o conhecimento espectral detalhado dos dados, pois se considera o total da radiação em todas as bandas; devido a isso, é classificado como método global.

A proposição das relações experimentais a respeito de meios participantes se deve à dependência complexa das propriedades espectrais com a temperatura, pressão e concentração parcial das espécies químicas que constituem o meio.

Atualmente existem bancos de dados que compilam características relacionadas aos comportamentos de emissão e absorção de moléculas, como o HITRAN e o HITEMP, os quais têm sido utilizados para a obtenção das propriedades espectrais dos gases com um nível muito elevado de detalhamento. Com essas informações, a transferência de calor por radiação térmica pode ser resolvida de maneira precisa pela integração linha-por-linha (*line-by-line integration*, LBL), a qual considera a emissão e a absorção de cada linha do espectro individualmente. As integrações LBL são, por outro lado, de difícil implementação e de elevado custo computacional, como já mencionado. Assim, essa metodologia é aplicada somente em casos especiais, na obtenção de soluções *benchmark*. De modo a contornar as dificuldades relacionadas às integrações LBL, vários modelos de banda têm sido propostos. Uma revisão geral de tais modelos pode ser encontrada em Siegel e Howell (2002).

Quanto à modelagem de banda, são conhecidas duas classificações: banda estreita (*narrow band models*) e banda larga (*wide band models*). A primeira considera que o intervalo espectral seja apenas uma porção de uma banda de vibração-rotação completa. Por outro lado, os modelos de banda larga consideram toda a banda de vibração-rotação. Alguns

desses modelos foram desenvolvidos quando os bancos de dados das características espectrais de emissão e absorção das moléculas eram inexistentes ou pouco desenvolvidos.

Para encontrar soluções da transferência de energia radiante total, as equações de transporte podem ser resolvidas em muitos intervalos de comprimento e uma integração é feita para obtenção da energia espectral. Uma vez que o coeficiente de absorção varia de modo irregular com o número de onda, esta integração requer a solução das equações de transferência para muitos intervalos espectrais. O método da *Distribuição-k* é um modelo que reduz a extensão dos cálculos, pois assume que a intensidade espectral de corpo negro local não varia significativamente ao longo de uma banda de absorção e pode ser tratada como constante sobre a largura de banda. A intensidade espectral dentro da banda é, assim, somente função do coeficiente de absorção espectral. Porém, para o caso em que as propriedades do meio participante dependem da localização (estado termodinâmico), devido a variações na temperatura e concentração das espécies químicas, a aplicação da *Distribuição-k* pode perder a consistência.

Para os casos em que as propriedades variam com a posição, Goody e Yung (1989), Goody *et al.* (1989) e Liu *et al.* (2000) propuseram o método *k-Correlacionado*, ou simplesmente método *CK*. Este método é baseado na observação de que, para um intervalo espectral estreito, a transferência radiativa é insensível ao posicionamento exato das linhas espectrais no interior do intervalo. Desta forma, o rearranjo das linhas dentro do intervalo não deve afetar a transferência radiante. O método correlaciona os coeficientes de extinção do meio em diferentes temperaturas e concentrações das espécies químicas; desta forma, é possível a obtenção de um determinado coeficiente de absorção com base em outro já conhecido. Modest e Zhang (2002) aprimoraram o método através do acoplamento com o método da *Distribuição-k*, levando em conta todo o espectro. Deste, posteriormente, o modelo chamado de *Distribuição Multi-Escala do k-Correlacionado para o espectro completo (Multi-Scale Full-Spectrum Correlated-k Distribution model – MSFSCK)* foi apresentado por Zhang e Modest (2002).

Modest (1991) demonstrou que o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas pode ser usado juntamente com qualquer método de solução para a equação de transporte radiante. Isto levou ao desenvolvimento de novos modelos espectrais, tais como o modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas baseado em linhas espectrais (*Spectral-Line Weighted-Sum-of-Gray-Gases*, SLW), proposto por Denison e Webb (1993a). Este modelo permite a obtenção dos pesos (de ponderação) dos gases cinzas a partir de dados calculados pelo método LBL, como disponível nos bancos de dados HITRAN e HITEMP. Em um próximo passo, uma

função distribuição das linhas de absorção de corpo negro (*Absorption-Line Blackbody Distribution Function*, ALBDF) foi proposta e aplicada ao método SLW. Correlações para esta função foram apresentadas para meios compostos de vapor d'água e ar (Denison e Webb, 1993b), e para dióxido de carbono e ar (Denison e Webb, 1995a). A ALBDF foi posteriormente estendida para misturas de gases não-homogêneas e não-isotérmicas de vapor d'água e dióxido de carbono em ar, e também para misturas de gases multicomponentes (Denison e Webb, 1995b e 1995c).

Maurente *et al.* (2007) apresentou o Método de Monte Carlo aplicado à função ALB (MC-ALBDF) utilizando meios participantes constituídos por vapor d'água e dióxido de carbono. As razões estequiométricas consideraram a combustão de metano e octano. Maurente *et al.* (2008) aplicou o MC-ALBDF para resolver a equação de transporte radiante em uma câmara cilíndrica. As dimensões, as concentrações de espécies químicas e os campos de temperatura simularam uma representação realística de uma câmara de combustão. Os resultados foram comparados com outros obtidos pelo emprego do modelo WSGG baseado nas correlações disponíveis em Smith *et al.* (1982) e Taylor e Foster (1974). Comparações relativas a meios homogêneos mostraram que o modelo WSGG apresentava resultados de transferência de calor mais elevados do que o MC-ALBDF. Esta diferença foi principalmente atribuída às limitações das correlações fornecidas em Smith *et al.* (1982) e Taylor e Foster (1974). Galarça *et al.* (2008) forneceram novas correlações para os pesos e coeficientes de absorção, obtidos a partir da solução do método MC-ALBDF, comparando aos resultados de Maurente *et al.* (2008). Verificou-se uma boa concordância nos valores de emitância total através das novas correlações.

Aproximações mais recentes para correlações de banda têm levado a simplificações bastante úteis. A maioria desses métodos envolve transformar a distribuição espectral do coeficiente de absorção em uma função densidade de probabilidade (PDF) ou em uma função distribuição cumulativa (CDF). As variações suaves da PDF ou CDF são usadas para fornecer a dependência das propriedades espectrais nas relações de transferência radiante. As PDF's ou CDF's devem ser desenvolvidas a partir de dados fundamentados no comportamento espectral das linhas de absorção em todo o espectro, utilizando-se para isso de bancos de dados como HITRAN ou HITEMP.

Mais recentemente, Solovjov e Webb (2000) apresentaram modelos para melhorar a eficiência do método SLW em misturas de gases multicomponente. O modelo do número de onda cumulativo (*Cumulative wavenumber model*, CW) foi proposto por Solovjov e Webb (2002) para a solução da equação de transporte radiante em meios gasosos não uniformes em

alta temperatura. Esta aproximação permite a acomodação de meios participantes com não-uniformidades intensas na temperatura e concentrações, e fronteiras não cinza. Solovjov e Webb (2005) aplicaram o modelo CW para modelagem da transferência de energia radiante em misturas de gases contendo fuligem, e compararam com resultados obtidos com a aproximação LBL. Solovjov e Webb (2008) modelaram um meio gasoso utilizando uma aproximação multicamada pela aplicação dos métodos SLW e CW; as predições se mostraram bastante precisas mesmo com a implementação de poucas camadas. Salinas (2008) desenvolveu uma técnica de aproximação rápida para o modelo CW. Esta aproximação reduziu significativamente o tempo computacional em comparação com o método CW padrão para a solução.

Em seu último trabalho até o momento, Solovjov e Webb (2010) propõem a solução da RTE para um meio não-isotérmico através da utilização do modelo SLW, no entanto os fatores de correção locais são obtidos com auxílio da modelagem CW. Segundo os autores, esta solução se aproxima muito da solução exata no limite em que os gases cinza tendem ao infinito.

O tratamento das propriedades espectrais de gases, ou mistura de gases, é uma etapa fundamental na obtenção de resultados precisos na determinação da quantidade de energia trocada por radiação térmica. Apesar do progresso considerável dos modelos espectrais nas últimas décadas, há ainda um amplo espaço para a pesquisa de métodos que permitam a solução prática e computacionalmente viável dos problemas envolvendo meios participantes em radiação térmica, principalmente no processo de combustão. São também necessários testes que validem de forma mais abrangente a aplicação dos modelos atuais, conduzindo a novos aperfeiçoamentos.

O presente trabalho é motivado pela necessidade de melhor compreensão, aplicação e aprimoramento dos modelos espectrais modernos. Dentre as aplicações em engenharia, estudos relacionados ao comportamento térmico no interior de câmaras de combustão ainda apresentam um grande desafio, principalmente devido à intensa não-uniformidade no meio. Os elevados gradientes de temperatura e concentração de espécies químicas podem ocasionar que a aproximação do  $k$ -correlacionado, utilizada por boa parte dos modelos, não seja verificada. O modelo CW proposto por Solovjov e Webb (2002) é de grande contribuição no que diz respeito à solução do divergente do fluxo radiante de uma forma mais rápida, com boas predições e sem assumir o comportamento espectral baseado na hipótese do  $k$ -correlacionado. No entanto, como será demonstrado neste trabalho, a conservação de energia radiante não é verificada, gerando resultados incorretos para o fluxo de calor radiante.

Este trabalho apresenta uma discussão a respeito dos modelos mais utilizados para o tratamento das propriedades radiantes em gases, especialmente o modelo CW. Como principal objetivo desta pesquisa, propõe-se uma modificação na modelagem CW para que o balanço de energia radiante seja obedecido.

As análises dos resultados são feitas para um sistema unidimensional formado por duas placas planas infinitas e paralelas, separadas por uma camada de gás participante. Considerando-se os produtos gerados pelo processo da combustão estequiométrica do metano e óleo combustível, os gases analisados são o dióxido de carbono e vapor d'água juntamente com gases inertes (nitrogênio e oxigênio). O estudo fará a comparação de resultados gerados a partir da modelagem CW com aqueles presentes na literatura para modelos como MC-ALBDF e LBL. Resultados para meios uniformes serão apresentados como forma de se fazer uma primeira avaliação da estabilidade do modelo. Posteriormente, casos não uniformes serão apresentados e avaliados quanto ao divergente do fluxo de calor radiante, bem como do fluxo de calor. Serão apresentados resultados gerados a partir da aplicação do modelo CW, que serão comparados aos obtidos através da formulação modificada, proposta neste trabalho, e da solução *benchmark* linha-por-linha (LBL).

No trabalho, também será descrita a forma de aquisição dos dados espectrais fornecidos pelo banco de dados HITRAN/HITEMP, bem como o tratamento destes para a geração de espectros de absorção. Será apresentada uma breve discussão a respeito das diferenças entre os bancos de dados espectrais, bem como o cuidado em se assumir que o comportamento espectral das moléculas apresenta um padrão de acordo com a variação da temperatura e/ou concentração da espécie química.

As equações de transporte radiante (RTE) são solucionadas através da aplicação do método das ordenadas discretas.

## 1.2 Organização do Trabalho

Apresenta-se nesta seção a forma de distribuição dos assuntos abordados na tese e nos capítulos seguintes.

Capítulo 1: Introdução

**Capítulo 2: Radiação em meios participantes e modelos para solução** – Apresenta uma breve discussão da teoria de transferência de energia radiante. Apresenta a formulação, quanto à absorção e emissão, utilizada na avaliação da energia radiante para problemas

envolvendo meios participantes, bem como a aplicação na equação de transporte radiante (RTE – *Radiative Transport Equation*). Discute a avaliação das propriedades espectrais em geral, abordando os conceitos de bandas de absorção-emissão e as linhas espectrais de gases. Uma breve apresentação dos mecanismos físicos presentes na absorção/emissão de energia é feita, juntamente com a aplicação dos conceitos referentes ao alargamento das linhas espectrais e como as mesmas se dão matematicamente de acordo com perfis definidos. São apresentados os modelos de gases participantes mais conhecidos, suas características e formulação.

**Capítulo 3: Modelagem das propriedades espectrais dos gases** – É discutido, de forma detalhada, o modelo do número de onda cumulativo (CW), o qual é entendido como o mais moderno no tratamento das propriedades espectrais dos gases. Toda a formulação do modelo é discutida, bem como a sua aplicação à RTE. É apresentado brevemente o método das ordenadas discretas (DOM – *Discrete Ordinates Method*), o qual foi utilizado para a solução da equação de transporte. É identificado o problema da consistência física quanto à conservação de energia do modelo CW sendo, então, apresentada uma proposta para modificação e correção do modelo.

**Capítulo 4: Bancos de dados moleculares** – Os bancos de dados moleculares HITRAN e HITEMP são apresentados. Discute-se a forma como os dados são fornecidos por estes bancos de dados bem como o procedimento para se construir espectros de absorção a partir dos mesmos. A validação para a construção espectral é apresentada.

**Capítulo 5: Resultados** - São apresentados os resultados para meios uniformes e validados a partir de trabalhos presentes na literatura. Os resultados para meios não uniformes, ou seja, homogêneos/não-isotérmicos e não-homogêneos/não-isotérmicos são apresentados para meios compostos por dióxido de carbono, para os modelos CW original e modificado, e comparados à solução linha-por-linha. A geometria para todos os casos corresponde a um sistema unidimensional formado por duas placas planas paralelas contendo o meio participante. Detalhes de simulação e características de computador são apresentados no final deste capítulo.

**Capítulo 6: Conclusões** – Traz as conclusões finais com base nos casos simulados. Apresenta as vantagens e desvantagens principais. Sugestões de continuidade da pesquisa são propostas no final do capítulo.

## 2 RADIAÇÃO EM MEIOS PARTICIPANTES E MODELOS ESPECTRAIS PARA SOLUÇÃO

Neste capítulo é tratada a transferência de calor radiante em meios participantes, sendo também apresentados os princípios físicos da radiação térmica quanto ao seu tratamento espectral. As modelagens de gases participantes e o método de solução empregado no problema radiante são também abordados. Os resultados apresentados aqui serão diretamente empregados no Capítulo 3, onde é desenvolvida a formulação matemática do modelo aplicado ao problema em questão.

### 2.1 Fundamentação Teórica para Meios Participantes

O mecanismo da radiação térmica, de uma forma geral, é compreendido como o transporte de energia térmica através de ondas eletromagnéticas emitidas por um meio, seja este sólido, líquido ou gasoso. A temperatura e a radiação térmica emitida refletem o grau de energia interna do meio. Entre suas várias aplicações em engenharia, quanto à análise radiante, cita-se o dimensionamento de sistemas térmicos como câmaras de combustão e geradores de vapor, devido à presença de gases provenientes da queima combustível que ocorre em temperaturas elevadas. Negligenciar o mecanismo de radiação térmica em meios participantes resulta em análises incorretas desses sistemas.

Meios participantes absorvem, emitem e espalham energia radiante. Exemplos incluem: gases como o monóxido e o dióxido de carbono, o metano e o vapor de água. O ar e os gases monoatômicos são transparentes à radiação térmica.

O esforço na modelagem espectral de gases participantes é justificado pela grande variação das propriedades radiantes para esses meios. Como pode ser visto nas Figura 1(a) e (b) as propriedades radiantes de sólidos opacos variam mais suavemente com o comprimento de onda do que as dos gases. As Figura 1(a) e (b) mostram essa tendência para a emitância espectral hemisférica do tungstênio e o coeficiente de absorção do dióxido de carbono.

Há vários tipos de transições de energia que ocorrem nos gases, compostos de moléculas, átomos, íons e elétrons livres, cada qual com níveis diferentes de energia. Atomicamente, o processo de radiação pode ser entendido através do conceito de fóton, a unidade básica de radiação. Emissão e absorção ocorrem quando fótons são liberados e capturados, respectivamente, provocando transições de energia.

Em problemas de engenharia, a análise da radiação térmica geralmente envolve gases que participam com transições nos estados de vibração ou rotação (*bound-bound absorption*) e que, desse modo, têm coeficientes de absorção que variam bruscamente com o comprimento de onda. Neste caso, o fóton é absorvido ou emitido por um átomo ou molécula e não se verifica recombinação de íons e elétrons, mas salto quântico de energia de um estado de vibração, rotação ou eletrônico para outro. De forma que esses saltos de absorção provocam variações de energia, os coeficientes de absorção e emissão são, então, funções que variam abruptamente com o comprimento de onda.

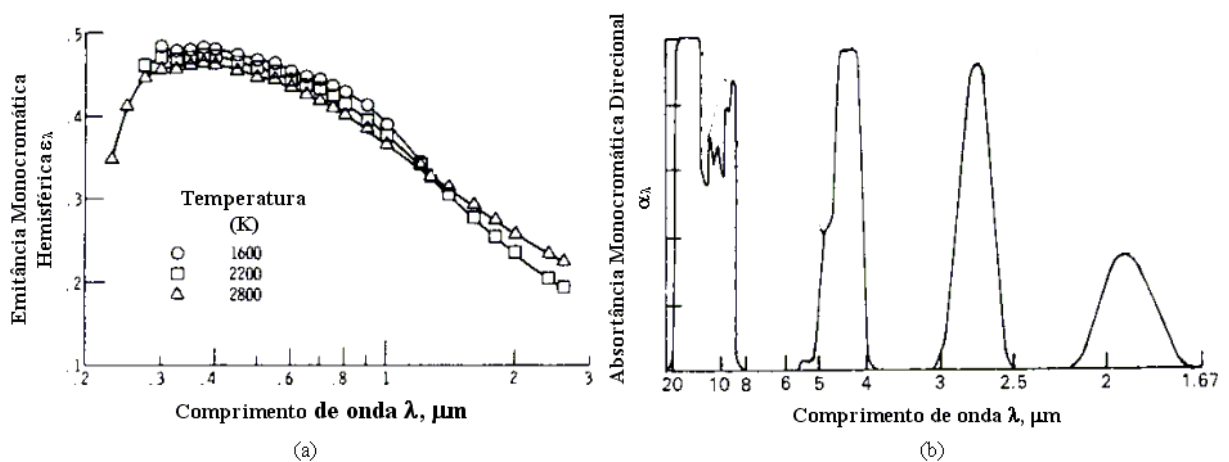


Figura 1 - Comparação entre as propriedades radiantes do tungstênio e dióxido de carbono: efeito do comprimento de onda na (a) emitância espectral hemisférica do tungstênio; (b) absorptância espectral direcional do dióxido de carbono (Siegel e Howell, 2002).

### 2.1.1 Absorção da Radiação Térmica

Da área diferencial  $dA$  da Figura 2, contida em gás participante, sai a taxa de energia radiante espectral  $d^3Q$ , dentro do ângulo sólido  $d\omega$ . A intensidade de radiação  $I_{\lambda}$  é a energia radiante incidente nessa área por unidade de tempo, ângulo sólido e área projetada na direção normal a  $I_{\lambda}$ :

$$I_{\lambda} = \frac{d^3Q}{dA \cos \beta d\omega d\lambda} \quad (2.1)$$



onde  $\beta$  é o ângulo entre a normal da área e a direção do ângulo sólido. Uma importante consequência desta definição é que a intensidade mantém-se constante quando não há atenuação ou emissão no meio.

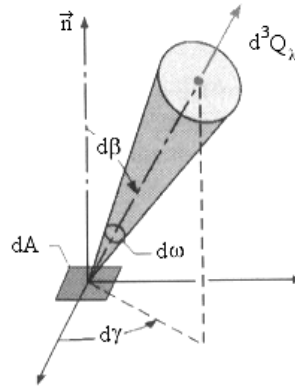


Figura 2 - Geometria para definição da intensidade de radiação em meio participante.

Quando um feixe radiante passa através de uma camada do meio participante, este atenua a energia. Conforme apresentado na Figura 3, a redução na intensidade de radiação atravessando uma camada de meio participante de espessura  $dS$  é proporcional ao produto de  $I_\lambda$  por  $dS$ , sendo a constante de proporcionalidade dada pelo coeficiente de extinção  $\kappa_\lambda$ :

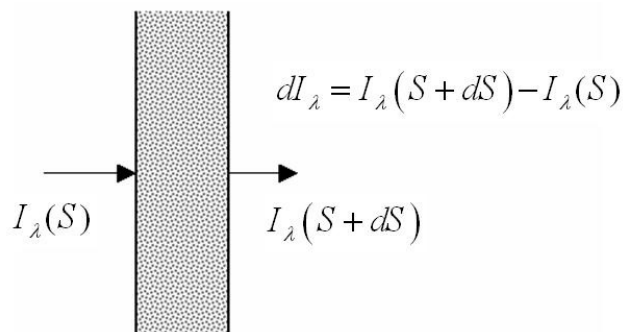


Figura 3 - Absorção de radiação em uma camada de meio participante com espessura infinitesimal  $dS$ .

$$dI_\lambda = -\kappa_\lambda I_\lambda dS \quad (2.2)$$

$\kappa_\lambda$  depende do comprimento de onda  $\lambda$  e das temperatura, pressão e composição do gás ou mistura de gases.

O coeficiente de extinção  $\kappa_\lambda$  é composto pelos coeficientes de absorção,  $a_\lambda$ , e de espalhamento,  $\sigma_\lambda$ . Ele é característico do meio e relaciona-se diretamente ao comprimento de onda da radiação que passa através do mesmo, ou seja, um mesmo meio pode se comportar de maneira diferente em relação a comprimentos de onda distintos. O coeficiente de extinção é definido como:

$$\kappa_\lambda = a_\lambda + \sigma_\lambda \quad (2.3)$$

onde  $a_\lambda$  é o coeficiente de absorção espectral e  $\sigma_\lambda$  é o coeficiente de espalhamento espectral.

Embora o meio também possa espalhar radiação de outras direções, alguns meios como misturas compostas por vapor d'água, dióxido de carbono e ar não espalham energia radiante de forma significativa. O coeficiente de absorção depende da temperatura e pressão do gás e apresenta forte variação com o comprimento de onda. Neste trabalho, não é considerado o espalhamento, de modo que  $\kappa_\lambda = a_\lambda$ . Quando a intensidade atravessa uma camada finita, a Eq.(2.2) deve ser integrada ao longo da trajetória percorrida, resultando em:

$$I_\lambda(S) = I_\lambda(0) \exp[-\xi_\lambda(S)] \quad (2.4)$$

onde  $I_\lambda(0)$  e  $I_\lambda(S)$  são as intensidades nas extremidades inicial e final da trajetória,  $\xi_\lambda$  a espessura óptica ou opacidade. A Eq.(2.4), Lei de Beer-Lambert-Bouguer, mostra que a intensidade de radiação é atenuada exponencialmente ao longo do caminho considerado.

Uma vez que o coeficiente de absorção,  $a_\lambda$ , depende da temperatura, pressão e composição do meio, a espessura óptica  $\xi_\lambda$  também. Esta é uma medida da capacidade do meio de atenuar energia radiante no comprimento de onda  $\lambda$ . Quanto maior a espessura óptica, maior será a atenuação. Nos casos em que se considera o coeficiente de absorção  $a_\lambda$  constante ao longo da trajetória de integração, a espessura óptica se reduz a:

$$\xi_\lambda(S) = a_\lambda S \quad (2.5)$$

Como gases participantes também emitem radiação, a intensidade de radiação emitida na direção  $S$  por um elemento infinitesimal de meio participante com temperatura  $T$  é dada por:

$$dI_\lambda = a_\lambda I_{\lambda b} dS \quad (2.6)$$

onde  $I_{\lambda b}$  é a intensidade de radiação do corpo negro na temperatura  $T$ .

Uma vez que neste trabalho o coeficiente de extinção não é considerado composto pela parcela do espalhamento,  $\sigma_\lambda$ , o coeficiente de extinção,  $\kappa_\lambda$ , passa a ser tratado como coeficiente de absorção.

### 2.1.2 Emissão de um Volume do Meio Participante

Para a emissão da energia no interior do meio considera-se um elemento de volume  $dV$  do meio como mostra a Figura 4, com coeficiente de absorção  $\kappa_\lambda(\lambda, T, P)$ . Assume-se  $dV$  no centro de uma grande esfera negra oca de raio  $R$  à temperatura uniforme,  $T$ . O espaço entre  $dV$  e a fronteira da esfera é preenchido com meio não-participante. A intensidade espectral incidente à  $dA_s$ , em  $dV$ , advinda do elemento  $dA$  na superfície da esfera, é  $I_\lambda(S, 0) = I_{\lambda b}(\lambda, T)$ . A mudança desta intensidade em  $dV$  como resultado da absorção é, a partir da Eq.(2.6),  $-I_\lambda(0)\kappa_\lambda dS = -I_{\lambda b}(\lambda, T)\kappa_\lambda dS$ . A energia absorvida pelo volume infinitesimal  $dS dA_s$  é  $I_{\lambda b}(\lambda, T)\kappa_\lambda dS dA_s d\lambda d\omega$ , onde o ângulo sólido é  $d\omega = dA/R^2$  e  $dA_s$  é uma área projetada normal à  $I_\lambda(0)$ . A energia emitida por  $dA$  e absorvida por todo o volume  $dV$  é encontrada pela integração sobre  $dV$  (sobre todos os elementos  $dA_s dS$ ) para obter  $\kappa_\lambda I_{\lambda b}(\lambda, T) dV d\lambda d\omega$  em que  $d\omega$  é o ângulo sólido subtendido por  $dA$  quando visto a partir de  $dV$ . Para considerar toda energia incidente em  $dV$  emitida de todas as superfícies infinitesimais da esfera, integra-se todos os ângulos sólidos e o resultado é dado por  $4\pi\kappa_\lambda I_{\lambda b}(\lambda, T) dV d\lambda$ .

Para que seja mantido o equilíbrio na cavidade esférica,  $dV$  deve emitir energia igual àquela absorvida,  $4\pi\kappa_\lambda I_{\lambda b}(\lambda, T) dV d\lambda$ . Assim, toda a emissão espectral por um elemento de volume isotérmico é

$$4\pi\kappa_\lambda(\lambda, T, P) I_{\lambda b}(\lambda, T) dV d\lambda = 4\kappa_\lambda(\lambda, T, P) e_{\lambda b}(\lambda, T) dV d\lambda \quad (2.7)$$

onde  $e_{\lambda b}$  é o poder emissivo espectral do corpo negro. A validade da Eq.(2.7) está condicionada na consideração de que  $dV$  é pequeno o suficiente para que toda energia emitida no seu interior escape antes da reabsorção no interior do volume.

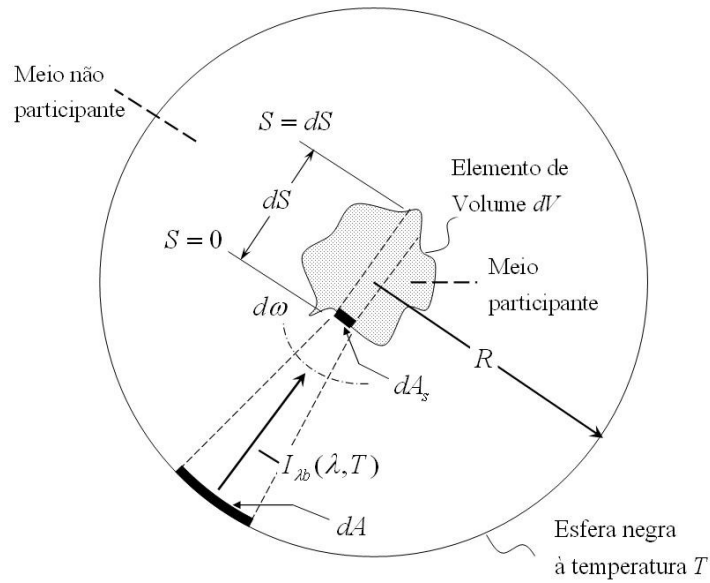


Figura 4 – Geometria para dedução da emissão de um volume de meio participante.

Em todas as condições desta análise, a emissão térmica é considerada uniforme em todas as direções (isotrópica), assim a intensidade espectral emitida por um elemento de volume em qualquer direção,  $dI_\lambda$ , é obtida a partir da divisão por  $4\pi d\lambda$  e da área da seção-transversal.

$$dI_\lambda(\lambda, T, P) = \kappa_\lambda(\lambda, T, P) I_{\lambda b}(\lambda, T) dS \quad (2.8)$$

### 2.1.3 Equação do Transporte Radiante – RTE

Considera-se a intensidade de radiação  $I_\lambda(S)$  ao longo de um caminho  $S$  no interior de um meio emissor-absorvedor. Como a radiação que passa através do comprimento de caminho  $dS$  ao longo de  $S$  sua intensidade é reduzida pela absorção, Eqs.(2.2) e (2.3),

$$dI_{\lambda, \text{absorvida}}(S, \omega) = -\kappa_\lambda(S) I_\lambda(S, \omega) dS \quad (2.9)$$

onde  $\omega$  representa a dependência do ângulo sólido. A contribuição à intensidade na direção  $S$  pela emissão ao longo de  $dS$  é dada pela Eq.(2.8), é reescrita na forma

$$dI_{\lambda, \text{emitida}}(S, \omega) = \kappa_\lambda(S) I_{\lambda b}(S) dS \quad (2.10)$$

Desta forma, a variação na intensidade de radiação com  $S$ , no ângulo sólido  $d\omega$  na direção  $S$ , sem a consideração de espalhamento é

$$\frac{dI_\lambda}{dS} = \underbrace{-\kappa_\lambda(S)I_\lambda(S)}_{\text{redução pela absorção}} + \underbrace{\kappa_\lambda(S)I_{\lambda b}(S)}_{\text{aumento pela emissão}} \quad (2.11)$$

A Eq.(2.11) é conhecida como equação da transferência radiante – ETR (*RTE – Radiative Transfer Equation*) para meios que absorvem e emitem, mas não espalham, a radiação.

## 2.2 Bandas de Absorção-Emissão e Linhas Espectrais de Gases

### 2.2.1 Mecanismos Físicos

De acordo com Siegel e Howell (2002), gases que atuam como meios participantes em radiação térmica são considerados o ponto mais importante em problemas de engenharia que consideram o fenômeno da transferência de calor radiante.. A absorção ou emissão por gases é significativa somente em certas regiões de número de onda, especialmente quando a temperatura do gás se encontra pouco abaixo dos 2600 K, que é uma temperatura comum em câmaras de combustão.

Um gás radiante pode ser composto de moléculas, átomos, íons e elétrons livres que podem estar em diferentes níveis de energia. Em uma molécula, os átomos formam um sistema dinâmico com modos de vibração e rotação que possuem níveis específicos de energia. Um maior detalhamento a respeito dessas variações em níveis de energia é apresentado por Siegel e Howell (2002).

A consideração de meios participantes nos cálculos para a obtenção dos fluxos radiantes tem como principal dificuldade o tratamento das propriedades espectrais do meio. Como já discutido anteriormente, o coeficiente de absorção,  $\kappa_\lambda$ , depende significativamente da temperatura, pressão e concentração das espécies químicas que constituem o meio. A variação de uma dessas variáveis, ou delas em conjunto, faz com que o coeficiente de absorção sofra alterações bastante irregulares, tornando difícil sua determinação. Uma outra dificuldade quando se levam em conta meios participantes é que em cada intervalo espectral o

coeficiente de absorção se comporta de maneira diferente, tornando os cálculos dos fluxos radiantes significativamente extensos.

Conforme Ribeiro (2006) os níveis rotacionais-vibracionais de uma determinada molécula estão diretamente relacionados com a frequência em que as transições serão observadas, porém, para a obtenção da temperatura e da fração molar da espécie no meio, é necessário, também, o conhecimento de informações a respeito da intensidade e da forma das linhas de absorção. A determinação experimental de intensidades de transições moleculares envolve um procedimento complexo e que em muitas vezes não fornece resultados confiáveis. Apesar disso, são parâmetros muito importantes na obtenção de concentração e temperatura de espécies gasosas por meio espectroscópico. Uma boa compreensão dos dados de intensidade de linhas espectrais passa por um entendimento de como os cálculos são realizados e da conversão entre as mais diversas unidades encontradas em trabalhos de literatura.

A maioria das intensidades de linhas é derivada de medições de espectros de absorção das moléculas. Em maior detalhe, são discutidos os cálculos para avaliação espectral de gases moleculares em Ribeiro (2006).

Atualmente pode-se contar com alguns bancos de dados, como HITRAN e HITEMP, que permitem, de forma bastante detalhada, a determinação de propriedades radiantes de algumas espécies químicas, através de procedimentos de integração linha-por-linha. Como já discutido anteriormente, esses procedimentos tornam os cálculos de troca radiante ainda mais dispendiosos computacionalmente.

Contornar as dificuldades na avaliação das propriedades radiantes de gases tem motivado a elaboração de modelos e métodos de solução, tornando viável a inclusão da radiação térmica em problemas de engenharia em que meios participantes estão envolvidos.

### **2.2.2 Alargamento de Linha Espectral**

As linhas de absorção ou emissão de radiação exibem uma largura finita, resultante de vários mecanismos de alargamento. Para a espectroscopia de absorção, os principais alargamentos são o Doppler, o natural, o por pressão (ou colisões), o Stark, e o alargamento devido à resolução instrumental (Rao, 1985; Siegel e Howell, 2002). Cada processo de alargamento contribui com um diferente perfil de linha e o espectro final será o resultante da convolução dos processos de alargamento individuais. Em aplicações de engenharia, tais

como câmaras de combustão, o tipo de alargamento de linha mais importante é o por colisão ou pressão (Siegel e Howell, 2002).

**Alargamento por Pressão:** com o aumento da pressão de um gás, a taxa de colisão por um átomo ou molécula é, também, aumentada. As colisões podem perturbar os estados de energia dos átomos (ou moléculas), resultando no alargamento das linhas espectrais. Quanto maior a densidade de moléculas presentes, maior será este alargamento. O alargamento por pressão depende da espécie que está colidindo com a molécula absorvedora e os dados são, normalmente, obtidos experimentalmente. Linhas de absorção originadas de diferentes transições rotacionais-vibracionais podem apresentar diferentes comportamentos quanto ao alargamento por pressão. O alargamento por pressão é um alargamento homogêneo e a linha apresenta um perfil de Lorentz, o qual tem a mesma forma do alargamento natural.

$$\frac{\kappa_{\eta}(\eta)}{S_i} = \frac{\gamma_i/\pi}{\gamma_i^2 + (\eta - \eta_i)^2} \quad (2.12)$$

onde  $\eta$  é o número de onda,  $1/\lambda$ ;  $S$  é a intensidade da linha espectral;  $\gamma$  é a meia-largura de colisão (ou pressão) e o sub-índice  $i$  relaciona a propriedade em questão à cada linha espectral.

O coeficiente de alargamento por pressão depende da temperatura, sendo esta dependência dada por:

$$\gamma_i(T) = \gamma_i(T_0) Y_s \left( \frac{T_0}{T} \right)^n + (1 - Y_s) \gamma_{ar,i} \quad (2.13)$$

onde  $T_0$  é alguma temperatura padrão (normalmente, 296 K, 298 K ou 300 K, dependendo da versão banco de dados);  $Y_s$  é a concentração da espécie química;  $\gamma(T_0)$  é referente a meia-largura da molécula na temperatura padrão. O coeficiente  $n$  tem o valor 0,5, teoricamente, mas experimentalmente, verifica-se que ele pode ter valores diferentes dependendo do gás absorvedor, da molécula responsável pela interação e dos números quânticos rotacionais e vibracionais envolvidos na transição. Trata-se de um valor também fornecido pelos bancos de dados disponíveis.

## 2.3 Modelos de Gases Participantes

Para a avaliação das propriedades de gases participantes existem diversos modelos que podem ser seguidos. Estes foram desenvolvidos de modo a levarem em consideração a estrutura espectral da radiação gasosa. Dois tipos de modelos são aplicados para as bandas de absorção e emissão, sendo os seguintes: os modelos de banda-estreita (*Narrow-band models*) e modelos de banda-larga (*Wide-band models*). O primeiro utiliza-se das características individuais do formato das linhas, larguras e espaçamentos para derivar as características de banda dentro de um intervalo específico de número de onda. O segundo fornece correlações das características da banda sobre toda a região de número de onda que cobre esta banda, e considera a crescente importância das linhas de absorção fracas enquanto o comprimento de caminho da radiação se torna longo. Neste trabalho a abordagem é feita dentro do conceito do primeiro tipo de modelo, para o qual existem vários trabalhos na literatura os quais trazem diferentes métodos para se efetuar este tipo de modelagem.

A seguir, são apresentados os principais modelos elaborados para o tratamento das propriedades espectrais dos gases.

### 2.3.1 Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas (WSGG)

A modelagem inicial para meios participantes partiu da hipótese de gás cinza, que segue a mesma teoria da superfície cinza, ou seja, apresenta coeficiente de extinção independente do comprimento de onda da radiação.

Supondo-se um gás participante com temperatura uniforme e estabelecida uma trajetória  $S$ , sua emitância direcional espectral,  $\varepsilon_\lambda$ , é dependente desta trajetória, da temperatura e da pressão do gás. A modelagem prevê a divisão do espectro 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. A emitância de um gás isotérmico é expressa por (Hottel e Sarofim, 1967).

$$\varepsilon_g = \sum_{j=0}^J C_{e,j}(T) [1 - \exp(-\kappa_j S)] \quad (2.14)$$

onde  $C_{e,j}$  representa o fator de ponderação, ou peso, do  $j$ -ésimo gás cinza.



Embora o coeficiente de absorção apresente comportamento descontínuo no espectro de radiação é possível dividir esse espectro em  $J$  regiões onde o coeficiente de absorção pode ser considerado constante. Essas regiões podem ser contínuas ou não no espectro.

Assim, a emitância do gás real pode ser entendida como a soma ponderada das emitâncias dos gases cinzas "contidos" no seu espectro de radiação, sendo o fator de ponderação função apenas da temperatura.  $C_{e,i}$  são os termos de ponderação, função apenas da temperatura.

Smith *et al.* (1982) apresentaram coeficientes de absorção para gases cinzas e correlações para a obtenção dos termos de ponderação. Galarça *et al.* (2008) obtiveram novos valores para esses coeficientes de absorção, bem como novos termos de ponderação através de resultados ajustados a partir da função ALBDF. A incorporação do modelo da soma-ponderada-de-gases-cinzas na equação de transporte radiante foi feita por Modest (1991). Assim,

$$\frac{dI_j}{dS} = \kappa_j \left( C_{e,j} \frac{\sigma T^4(S)}{\pi} - I_j(S) \right) \quad (2.15)$$

A Eq.(2.15) pode ser utilizada com qualquer técnica de solução da ETR.

### 2.3.2 A Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas Baseada em Linhas Espectrais (SLW)

Denison e Webb (1993a) desenvolveram uma aproximação que se baseia no modelo WSGG. A diferença fica por conta da forma de obtenção dos coeficientes de absorção e dos pesos. Em sua aproximação, estes são calculados a partir de dados linha-por-linha ponderados pela distribuição espectral de corpo negro e integrados sobre as bandas estreitas. Esta aproximação é conhecida como Soma-Ponderada-de-Gases-Cinzas Baseada em Linhas Espectrais (*Spectral-Line-Weighted Sum-of-Gray-Gases*, SLW).

Os pesos e coeficientes de absorção são obtidos pela aplicação do método SLW (Denison e Webb, 1995b). Uma função distribuição de corpo negro é definida como sendo a fração da energia de corpo negro nas porções do espectro onde o coeficiente de absorção espectral molar,  $C_{abs,\eta}$ , é menor do que um valor prescrito  $C_{abs}$ . Esta é conhecida como ALBDF (*Absorption-Line Blackbody Distribution Function*), conforme apresentado na Figura 5. A função, para uma substância arbitrária, é expressa por

$$F(C_{abs}, T_b, T_g, P, Y_s) = \frac{\pi}{\sigma T_b^4} \sum_j \int_{\Delta\eta_j(C_{abs}, T_g, P, Y_s)} I_{b\eta}(\eta, T_b) d\eta \quad (2.16)$$

O sub-índice  $j$  é referente ao  $j$ -ésimo segmento espectral e o somatório é feito sobre todos os segmentos que cobrem o espectro inteiro. A função é dependente do valor da seção-transversal de absorção (ou coeficiente de absorção molar),  $C_{abs}$ ; da temperatura da fonte negra  $T_b$ ; da temperatura do gás  $T_g$ ; da pressão total  $P$ ; e da fração molar das espécies  $Y_s$ .

O comportamento da função distribuição ALB, Eq.(2.16), por exemplo, para um meio composto por 100% de vapor d'água à temperatura  $T_g$  de 1000 K e  $T_b$  de 500 K é mostrado na Figura 6. Foram comparados resultados obtidos a partir do banco de dados HITRAN de 1992 com o atual banco de dados, HITRAN 2006. Como pode ser observada, a diferença entre as duas funções não é significativa para este caso, no entanto a diferença entre os bancos de dados não deve ser desconsiderada, conforme será discutido mais adiante.

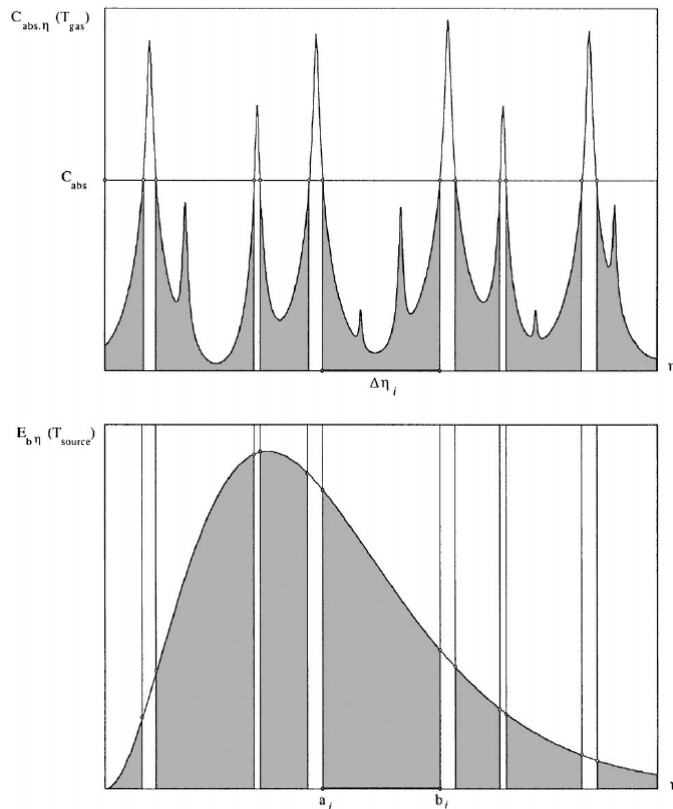


Figura 5 – Fragmentação da função distribuição de Planck para cálculo da função ALBDF.

(Solovjov e Webb, 2000)

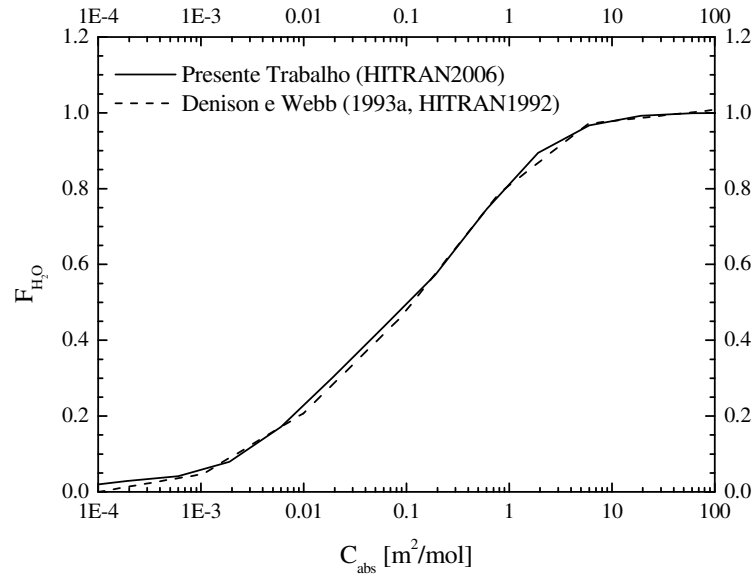


Figura 6 - Função ALB gerada por Denison e Webb (1993a) e gerada no presente trabalho.

Meio: 100% de H<sub>2</sub>O, T<sub>g</sub> = 1000 K, T<sub>b</sub> = 500 K.

Com base nessa função distribuição, Denison e Webb (1993b) propuseram uma correlação para gases usuais como meios absorvedores/emissores para simplificar a aplicação do método SLW.

### 2.3.3 Integração Linha-por-Linha (LBL)

O método de integração linha-por-linha envolve o uso de dados espectrais das linhas de bandas-frias na geração de dados para as linhas de bandas-quentes. Os parâmetros de um modelo aleatório-estatístico são calculados a partir das linhas de banda conhecidas pela espectroscopia.

Atualmente os dados espectrais são apresentados em bancos de dados, como HITRAN, HITEMP e CDSD-1000, sendo possível reproduzir o comportamento espectral de algumas espécies (como H<sub>2</sub>O e CO<sub>2</sub>) sob diversas condições. A partir desses dados, o coeficiente de extinção espectral molar,  $\kappa_{\lambda,m}$ , pode ser obtido. Esse coeficiente equivale ao coeficiente de extinção apresentado anteriormente, Eq.(2.3), porém é relativo ao comportamento espectral (emissão/absorção) de uma molécula da espécie e não de uma camada de meio participante. Sua unidade é dada em m<sup>2</sup>/mol. Os cálculos linha-por-linha são baseados em uma série de correlações (Hartmann, 1984), e o coeficiente espectral de absorção para determinado número de onda é:

$$\kappa_{\eta} = \sum_{\text{todas as linhas}} \kappa_{\eta_0} = \sum_{\text{todas as linhas}} F(\eta) S_{\eta_0}(T, P, Y_{H_2O}, Y_i) \quad (2.17)$$

onde  $\kappa_{\eta_0}$  é o coeficiente de absorção de uma linha isolada;  $T, P, Y_{H_2O}, Y_i$  são, respectivamente, a temperatura, a pressão total, a fração molar de  $H_2O$ , e a fração molar das espécies  $i$ ;  $F(\eta)$  é a forma da linha normalizada e  $S_{\eta_0}$  é a intensidade de uma linha central em  $\eta_0$ .

### 2.3.4 Método da Distribuição- $k$

Com o propósito de encontrar soluções para a transferência de energia radiante total, as equações de transporte radiante podem ser resolvidas em vários intervalos espectrais e, então, feita a integração para a energia espectral. Uma vez que  $\kappa_{\eta}$  varia de forma significativa com  $\eta$ , esta integração requer a solução das equações de transferência para vários intervalos espectrais.

O método da Distribuição- $k$  é uma transformação para reduzir a extensão dos cálculos. O método utiliza a hipótese de que a intensidade espectral de corpo negro local não varia consideravelmente sobre uma banda de absorção e pode ser tratada como constante sobre a largura da banda. A intensidade espectral dentro da banda depende, assim, somente da função distribuição de  $\kappa_{\eta}$  (por isso o nome do método), não sendo mais dependente da intensidade espectral de corpo negro.

A integração de uma função arbitrária  $H[\kappa_{\eta}(\eta)]$  sobre o número de onda pode ser substituída por uma integração sobre o coeficiente de absorção, assim:

$$\frac{1}{\Delta\eta_l} \int_{\Delta\eta_l} H[\kappa_{\eta}(\eta)] d\eta = \int_{\kappa_{\eta}=0}^{\infty} H(\kappa_{\eta}) f(\kappa_{\eta}) d\kappa_{\eta} \quad (2.18)$$

onde  $f(\kappa_{\eta})d\kappa_{\eta}$  é a função densidade de probabilidade do coeficiente de absorção espectral dentro da banda (ou distribuição- $k$ ), o sub-índice  $l$  se refere à  $l$ -ésima banda de absorção.

A função densidade de probabilidade (ou simplesmente, função distribuição) deve ser gerada para uma dada banda-estreita, o que é normalmente feito pela utilização de um modelo qualquer de banda-estreita. Pelo modelo de Malkmus (Siegel e Howell, 2002) essa função pode ser:

$$f(\kappa_\eta) = \left[ \frac{\bar{S} \bar{\gamma}}{4 \bar{\delta}^2 \kappa_\eta^3} \right] \exp \left\{ \left( \frac{\pi \bar{\gamma}}{4 \bar{\delta}} \right) \left[ 2 - \left( \frac{\kappa_\eta \bar{\delta}}{\bar{S}} \right) - \left( \frac{\bar{S}}{\kappa_\eta \bar{\delta}} \right) \right] \right\} \quad (2.19)$$

onde  $\bar{S}$ ,  $\bar{\gamma}$  e  $\bar{\delta}$  são a intensidade média de linha, a meia largura média, e o espaçamento médio, respectivamente.

O método da Distribuição- $k$  se apresenta ineficiente quando as propriedades ou as temperaturas são não-homogêneas através do volume, pois uma nova função distribuição deve ser computada para cada nó computacional no interior de um meio não-homogêneo.

### 2.3.5 O Método do $k$ -Correlacionado

Quando as propriedades das espécies variam com a posição, o modelo (ou distribuição) do  $k$ -Correlacionado (CK) pode ser empregado. Este método assume que sobre uma faixa espectral estreita, as oscilações abruptas do coeficiente de absorção,  $\kappa_\eta$ , ficam em torno de um mesmo valor se observadas para pequenas variações do número de onda. Quando o coeficiente de absorção apresenta valores muito próximos, a intensidade de radiação  $I_\eta$  (conseqüentemente, o fluxo radiante) não se altera. Assim, para um determinado estado termodinâmico, assume-se que aquela pequena faixa de números de onda apresenta um coeficiente de absorção  $\kappa_\eta$  que pode servir como parâmetro para um outro estado termodinâmico (na mesma região do espectro), e correlacionar um coeficiente de absorção  $\kappa_\eta^*$ . A Figura 7 descreve a idéia do modelo.

O método pode ser aplicado tanto aos modelos de banda-estreita quanto aos de banda-larga se a função distribuição de Planck não variar significativamente através da banda, e com espalhamento, se o coeficiente de espalhamento e função fase não variarem ao longo da largura espectral da banda (Goody *et. al.*, 1989).

A função distribuição do coeficiente de absorção,  $f(\kappa_\eta) d\kappa_\eta$ , pode ser usada para computar a *função distribuição cumulativa* (CDF),  $g(\kappa_\eta)$ , pela seguinte relação:

$$g(\kappa_\eta) = \int_{\kappa_\eta=0}^{\kappa_\eta} f(\kappa_\eta^*) d\kappa_\eta^* \quad (2.20)$$

Com esta função distribuição cumulativa, CDF, pode-se calcular a transmitância média sobre um comprimento de caminho  $S$  dentro de uma banda de absorção por:

$$\bar{\Gamma}_l(S) = \int_{g=0}^1 \exp[-\kappa_\eta(g)S] dg \quad (2.21)$$

onde  $\bar{\Gamma}_l$  é a transmitância média numa banda de absorção,  $\kappa_\eta(g)$  é o coeficiente de absorção espectral avaliado no valor  $g$  da CDF.

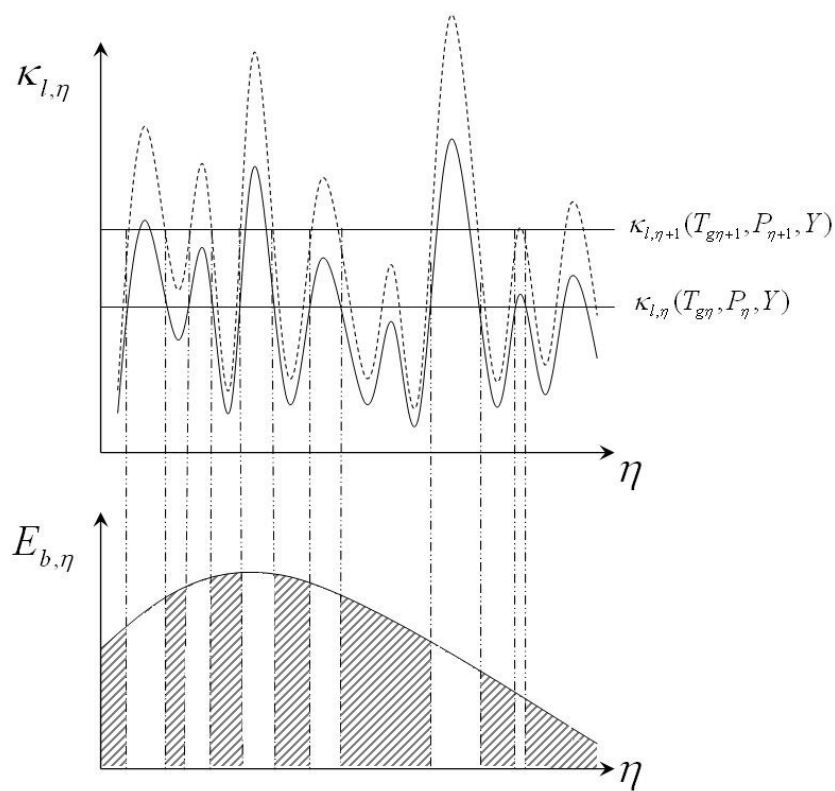


Figura 7 – Esquema representativo da hipótese do modelo  $k$ -Correlacionado.

No caso das propriedades de absorção variarem com a posição, a Eq. (2.21) pode ser reescrita na forma:

$$\bar{\Gamma}_l(S) = \int_{g=0}^1 \exp\left[-\int_0^S \kappa_\eta(g, S^*) dS^*\right] dg \quad (2.22)$$

Relações para  $f(\kappa_\eta)$  são apresentadas por Marin e Buckius (1996) para bandas estreitas e fornecem parâmetros de espaçamento de linha e alargamento por pressão.

### 2.3.6 A Função Distribuição Multi-Escala do $k$ -Correlacionado para o Espectro Completo

Modest e Zhang (2002) desenvolveram um modelo chamado de  $k$ -Correlacionado para o Espectro Completo (FSCK – *Full-Spectrum Correlated-k Distribution model*), o qual é uma extensão do  $k$ -Correlacionado para todo o espectro pela definição de uma fração da função de Planck. Desta forma, combinaram-se todas as vantagens do modelo CK com as vantagens apresentadas pelos modelos globais. O modelo se mostrou mais preciso, mas como qualquer método que correlaciona os coeficientes de absorção, a perda de precisão aparece para problemas que envolvam mudanças extremas de temperaturas. Outro ponto observado é que as fortes taxas de mudança da fração molar aparecem como obstáculo nas hipóteses da aproximação de escala, que é a chave dos métodos CK.

Mais recentemente, Zhang e Modest (2002) desenvolveram o modelo da Função Distribuição Multi-Escala do  $k$ -Correlacionado para o Espectro Completo (MSFSCK – *Multi-Scale Full-Spectrum Correlated-k Distribution model*). Neste, o gás (ou mistura de gases) é dividido em diferentes grupos de acordo com os diferentes perfis de fração molar (para diferentes espécies absorvedoras) e/ou agrupados de acordo com o nível mais baixo de energia de suas linhas de absorção (para cada espécie absorvedora), gerando  $M$  equações de transporte independentes (RTE) independentes para cada um dos  $M$  grupos. A sobreposição entre os diferentes grupos é tratada de uma forma aproximada para limitar o custo computacional.

### 2.3.7 O Modelo do Número de Onda Cumulativo

Desenvolvido por Solovjov e Webb (2002), o modelo do Número de Onda Cumulativo (CW- *Cumulative Wavenumber model*) é um dos tratamentos mais modernos em termos de propriedades espectrais de gases. Nele, o número de onda cumulativo é dependente direto de valores específicos do coeficiente de extinção molar e do número de onda, assim,  $w = w(C_{abs}, \eta)$ . O modelo foi selecionado para os estudos neste trabalho por se apresentar como um dos mais precisos quando comparado ao *benchmark*, LBL. Além disso, conforme os

autores, o custo computacional é consideravelmente baixo. Outra vantagem relacionada pela literatura diz respeito à forma de integração empregada pelo método, a qual não produz termos de Leibnitz (negligenciados em métodos que usam a função ALB). Para contornar este problema esses modelos utilizam a hipótese do  $k$ -correlacionado, que é uma aproximação limitada e não descreve o comportamento espectral real de gases participantes. A não utilização desta simplificação é significativa para a implementação do método, pois em casos de extremas variações no campo de temperatura a necessidade de uma predição mais precisa do mecanismo radiante é essencial para análises precisas. O Capítulo 3 deste trabalho aborda em maior detalhe a modelagem CW, central nesta tese.



### 3 MODELAGEM DAS PROPRIEDADES ESPECTRAIS DOS GASES ATRAVÉS DO MÉTODO CW

Este capítulo trata da modelagem espectral para gases e misturas de gases como meios participantes. É descrito o método do Número de Onda Cumulativo (CW), bem como é feita a análise da aplicação da equação de transporte radiante (RTE) e de suas respectivas condições de contorno a partir da modelagem CW. O modelo apresenta o tratamento para gases reais. Os resultados obtidos são aplicados juntamente com o método de solução da equação radiante utilizado neste trabalho, ordenadas discretas (DOM).

#### 3.1 O Método do Número de Onda Cumulativo (CW)

##### 3.1.1 Definição

As funções distribuição são normalmente definidas com base nas seções transversais da distribuição espectral de alta resolução do coeficiente de absorção molar. Espectros moleculares de gases contêm centenas de milhares de linhas de absorção, que não podem ser diretamente empregadas, de modo eficiente, nos cálculos de transferência radiante. Funções de distribuição, por outro lado, permitem organizar as informações espectrais para a integração da equação da transferência radiante no comprimento de onda. Nesta seção, apresenta-se uma dessas funções, denominada número de onda cumulativo.

Considera-se uma seção-transversal de absorção de um gás molecular,  $C_\eta$  ( $\text{cm}^2 \text{molecula}^{-1}$ ), a qual é uma função do número de onda  $\eta$ . Para qualquer valor fixo de seção-transversal,  $C$ , e número de onda,  $\eta$ , é definido o *número de onda cumulativo* pela seguinte relação:

$$w(C, \eta) = \begin{cases} \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) + (\eta - \eta^*) & \text{para } C_\eta < C \\ \sum_{i=1}^L (\beta_i - \alpha_i) & \text{para } C_\eta \geq C \end{cases} \quad (3.1)$$

onde os intervalos de números de onda,  $\alpha_i$  e  $\beta_i$ , são obtidos pela intersecção das seções-transversais,  $C_\eta$ , com a linha em que  $C_\eta = C$ , e  $\eta^*$  é o maior numero de onda da intersecção para

o caso quando, para o número de onda variável  $\eta$ , a seção-transversal de absorção  $C_\eta$  é menor do que um valor  $C$ . Isto pode ser visto na Figura 8. É facilmente observado, a partir de sua definição, que o número de onda cumulativo é uma função crescentemente contínua de  $\eta$ .

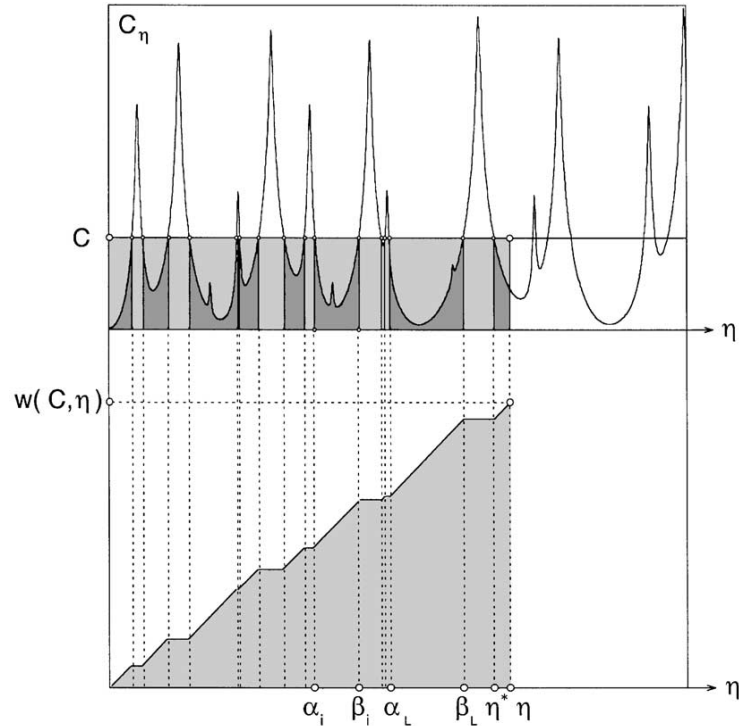


Figura 8 – Número de onda cumulativo da seção-transversal de absorção  
(Solovjov e Webb, 2002)

Mais formalmente, o número de onda cumulativo pode ser descrito conforme Eq.(3.2) (Salinas, 2008).

$$w(C, \eta) = \int_0^\eta H(C - C_\eta) d\eta \quad (3.2)$$

onde  $H(C - C_\eta)$  é definido como função-escada de Heaviside.

### 3.1.2 Integração e Derivação

Conforme sua definição, o número de onda cumulativo  $w(C, \eta)$  cresce linearmente com  $\eta$  para aqueles valores de número de onda  $\eta$  onde  $C_\eta$  é menor do que o valor  $C$ , e permanece

constante para qualquer outro. O caso extremo do número de onda cumulativo é o que descreve uma linha única e retilínea, quando o valor  $C$  é maior do que todo o espectro de absorção; neste caso,  $C_\eta$  é igual a  $\eta$ . Portanto, a derivada da Eq.(3.2) com respeito ao número de onda,  $\eta$ , produz:

$$\frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} = H(C - C_\eta) = \begin{cases} 1 & \text{para } C > C_\eta \\ 0 & \text{para } C \leq C_\eta \end{cases} \quad (3.3)$$

A equação acima permite a substituição pela integração com respeito à variável independente  $\eta$  sobre a região espectral definida pelo espectro de absorção molecular. Integrando com respeito ao número de onda cumulativo, tem-se:

$$\int_{\{\eta: C > C_\eta\}} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} H(C - C_\eta) d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} \frac{\partial w(C, \eta)}{\partial \eta} d\eta = \int_{\eta=0}^{\infty} dw(C, \eta) \quad (3.4)$$

O domínio de integração do termo do lado esquerdo da Eq.(3.4) é uma união dos intervalos de número de onda definidos pela intersecção da linha  $C_\eta = C$  com o espectro de absorção do gás. O domínio de integração é um conjunto bastante complicado que pode conter centenas de milhares de intervalos. O termo ao lado direito da Eq.(3.4) é simplesmente um conjunto de todos os números de onda, o que na prática são alguns intervalos finitos. Esta propriedade é a principal ferramenta para a integração espectral das equações de transporte radiante (RTE).

### 3.1.3 O Número de Onda Cumulativo e a Dependência da Fração Molar

Segundo Solovjov e Webb (2002), a dependência do modelo CW com relação à fração molar das espécies químicas segue da mesma forma como utilizado para a modelagem ALBDF. Desta forma, negligenciando-se o efeito de auto-alargamento e tendo-se  $w_{C_\eta}$  e  $w_{YC_\eta}$  como sendo valores de números de onda cumulativo de seções-transversais de absorção  $C_\eta$  e  $YC_\eta$ , respectivamente, os valores da função CW não variam com mudança da fração molar,  $Y$ . Isto pode ser visto na Figura 9, onde as intersecções da seção-transversal  $C$  com o espectro  $YC_\eta$  produzem os mesmos intervalos de número de onda do que as intersecções da seção-transversal  $C/Y$  com o espectro. Assim, a função CW do espectro  $YC_\eta$  para  $C$  é igual à função CW do espectro  $C_\eta$  para  $C/Y$ , conforme a relação

$$w_{YC_\eta}(C, \eta) = w_{C_\eta}(C/Y, \eta) \quad (3.5)$$

A Eq.(3.5) estabelece que, para os casos em que a fração molar das espécies que compõem uma mistura de gás varia no meio, o número de onda cumulativo – função CW – não precisa ser recalculado a partir do espectro molecular.

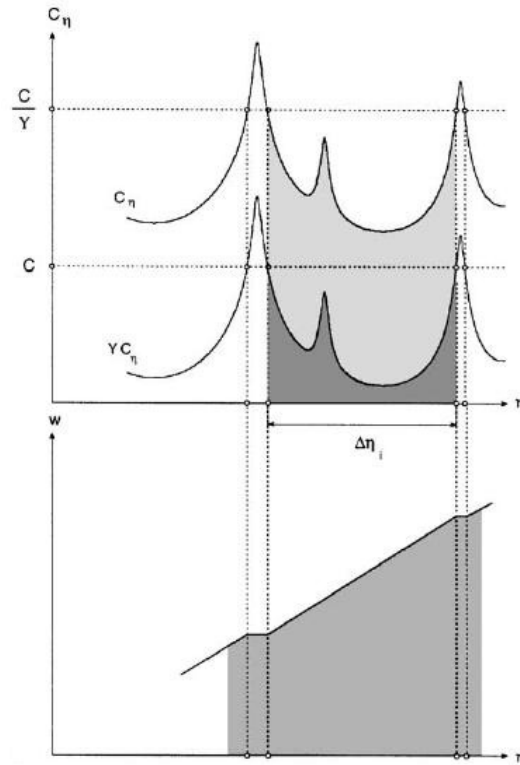


Figura 9 – Dependência da função CW com respeito à fração molar. (Solovjov e Webb, 2002)

### 3.1.4 Mistura de Gases

Para misturas de gases constituídas por  $m$  espécies químicas, assumindo-se que não haja sobreposição de linhas espectrais para as seções-transversais de absorção,  $C_\eta = Y_1 C_1 + Y_2 C_2 + \dots + Y_m C_m$ , o número de onda cumulativo para a mistura pode ser representado como

$$w_{C_\eta}(C, \eta) = w_1 \left( \frac{C}{Y_1}, \eta \right) + w_2 \left( \frac{C}{Y_2}, \eta \right) + \dots + w_m \left( \frac{C}{Y_m}, \eta \right) - (m-1)\eta \quad (3.6)$$

onde  $w_i$  são os números de onda cumulativos de cada espécie que compõe a mistura.

### 3.2 Modelo Espectral

Definida a forma de tratamento dos valores de seções-transversais de absorção,  $C_\eta$ , o próximo passo é estender esta teoria para toda a faixa de valores de  $C_\eta$ . Assim, considera-se uma subdivisão de toda a faixa espectral em “gases cinzas” através das seções-transversais de absorção suplementares,  $C_j$ , para  $j = 1, 2, \dots, n$ , onde  $n$  é o número de gases cinzas considerados. Assumem-se o conjunto  $H_j$  como a união de todos os subintervalos espectrais para os quais o valor atual de  $C_\eta$  esteja entre  $C_j$  e  $C_{j-1}$ , ou seja:

$$H_j = \{\eta : C_{j-1} \leq C_\eta \leq C_j, j = 1, 2, \dots, n\} \quad (3.7)$$

$$\Delta_i = [\eta_{i-1}, \eta_i], i = 1, 2, \dots, p \quad (3.8)$$

A Eq.(3.8) representa uma subdivisão da região de números de onda em subintervalos destes.

O modelo CW utiliza a intersecção dessas subdivisões espectrais para definir os gases cinzas fracionais,  $D_{ij}$ , conforme Eq.(3.9), representado na Figura 10.

$$D_{ij} = \Delta_i \cap H_j \quad (3.9)$$

A união de todos os gases cinza fracionais representa toda a região espectral. Embora  $\Delta_i$  permaneça fixo para qualquer localização no meio participante considerado,  $H_j$  e  $D_{ij}$  podem “flutuar” com a localização, dependendo do estado termodinâmico local do gás.

Esta modelagem é aplicada para subdividir a integração espectral sobre o número de onda em uma integração sobre o gás cinza fracional,  $D_{ij}$ . A subdivisão em gases cinzas  $H_j$  é usada para simplificação das linhas moleculares. Cada gás cinza é representado por um único valor de coeficiente de absorção,  $\kappa_j$ . A subdivisão em intervalos  $\Delta_i$  é utilizada para incorporação da continuidade do espectro e fronteiras não-cinzas, por exemplo, quando o meio contém partículas de fuligem.

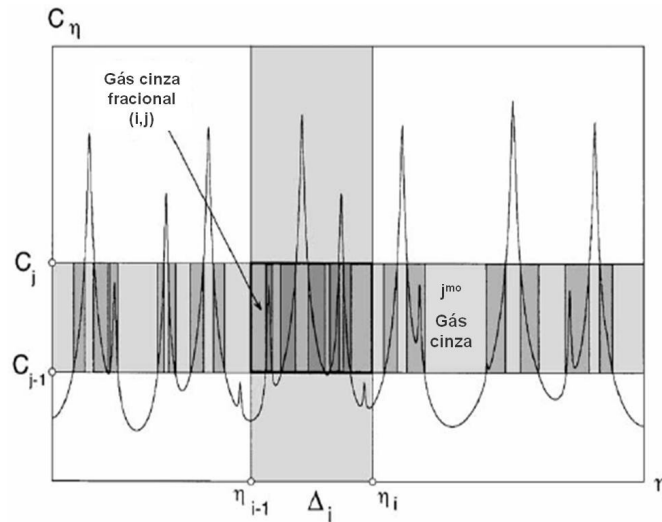


Figura 10 – Modelagem espectral dos gases cinza fracionais.

### 3.3 Correlação Espectral-Local

O modelo permite a suposição de uma correlação espectral local, a qual é descrita a seguir. A função CW,  $w(C, \eta)$ , é definida a partir do coeficiente de absorção espectral,  $C_\eta$ , a qual é uma função do estado termodinâmico local dos gases (temperatura, pressão parcial, concentrações de espécies). Em um meio não-isotérmico e não-homogêneo, cada localização ao longo de um comprimento de caminho,  $s$ , é caracterizada por próprio estado termodinâmico; portanto, o número de onda cumulativo é também uma função local,  $w(C, s, \eta)$ .

A hipótese de correlação entre espectro e a localização é de que a diferença entre o número de onda cumulativo de duas seções-transversais de absorção para cada gás cinza fracional seja representada pelo produto de duas funções, uma dependente da localização,  $s$ , e outra do número de onda,  $\eta$ . Assim,

$$w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta) = u_{ij}(s) v_{ij}(\eta) \text{ para } \eta \in \Delta_i \quad (3.10)$$

Desta maneira, o comportamento do incremento do número de onda cumulativo na seção-transversal de absorção é assumido independente do número de onda e do espaço. Ressalta-se que esta é uma correlação válida dentro de um intervalo espectral  $\Delta_i$ , não se aplicando à cobertura completa do espectro. A relação apresentada na Eq.(3.10) é mais de visão matemática do que física, e é feita apenas com o objetivo de separar as variáveis espectrais e espaciais na função, levando a uma diferença dos números de onda cumulativos entre duas

seções-transversais de absorção adjacentes, ou seja,  $w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta)$ . Esta suposição é baseada na observação de que o número de onda cumulativo não é uma função de crescimento rápido, ou, tão rápido quanto uma função linear identidade. As curvas das funções CW para dois valores de seções-transversais  $C_j$  e  $C_{j-1}$  são muito semelhantes, como pode ser visto na Figura 11, que apresenta funções CW para o CO<sub>2</sub> para H<sub>2</sub>O em vários valores de seções-transversais.

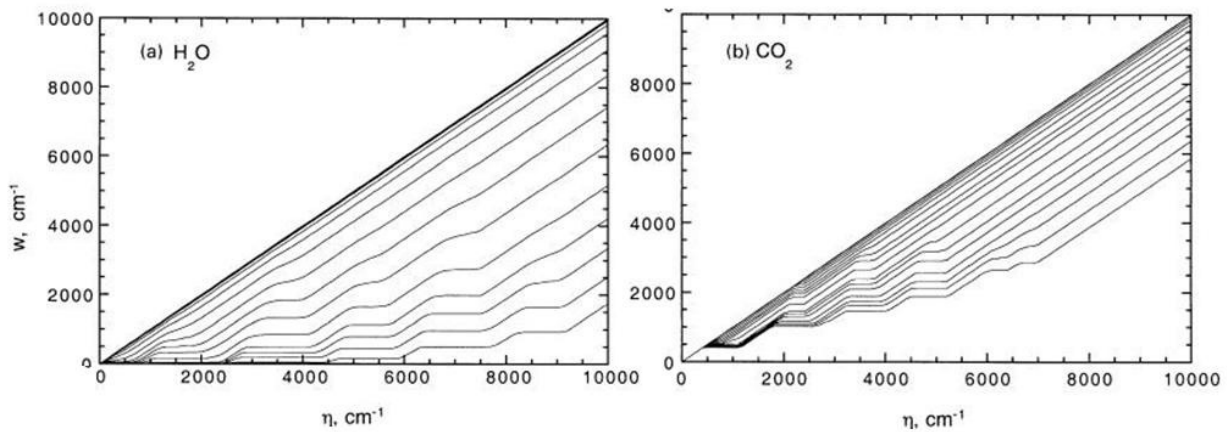


Figura 11 – Número de onda cumulativo para: (a) H<sub>2</sub>O e (b) CO<sub>2</sub> a 1000 K (Solovjov e Webb, 2002).

Como pode ser percebido na Figura 11, a diferença nas funções CW é praticamente uma constante com respeito à  $\eta$  se o intervalo espectral considerado,  $\Delta_i$ , não for muito extenso. Nessas condições, a hipótese é válida como sendo uma boa aproximação. Desta forma, quanto mais refinada for a malha espectral, ou seja, quanto menor for  $\Delta_i$  e mais próximas as seções-transversais suplementares,  $C_j$  e  $C_{j-1}$ , tanto melhor será a aproximação espectro-local.

A correlação espectro-local apresenta restrições bem menores do que as comumente utilizadas correlações para o espectro inteiro, idealizando o comportamento espectral como na modelagem SLW e  $k$ -Correlacionado.

É preciso, ainda, definir as funções  $u_{ij}(s)$  e  $v_{ij}(\eta)$ . Para definir a função  $v_{ij}(\eta)$ , seleciona-se um ponto de referência  $s^*$ , para o qual tem-se valores de referência para temperatura  $T(s^*)$  e concentrações de espécies  $Y(s^*)$ , incluindo partículas. Para a condição de referência o valor da função  $u_{ij}(s^*) \equiv 1$ . Logo,

$$v_{ij}(\eta) = w(C_j, s^*, \eta) - w(C_{j-1}, s^*, \eta) \quad (3.11)$$

Para um ponto qualquer  $s$ , a função  $u_{ij}(s)$  pode ser calculada por

$$u_{ij}(s) = \frac{w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta)}{w(C_j, s^*, \eta) - w(C_{j-1}, s^*, \eta)} \quad (3.12)$$

Similarmente, para uma mistura de gases  $m$  de densidade molar  $N$ , a função é definida como

$$u_{ij}(s) = \frac{\sum_m [w_m(C_j/Y_m) - w_m(C_{j-1}/Y_m)]}{\sum_m [w_m(C_j/Y_m) - w_m(C_{j-1}/Y_m)]_{s^*}} \quad (3.13)$$

onde o denominador diz respeito à localização de referência,  $s^*$ .

A integração da intensidade espectral de radiação,  $I_\eta$ , sobre o gás cinza fracional,  $D_{ij}$ , aplicando o conceito do número de onda cumulativo descrito pela Eq.(3.4), produz:

$$\begin{aligned} \int_{D_{ij}} I_\eta d\eta &= \int_{\{\eta: C_{j-1} < C_\eta < C_j\} \cap \Delta_i} I_\eta d\eta \\ &= \int_{\{\eta: C_\eta < C_j\} \cap \Delta_i} I_\eta d\eta - \int_{\{\eta: C_\eta > C_{j-1}\} \cap \Delta_i} I_\eta d\eta \\ &= \int_{\Delta_i} I_\eta dw(C_j, \eta) - \int_{\Delta_i} I_\eta dw(C_{j-1}, \eta) \\ &= \int_{\Delta_i} I_\eta d [w(C_j, s, \eta) - w(C_{j-1}, s, \eta)] \\ &= \int_{\Delta_i} I_\eta d [u_{ij}(s) v_{ij}(\eta)] \\ &= u_{ij}(s) \int_{\Delta_i} I_\eta d [v_{ij}(\eta)] \end{aligned} \quad (3.14)$$

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

onde  $J_{ij}$  é definido como a intensidade de radiação do gás cinza fracional, e  $u_{ij}(s)$  pode ser visto como sendo um fator de correção local para esta intensidade. A intensidade total de radiação é determinada pelo somatório de todas as intensidades dos gases cinzas fracionais ponderadas pelo fator de correção  $u_{ij}(s)$ :



$$I(s) = \int_{\eta=0}^{\infty} I_{\eta}(s) d\eta = \sum_{i,j} u_{ij}(s) J_{ij}(s) \quad (3.15)$$

onde o fator de correção  $u_{ij}(s)$  já foi definido pelas Eqs.(3.12) ou (3.13).

### 3.4 A RTE no Modelo CW

Para chegarmos à forma da RTE, como apresentada na Eq.(2.11), consideremos um meio que emite-absorve energia com espalhamento isotrópico pode ser escrita como (Siegel e Howell, 2002),

$$(\Omega, \nabla) I(r, \Omega) = -(\kappa + \sigma) I(r, \Omega) + \frac{\sigma}{4\pi} \int_{\Omega} I(r, \Omega') d\Omega' + \kappa I_b(r) \quad (3.16)$$

onde  $I(r, \Omega)$  é a intensidade de radiação em  $r$ , na direção  $\Omega$ ;  $I_b(r)$  é a intensidade de radiação do corpo negro na posição  $r$  e na temperatura do meio;  $\kappa$  é o coeficiente de absorção do meio cinza;  $\sigma$  é o coeficiente de espalhamento do meio; e a integração é feita na direção incidente  $\Omega'$ . Para superfícies difusas a condição de contorno para a Eq.(3.16) é

$$I(r, \Omega) = \varepsilon I_b(r) + \frac{\rho}{\pi} \int_{n \cdot \Omega' > 0} |n \cdot \Omega'| I(r, \Omega') d\Omega' \quad (3.17)$$

onde  $r$  fica sobre a superfície de contorno, e a Eq.(3.17) é válida para  $\mathbf{n} \cdot \Omega' > 0$ ;  $I(r, \Omega)$  é a intensidade de radiação que deixa a superfície,  $\varepsilon$  é a emissividade hemisférica da parede;  $\rho$  é a refletividade hemisférica e  $\mathbf{n}$  é o vetor normal à superfície.

Para um meio que absorve e emite radiação térmica (não espalha) ao longo de uma trajetória  $S$  na direção  $\Omega$ , a ETR é dada por (Siegel e Howell, 2002):

$$\frac{\partial I_{\eta}}{\partial s} = -\kappa_{\eta} I_{\eta} + \kappa_{\eta} I_{b\eta} \quad (3.18)$$

De maneira similar à apresentada na Eq.(3.14), a integração espectral da Eq.(3.18) de acordo com o modelo CW, Eq.(3.4), o conjunto de equações para as intensidades dos gases cinzas fracionais pode ser obtido. A integração neste caso, diferentemente daquela feita na modelagem SLW, não produz os termos de Leibnitz (Denison e Webb, 1993a) pois os cálculos são feitos não sobre  $D_{ij}$  (que pode variar de acordo com a localização espacial em meios não uniformes), mas sobre todos os intervalos espectrais fixos,  $\Delta_i$ .

$$\frac{\partial J_{ij}}{\partial s} = -\kappa_j J_{ij} + \kappa_j J_{bij} \quad (3.19)$$

onde  $\kappa_j$  é o coeficiente de absorção do gás cinza, determinado nesta modelagem a partir das seções-transversais de absorção,

$$\kappa_j = N(T_s) \sqrt{C_j C_{j-1}} \quad (3.20)$$

onde  $T_s$  é a temperatura local e  $N$  é a densidade molar da espécie, em molec/cm<sup>3</sup>. Definido como:

$$N(T_s) = \frac{7,3392315 \times 10^{21}}{T_s} \quad (3.21)$$

o termo  $\sqrt{C_j C_{j-1}}$  é dado em cm<sup>2</sup>/molec; e  $J_{bij}$  é a fonte fracional de energia radiante de corpo negro, definida como:

$$\begin{aligned} J_{bij}(s) &= \int_{\Delta_i} I_{b\eta}(T(s), \eta) d[v_{ij}(\eta)] \\ &= \int_{\Delta_i} I_{b\eta}(T(s), \eta) d[w(C_j, s^*, \eta) - w(C_{j-1}, s^*, \eta)] \end{aligned} \quad (3.22)$$

A função distribuição radiante de Planck nas Eqs.(3.19) e (3.22) é avaliada na temperatura local, e a função  $v_{ij}(\eta)$  é avaliada no estado termodinâmico escolhido como condição de referência,  $s^*$ , de acordo com a Eq.(3.11). O somatório de  $J_{bij}(s)$  sobre todos os gases cinzas fracionais resulta na emissão total:

$$I_b = \sum_{i,j} J_{bij} = \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (3.23)$$

onde  $\sigma$  é a constante de Stefan-Boltzmann, em  $W/(m^2 K^4)$ .

Para paredes não-cinzas, difusas e refletoras a condição de contorno é escrita como (Özişik, 1973):

$$I_\eta(s_W, \Omega) = \varepsilon_{\eta W} I_{b\eta}(T_W) + \frac{\rho_{\eta W}}{\pi} \int_{n \cdot \Omega < 0} I_\eta(s_W, \Omega') |\mathbf{n} \cdot \Omega'| d\Omega' \quad (3.24)$$

onde  $\Omega$  é o vetor direção ao longo de um caminho  $s$ ,  $s_W$  define o ponto sobre a superfície de contorno, e o índice  $W$  se refere às quantidades avaliadas no contorno;  $\varepsilon_{\eta W}$  é a emissividade espectral da fronteira, e  $\rho_{\eta W}$  é a reflectividade espectral da fronteira. A integração da Eq.(3.24) sobre os gases cinzas fracionais,  $D_{ij}$ , fornece as condições de contorno em termos das intensidades dos gases cinzas fracionais. Assim,

$$J_{ij}(s_W, \Omega) = \varepsilon_{\eta W} J_{bij}(T_W) + \frac{\rho_{iW}}{\pi} \int_{n \cdot \Omega < 0} I_\eta(s_W, \Omega') |\mathbf{n} \cdot \Omega'| d\Omega' \quad (3.25)$$

Quando a ETR está na forma para gás cinza fracional, Eq.(3.19), com as condições de contorno, Eq.(3.25), esta é resolvida para todos os gases cinza fracionais  $J_{ij}$  e a intensidade total de radiação é dada pela Eq.(3.15). Para um meio isotérmico e homogêneo o fator de correção torna-se  $u_{ij}(s) \equiv 1$ .

### 3.5 O Método das Ordenadas Discretas (Aproximação $S_n$ )

A RTE é uma equação íntegro-diferencial, o que torna a sua solução muito difícil. Dentre as técnicas de solução da mesma existem as analíticas e as numéricas. As primeiras, no entanto, são geralmente soluções aproximadas e fazem uso de simplificações as quais tornam difícil a sua transposição para casos diferentes. Já, uma técnica numérica bastante aplicada para a solução desta equação é o Método das Ordenadas Discretas. O método das ordenadas discretas é uma extensão do método dos dois fluxos ( $S_2$ ) proposto por Schuster (1905) e Schwarzschild (1906) e estendido por Chandrasekhar (1960). No método  $S_2$  a transferência de energia é

unidimensional, e a intensidade de radiação é isotrópica em cada hemisfério com diferentes valores nas direções positiva e negativa da direção coordenada, Figura 12.

O método consiste na subdivisão do espaço em um número de direções discretas fazendo, desta maneira, que a RTE se transforme em um sistema de equações lineares de 1ª ordem, sendo assim possível de ser resolvido analítica ou numericamente. É baseado numa representação discreta da variação direcional da intensidade radiante. A solução para o problema de transporte é encontrada resolvendo-se a equação de transferência de calor por radiação para um conjunto de direções discretas,  $l$  (dita a ordem da solução), que cobrem a totalidade da amplitude do ângulo sólido de  $\omega = 4\pi$  (Modest,1993). O valor de  $l$  indica o número de diferentes cossenos diretores usados para cada direção principal. Em problemas tridimensionais, cada octante de uma esfera de ângulos sólidos em torno de um ponto da malha contém  $l(l+2)/8$  ordenadas. Para cobrir todo o domínio de ângulos sólidos, deve ser resolvido  $l(l+2)$  equações simultâneas em cada ponto da malha. Um esquema das direções usadas no primeiro octante para uma solução S-6 é mostrado na Figura 13.

Assim, a equação de transporte radiante é resolvida para um conjunto de  $l$  direções  $s_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, l$ , e as integrações nos ângulos sólidos são aproximadas por quadraturas numéricas.

$$\int_{4\pi} f(\Omega) d\omega \approx \sum_{i=1}^n w_i f(\Omega_i) \quad (3.26)$$

onde  $w_i$  são os pesos das quadraturas associadas às direções  $s_i$ . A equação do transporte radiante é reescrita levando-se em conta as quantidades emitidas de todas as direções, assim:

$$\cos\theta \frac{\partial I_\eta}{\partial s} = \mu \frac{\partial I_\eta}{\partial s} = -\kappa_\eta I_\eta + \kappa_\eta I_{b\eta} \quad (3.27)$$

em que  $\mu = \cos\theta$  representa cada direção.

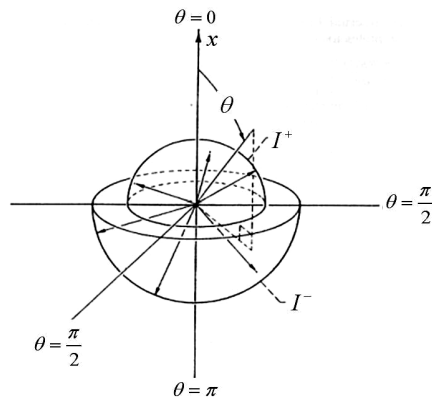


Figura 12 – Intensidade isotrópica nas direções positiva e negativa. (Modest, 1993)

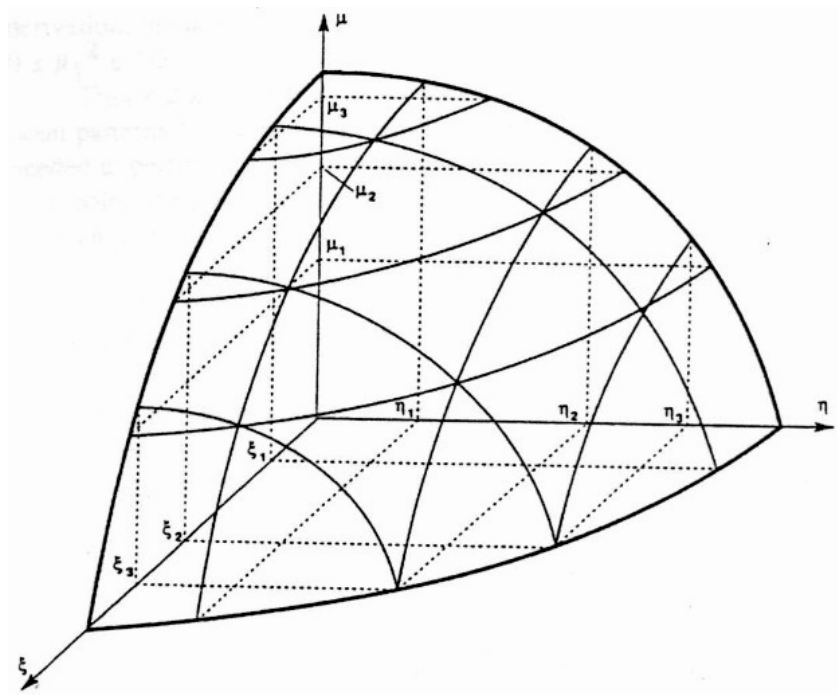


Figura 13 - Número de pontos para a solução S-6 no primeiro octante (Fiveland, 1991).

Com a hipótese da intensidade de radiação isotrópica a intensidade média pode ser escrita como:

$$\bar{I}(s) = \frac{\bar{I}(s)^+ + \bar{I}(s)^-}{2} \quad (3.28)$$

A equação da transferência é então multiplicada pelo ângulo sólido e integrada sobre cada hemisfério (com  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  e  $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$  e  $\mu = \cos \theta$ ).

A condição de contorno, Eq.(3.24), é reescrita na forma:

$$I_\eta(s_W, \mathbf{\Omega}) = \varepsilon_{\eta W} I_{b\eta}(T_W) + \frac{\rho_{\eta W}}{\pi} \sum_{n, \Omega < 0} w_i I_\eta(s_W, \Omega') |\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Omega}'| d\Omega' \quad (3.29)$$

A escolha do esquema de quadratura é arbitrária, embora possam existir restrições às direções  $s$  e aos pesos de quadratura  $w_i$  de modo a preservar a simetria do problema e satisfazer certas condições de momento. Normalmente, escolhem-se conjuntos de direções e pesos que são completamente simétricos e que satisfazem os momentos de intensidade zero, primeiro e segundo, ou seja:

$$\int_{4\pi} d\omega = 4\pi = \sum_{i=1}^l w_i \quad (a)$$

$$\int_{4\pi} \mathbf{\Omega} d\omega = 0 = \sum_{i=1}^l w_i \mathbf{\Omega}_i \quad (b) \quad (3.30)$$

$$\int_{4\pi} \mathbf{\Omega} \mathbf{\Omega} d\omega = \frac{4\pi}{3} \mathbf{\delta} = \sum_{i=1}^l w_i \mathbf{\Omega}_i \mathbf{\Omega}_i \quad (c)$$

onde  $\mathbf{\delta}$  é o tensor unitário. Diferentes conjuntos de direções e pesos que satisfazem a esses critérios foram tabelados e podem ser encontrados na literatura (Modest, 1993), embora alguns autores tivessem observado, posteriormente, que através da utilização de diferentes conjuntos de ordenadas poderiam surgir resultados díspares. Este fato ocorre por duas razões: (i) a intensidade pode ter descontinuidade direcional na parede e (ii) os fluxos radiantes nas paredes são avaliados segundo o primeiro momento de intensidade ao longo de um ângulo sólido de  $2\pi$ . A conclusão é que o conjunto de ordenadas deve satisfazer mais uma condição, a qual refere-se ao primeiro momento de intensidade sobre  $2\pi$ . Assim,

$$\int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} < 0} |\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Omega}| d\omega = \int_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} > 0} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Omega} d\omega = \pi = \sum_{\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{s}} > 0} w_i \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{\Omega} \quad (3.31)$$

Esta condição pode, então, ser satisfeita para as direções principais  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}$ , ou  $\hat{\mathbf{k}}$ . Conjuntos de ordenadas que satisfazem a (i) simetria, as (ii) equações de momento, Eqs.(3.30) e (iii) ao primeiro momento da intensidade, Eq.(3.31); foram tabelados por Lathrop e Carlson (1965). Esta tabela reproduz os primeiros quatro conjuntos  $S_2, S_4, S_6$  e  $S_8$ .

Para problemas multidimensionais, o método das ordenadas discretas resulta num conjunto de equações diferenciais parciais de primeira ordem que geralmente têm que ser

resolvidas numericamente. Para os casos bi e tridimensional, a discretização da equação de transferência de calor por radiação para uma dada direção conduz, para cada volume de controle da malha, a uma equação algébrica que relaciona a intensidade da radiação num nó com a intensidade de radiação nos nós vizinhos, sendo essa condição uma das principais características do método.

Neste trabalho, a RTE é resolvida numericamente através do método das ordenadas discretas aplicado a um volume de controle. Detalhes a respeito dessa forma de solução podem ser encontrados na literatura (Moura *et al.* 1998). Para os casos unidimensionais uma simplificação do método é feita, nesta as direções podem ser obtidas através das raízes de qualquer polinômio ortogonal (Legendre, Jacobi, Chebyshev, etc) e os pesos  $w_i$  são obtidos por uma função característica. Nos casos resolvidos neste trabalho, as direções foram obtidas através das raízes pela expansão dos polinômios de Legendre e os pesos através da função desenvolvida por Abramowitz e Stegun (1972), Eqs. (3.32) e (3.33) juntamente com o método de ordenadas discretas.

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left[ (x^2 - 1)^n \right] \quad (3.32)$$

$$w_i = \frac{2}{(1 - \mu_i^2) (P'_n(\mu_i))^2} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.33)$$

onde  $P_n$  é o polinômio de Legendre de grau  $n$ ,  $\mu_i$  são as raízes desse polinômio e  $w_i$  são os pesos de cada direção.

### 3.6 Inconsistência do Modelo CW em Relação ao Balanço de Energia Radiante

Conhecendo-se o equacionamento da modelagem para meios participantes adotada (modelo CW), juntamente com o método de solução da equação do transporte radiante (ordenadas discretas) torna-se mais clara a apresentação da inconsistência existente no modelo, bem como a apresentação das modificações propostas para uma nova formulação para o modelo de gás.

O modelo CW prevê a equação do transporte radiante (RTE) para a intensidade de radiação dos gases cinza fracionais,  $J_{ij}$ , a partir da intensidade de radiação,  $I_\eta$ , conforme Eqs. (3.19) e (3.18), respectivamente. As intensidades espectrais direcionais,  $I_{\eta l}^+(s)$  e  $I_{\eta l}^-(s)$ , são

determinadas a partir das soluções das equações de transferência radiante pelo método de ordenadas discretas. Assim:

$$\begin{aligned} a) \quad \mu_l \frac{\partial I_{\eta l}^+(s)}{\partial s} &= -\kappa_{\eta} I_{\eta l}^+(s) + \kappa_{\eta} I_{\eta b}(s) \\ b) \quad -\mu_l \frac{\partial I_{\eta l}^-(s)}{\partial s} &= -\kappa_{\eta} I_{\eta l}^-(s) + \kappa_{\eta} I_{\eta b}(s) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Nas Eqs.(3.34) (a) e (b),  $s$  representa uma condição termodinâmica determinada pela posição. Após resolvidas as Eqs. (3.34) (a) e (b), o fluxo de calor radiante e o divergente do mesmo (ou taxa de geração de energia),  $q_{R\eta l}$  e  $Q_{R\eta l}$ , respectivamente, considerando somente a contribuição da direção ordenada  $l$ , podem ser determinados, segundo Modest (2003), por:

$$q_{R\eta l}(s) = 2\pi\mu_l w_l [I_{\eta l}^+(s) - I_{\eta l}^-(s)] \quad (3.35)$$

$$Q_{R\eta l}(s) = 2\pi\kappa_{\eta} w_l [I_{\eta l}^+(s) + I_{\eta l}^-(s)] - 4\pi\kappa_{\eta} w_l I_{\eta b}(s) \quad (3.36)$$

Sabendo que a derivada do fluxo de calor radiante produz o próprio termo de geração de calor, ou divergente do fluxo, de acordo com a primeira Lei da termodinâmica, o balanço de energia é prontamente satisfeito para qualquer direção e comprimento de onda por:

$$Q_{R\eta l}(s) = -\frac{\partial q_{R\eta l}(s)}{\partial s} \quad (3.37)$$

O fluxo de calor e a taxa de geração de energia radiante totais são, então, obtidos pelo somatório de  $q_{R\eta l}$  e  $Q_{R\eta l}$  em todas as direções ordenadas  $l$  e pela integração sobre todos os comprimentos de onda  $\eta$ :

$$q_R(s) = \sum_l \int_{\eta} q_{R\eta l}(s) d\eta \quad (3.38)$$

$$Q_R(s) = \sum_l \int_{\eta} Q_{R\eta l}(s) d\eta \quad (3.39)$$

A conservação global da energia radiante,  $Q_R = -dq_R/ds$ , torna-se uma consequência da solução exata das Eqs.(3.34) (a) e (b) para todas as direções e números de onda.



De modo a verificar a conservação de energia, aplicam-se as relações apresentadas pelo modelo CW, e as Eqs.(3.35) e (3.36) são integradas sobre os gases cinzas fracionais,  $D_{ij}$ . Assim,

$$\begin{aligned} \int_{D_{ij}(s)} q_{R\eta l}(s) d\eta &= \int_{D_{ij}(s)} \left\{ 2\pi \sum_l \left[ \mu_l w_l \left( I_{\eta l}^+(s) - I_{\eta l}^-(s) \right) \right] \right\} d\eta \\ &= 2\pi \sum_l \left[ \mu_l w_l \left( \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s) d\eta - \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^-(s) d\eta \right) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \int_{D_{ij}(s)} Q_{R\eta l}(s) d\eta &= \int_{D_{ij}(s)} \left\{ 2\pi k_\eta \sum_l \left\{ w_l \left[ I_{\eta l}^+(s) + I_{\eta l}^-(s) \right] \right\} - 4\pi k_\eta I_{\eta b}(s) \right\} d\eta \\ &= 2\pi \sum_l \left[ w_l \left( \int_{D_{ij}(s)} k_\eta I_{\eta l}^+(s) d\eta + \int_{D_{ij}(s)} k_\eta I_{\eta l}^-(s) d\eta \right) - 4\pi \int_{D_{ij}(s)} k_\eta I_{\eta b}(s) d\eta \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Conforme apresentado pela Eq.(3.15), integrando as intensidades espectrais direcionais sobre o gás cinza fracional,  $D_{ij}$ , utilizando-se do conceito do número de onda cumulativo, tem-se:

$$\begin{aligned} a) \quad \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s) d\eta &= u_{ij}(s) J_{ijl}^+(s) \\ b) \quad \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^-(s) d\eta &= u_{ij}(s) J_{ijl}^-(s) \\ c) \quad \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta b}(s) d\eta &= u_{ij}(s) J_{bij}(s) \end{aligned} \quad (3.42)$$

Uma vez que a modelagem originalmente proposta assume a relação apresentada na Eq. (3.15), com as Eqs.(3.42) (a), (b) e (c) as Eqs.(3.40) e (3.41) são reescritas na forma:

$$q_{Rijl}(s) = u_{ij}(s) 2\pi \sum_l \left[ \mu_l w_l \left( J_{ijl}^+(s) - J_{ijl}^-(s) \right) \right] \quad (3.43)$$

$$Q_{Rijl}(s) = u_{ij}(s) \left\{ 2\pi \sum_l \left[ w_l k_j \left( J_{ijl}^+(s) + J_{ijl}^-(s) \right) \right] - 4\pi k_j J_{bij}(s) \right\} \quad (3.44)$$

Finalmente, o fluxo de calor radiante e a taxa de geração da energia são dados por:

$$q_R(s) = \sum_l \sum_{ij} q_{Rijl}(s) \quad (3.45)$$

$$Q_R(s) = \sum_l \sum_{ij} Q_{Rijl}(s) \quad (3.46)$$

Conforme apresentado até aqui, a aplicação dos conceitos do número de onda acumulado fornece uma maneira efetiva para a integração do fluxo de calor radiante e do divergente deste sobre todo o espectro. No entanto, para a solução das Eqs.(3.43) e (3.44), é necessário determinar as intensidades dos gases cinza fracionais,  $J_{ijl}^+$  e  $J_{ijl}^-$ . Isto pode ser feito pela integração das Eqs.(3.34) (a) e (b) sobre os números de onda dos gases cinza fracionais,  $D_{ij}$ . Assim, conforme apresentado por Solovjov e Webb (2002), analogamente tem-se:

$$\begin{aligned} a) \quad \mu_l \frac{\partial J_{ijl}^+(s)}{\partial s} &= -\kappa_j J_{ijl}^+(s) + \kappa_j J_{bij}(s) \\ b) \quad -\mu_l \frac{\partial J_{ijl}^-(s)}{\partial s} &= -\kappa_j J_{ijl}^-(s) + \kappa_j J_{bij}(s) \end{aligned} \quad (3.47)$$

A análise das equações acima revela uma aproximação na derivação dos termos do lado direito. Isto é mostrado em detalhe para a Eq.(3.47) (a), pois ocorre de maneira análoga para a (b). A integração do primeiro termo da Eq. (3.34) (a) sobre  $D_{ij}$  é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{D_{ij}(s)} \frac{\partial I_{\eta l}^+}{\partial s} d\eta &= \int_{D_{ij}(s)} \frac{I_{\eta l}^+(s + ds/2) - I_{\eta l}^+(s - ds/2)}{ds} d\eta \\ &= \frac{\int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s + ds/2) d\eta - \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s - ds/2) d\eta}{ds} \end{aligned} \quad (3.48)$$

Nos integrais acima, os pontos de avaliação de  $D_{ij}$  e das duas intensidades,  $I_{\eta l}^+$  (as quais são  $s$ ,  $s + ds/2$  e  $s - ds/2$ ) não são os mesmos, desta forma não é possível a aplicação da relação apresentada pela Eq.(3.42) (a) de forma exata. Na realidade, para a derivação da Eq.(3.47) (a) é necessário considerar as seguintes aproximações:

$$\begin{aligned}
a) \quad & \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s+ds/2)d\eta \cong u_{ij}(s)J_{ijl}^+(s+ds/2) \\
b) \quad & \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s-ds/2)d\eta \cong u_{ij}(s)J_{ijl}^+(s-ds/2)
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Uma importante consequência surge a partir das aproximações nas Eqs.(3.49) (a) e (b). Isto pode ser visto a partir da integração da Eq. (3.34) (a) sobre todo o espectro  $\eta$ :

$$\begin{aligned}
a) \quad & \int_{\eta} I_{\eta l}^+(s)d\eta = \sum_{ij} \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s)d\eta = \sum_{ij} u_{ij}(s)J_{ijl}^+(s) \\
b) \quad & \int_{\eta} I_{\eta b}(s)d\eta = \sum_{ij} \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta b}(s)d\eta = \sum_{ij} u_{ij}(s)J_{bij}(s) \\
c) \quad & \int_{\eta} \frac{\partial I_{\eta l}^+(s)}{\partial s} d\eta = \frac{\int_{\eta} I_{\eta l}^+(s+ds/2)d\eta - \int_{\eta} I_{\eta l}^+(s-ds/2)d\eta}{ds}
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Uma vez que a integração da Eq.(3.50) (c) é feita para o espectro inteiro, cada gás cinza fracional,  $D_{ij}$ , pode ser escolhido de forma a corresponder ao mesmo ponto onde a intensidade espectral está sendo avaliada (ou seja,  $s + ds/2$  e  $s - ds/2$ ). Isto evita as aproximações nas Eqs.(3.49) (a) e (b). Logo,

$$\begin{aligned}
a) \quad & \int_{\eta} I_{\eta l}^+(s+ds/2)d\eta = \sum_{ij} \int_{D_{ij}(s+ds/2)} I_{\eta l}^+(s+ds/2)d\eta = \sum_{ij} u_{ij}(s+ds/2)J_{ijl}^+(s+ds/2) \\
b) \quad & \int_{\eta} I_{\eta l}^+(s-ds/2)d\eta = \sum_{ij} \int_{D_{ij}(s-ds/2)} I_{\eta l}^+(s-ds/2)d\eta = \sum_{ij} u_{ij}(s-ds/2)J_{ijl}^+(s-ds/2)
\end{aligned} \tag{3.51}$$

Combinando as Eqs.(3.50) (c), (3.51) (a) e (b) chega-se em:

$$\int_{\eta} \frac{\partial I_{\eta l}^+(s)}{\partial s} d\eta = \sum_{ij} \frac{\partial [u_{ij}(s)J_{ijl}^+(s)]}{\partial s} = \sum_{ij} \left[ u_{ij}(s) \frac{\partial J_{ijl}^+(s)}{\partial s} + J_{ijl}^+(s) \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] \tag{3.52}$$

Assim, a integração da Eq.(3.34) (a) sobre todo o espectro torna-se:

$$\mu_l \sum_{ij} \left[ u_{ij}(s) \frac{\partial J_{ijl}^+(s)}{\partial s} + J_{ijl}^+(s) \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] = - \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{ijl}^+(s) + \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{bij}(s) \tag{3.53}$$

Por outro lado, multiplicando-se a Eq.(3.47) (a) por  $u_{ij}(s)$  e considerando todos os gases cinza fracionais,  $ij$ , encontra-se:

$$\mu_l \sum_{ij} u_{ij}(s) \frac{\partial J_{ijl}^+(s)}{\partial s} = - \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{ijl}^+(s) + \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{bij}(s) \quad (3.54)$$

Finalmente, subtraindo a Eq.(3.54) da Eq.(3.53) chega-se a:

$$\sum_{ij} \left[ J_{ijl}^+(s) \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] = 0 \quad (3.55)$$

Analogamente, com o mesmo procedimento aplicado para a direção negativa, tem-se:

$$\sum_{ij} \left[ J_{ijl}^-(s) \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] = 0 \quad (3.56)$$

Desta forma, a consistência do modelo requer que as Eqs.(3.55) e (3.56) sejam satisfeitas, mas isto não se verifica. A razão disto fica por conta das aproximações nas Eqs.(3.49) (a) e (b) para a obtenção das equações para as intensidades do gás cinza fracional,  $J_{ijl}^+$  e  $J_{ijl}^-$  nas Eqs.(3.47) (a) e (b). Aplicando-se o mesmo raciocínio para todas as direções, pode ser verificado que o balanço de energia,  $Q_R = -dq_R/ds$ , é respeitado somente se as Eqs. (3.55) e (3.56) forem válidas para todas as direções, o que novamente não é verdade.

Independentemente do que foi apresentado até aqui, o modelo CW é consistentemente preciso para a determinação do divergente do fluxo de calor radiante,  $Q_R$ , conforme é apresentado por Solovjov e Webb (2002, 2005, 2008 e 2010), e também no presente trabalho. No entanto, testes efetuados neste estudo mostram que o fluxo de calor radiante,  $q_R$ , pode apresentar consideráveis desvios com relação à solução correta, o que é uma consequência esperada uma vez que o balanço de energia radiante não é satisfeito pela modelagem CW. A seguir é apresentada a proposta de modificação do CW para que o balanço de energia seja observado em cada ponto do domínio, sem que o divergente do fluxo de calor radiante seja modificado, conforme fornecido pelo modelo original.

### 3.7 Proposta de Modificação do Modelo do Número de Onda Acumulado

A aplicação das Eqs.(3.47) (a) e (b) leva a um erro no cálculo dos gases cinza fracionais definidos pelas Eqs.(3.42) (a) e (b). É proposta, aqui, uma modificação das Eqs. (3.47) (a) e (b). As intensidades dos gases cinza fracionais modificadas são indicadas por  $J_{ijl}^{+(M)}$  e  $J_{ijl}^{-(M)}$ , onde o super índice ( $M$ ) distingue as intensidades *modificadas* daquelas originalmente existentes na modelagem,  $J_{ijl}^+$  e  $J_{ijl}^-$ , as quais continuarão sendo usadas na correção proposta. As intensidades modificadas são definidas da mesma forma que as originais, como:

$$\begin{aligned} a) \quad & \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^+(s) d\eta = u_{ij}(s) J_{ijl}^{+(M)}(s) \\ b) \quad & \int_{D_{ij}(s)} I_{\eta l}^-(s) d\eta = u_{ij}(s) J_{ijl}^{-(M)}(s) \end{aligned} \quad (3.57)$$

A integração espectral do fluxo e a taxa de geração de energia radiante sobre o gás cinza fracional,  $D_{ij}$ , fornece:

$$q_{Rijl}(s) = u_{ij}(s) 2\pi \sum_l \left[ \mu_l w_l \left( J_{ijl}^{+(M)}(s) - J_{ijl}^{-(M)}(s) \right) \right] \quad (3.58)$$

$$Q_{Rijl}(s) = u_{ij}(s) \left\{ 2\pi \sum_l \left[ w_l k_j \left( J_{ijl}^{+(M)}(s) + J_{ijl}^{-(M)}(s) \right) \right] - 4\pi k_j J_{bij}(s) \right\} \quad (3.59)$$

É conveniente manter o símbolo  $J_{bij}$  para representar a integração de  $I_{\eta b}$  sobre  $D_{ij}$ , uma vez que este parâmetro permanece inalterado na correção. Por fim, o fluxo e a taxa de geração de energia,  $q_R$  e  $Q_R$ , podem ser determinados pela aplicação das Eqs.(3.45) e (3.46).

Na modelagem proposta, as integrações das Eqs.(3.34) (a) e (b) sobre  $D_{ij}$  são representadas pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned} a) \quad & \mu_l \frac{\partial J_{ijl}^{+(M)}(s)}{\partial s} = -\kappa_j J_{ijl}^{+(M)}(s) + \kappa_j J_{bij}(s) + f_{ijl}^+(s) \\ b) \quad & -\mu_l \frac{\partial J_{ijl}^{-(M)}(s)}{\partial s} = -\kappa_j J_{ijl}^{-(M)}(s) + \kappa_j J_{bij}(s) + f_{ijl}^-(s) \end{aligned} \quad (3.60)$$

onde os termos  $f_{ijl}^+$  e  $f_{ijl}^-$  são acrescentados às equações para corrigir as aproximações que estão envolvidas na integração dos termos diferenciais sobre  $D_{ij}$ . A priori, estes termos são dependentes da posição  $s$ , da direção ordenada  $l$ , e do gás cinza gracional  $D_{ij}$ .

Para resolver as Eqs.(3.60) (a) e (b), uma informação adicional é necessária para a determinação dos termos de correção  $f_{ijl}^+$  e  $f_{ijl}^-$ . Mantendo-se no objetivo de garantir o balanço de energia, de forma análoga, a Eq.(3.53) modificada se apresenta na forma a seguir:

$$\mu_l \sum_{ij} \left[ u_{ij}(s) \frac{\partial J_{ijl}^{+(M)}(s)}{\partial s} + J_{ijl}^{+(M)} \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] = - \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{ijl}^{+(M)} + \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{bij}(s) \quad (3.61)$$

Multiplicando a Eq.(3.60) (a) por  $u_{ij}(s)$  e assumindo todos  $ij$ , segue que:

$$\mu_l \sum_{ij} u_{ij}(s) \frac{\partial J_{ijl}^{+(M)}(s)}{\partial s} = - \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{ijl}^{+(M)}(s) + \sum_{ij} \kappa_j u_{ij}(s) J_{bij}(s) + \sum_{ij} u_{ij}(s) f_{ijl}^+(s) \quad (3.62)$$

Subtraindo a Eq.(3.61) de (3.62) resulta em:

$$\mu_l \sum_{ij} \left[ J_{ijl}^{+(M)}(s) \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] = - \sum_{ij} [u_{ij}(s) f_{ijl}^+(s)] \quad (3.63)$$

Aplicando o mesmo procedimento para a direção negativa tem-se:

$$\mu_l \sum_{ij} \left[ J_{ijl}^{-(M)}(s) \frac{\partial u_{ij}(s)}{\partial s} \right] = - \sum_{ij} [u_{ij}(s) f_{ijl}^-(s)] \quad (3.64)$$

É possível observar que o modelo CW se baseia na validação das Eqs.(3.55) e (3.56), o que geralmente não é correto. Uma conseqüência é que a conservação da energia,  $Q_R = -dq_R/ds$ , não é obedecida. No modelo modificado, os termos de correção  $f_{ijl}^+$  e  $f_{ijl}^-$  são necessários para tornar as Eqs.(3.63) e (3.64) corretas e, assim, assegurando o balanço de energia radiante.

A próxima etapa é impor que o divergente do fluxo de calor radiante, calculado a partir das Eqs.(3.44) e (3.59), seja o mesmo. Conforme discutido anteriormente, esta imposição é baseada em observações de que o modelo CW leva a precisos valores para o divergente do fluxo de calor radiante. Isto pode ser observado no Apêndice A. Assim, considerando a igualdade dos divergentes do fluxo de calor, segue que a seguinte relação também é verdadeira.

$$J_{ijl}^+(s) + J_{ijl}^-(s) = J_{ijl}^{+(M)}(s) + J_{ijl}^{-(M)}(s) \quad (3.65)$$

A combinação das Eqs.(3.43) e (3.44) e das Eqs.(3.58) e (3.59) resulta em:

$$\begin{aligned} a) \quad & \mu_l \left[ \frac{\partial J_{ijl}^+(s)}{\partial s} - \frac{\partial J_{ijl}^-(s)}{\partial s} \right] = -\kappa_j \left[ J_{ijl}^+(s) + J_{ijl}^-(s) \right] + 2\kappa_j J_{bij}(s) \\ b) \quad & \mu_l \left[ \frac{\partial J_{ijl}^{+(M)}(s)}{\partial s} - \frac{\partial J_{ijl}^{-(M)}(s)}{\partial s} \right] = -\kappa_j \left[ J_{ijl}^{+(M)}(s) + J_{ijl}^{-(M)}(s) \right] + 2\kappa_j J_{bij}(s) \\ & + \left[ f_{ijl}^+(s) + f_{ijl}^-(s) \right] \end{aligned} \quad (3.66)$$

Subtraindo a Eq.(3.66) (a) da (3.66) (b), aplicando a relação apresentada na Eq.(3.65), obtém-se:

$$f_{ijl}^+(s) + f_{ijl}^-(s) = \mu_l \left[ \frac{\partial J_{ijl}^{+(M)}(s)}{\partial s} - \frac{\partial J_{ijl}^{-(M)}(s)}{\partial s} \right] - \mu_l \left[ \frac{\partial J_{ijl}^+(s)}{\partial s} - \frac{\partial J_{ijl}^-(s)}{\partial s} \right] \quad (3.67)$$

As Eqs.(3.63), (3.64) e (3.67) forçam o balance de energia radiante a ser satisfeito enquanto mantém o mesmo valor para o divergente do fluxo de calor radiante fornecido pelo modelo CW. No entanto, existe um infinito número de soluções para os termos  $f_{ijl}^+$  e  $f_{ijl}^-$  que podem satisfazer as Eqs.(3.63), (3.64) e (3.67), e assim, mais relações são necessárias. O segundo termo do lado direito da Eq.(3.67) é conhecido, pois é determinado originalmente pelo modelo. Essa equação impõe uma relação adicional para os termos  $f_{i,j,l}^+$  e  $f_{i,j,l}^-$ , as demais podem ser feitas com base na conservação de energia. Desta forma, fazendo uso da relação assumida pelo modelo CW através da Eq.(3.15), as relações para os termos de correção podem ser apresentadas como:

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \left[ u_{ij}(s) f_{ijl}^+(s) \right] = F_l^+(s) = \frac{\mu_l}{ds} \sum_{ij} \left\{ \left[ u_{ij}(s) - u_{ij}(s + ds/2) \right] J_{ijl}^{+(M)}(s + ds/2) \right. \\ \left. - \left[ u_{ij}(s) - u_{ij}(s - ds/2) \right] J_{ijl}^{+(M)}(s - ds/2) \right\} \end{aligned} \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \left[ u_{ij}(s) f_{ijl}^-(s) \right] = F_l^-(s) = \frac{\mu_l}{ds} \sum_{ij} \left\{ \left[ u_{ij}(s) - u_{ij}(s + ds/2) \right] J_{ijl}^{-(M)}(s + ds/2) \right. \\ \left. - \left[ u_{ij}(s) - u_{ij}(s - ds/2) \right] J_{ijl}^{-(M)}(s - ds/2) \right\} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Logo,

$$\begin{cases} \sum_{ij} [u_{ij}(s) f_{ijl}^+(s)] = F_l^+(s) \\ \sum_{ij} [u_{ij}(s) f_{ijl}^-(s)] = F_l^-(s) \end{cases} \quad (3.70)$$

Um novo conjunto de relações baseado nos termos de correção, a partir da proposta de modificação do modelo CW, surge. É assumido que estes são obtidos pela soma de duas variáveis ainda desconhecidas. As relações para os termos  $f_{ijl}^+$  e  $f_{ijl}^-$  são:

$$\begin{cases} f_{ijl}^+(s) = g_{ijl}(s) + f_l^+(s) \\ f_{ijl}^-(s) = g_{ijl}(s) + f_l^-(s) \end{cases} \quad (3.71)$$

As relações apresentadas na Eq.(3.71) não são baseadas em nenhum conceito físico. São propostas para permitir a determinação dos termos de correção  $f_{ijl}^+$  e  $f_{ijl}^-$ . A priori, outras relações podem ser testadas, embora estas apresentadas aqui tenham se mostrado mais estáveis dentre as testadas durante o estudo. Inserindo a Eq.(3.71) na Eq.(3.70), tem-se:

$$\sum_{ij} \{u_{ij}(s) [g_{ijl}(s) + f_l^+(s)]\} = F_l^+(s) \therefore f_l^+(s) = \frac{F_l^+(s) - \sum_{ij} [u_{ij}(s) g_{ijl}(s)]}{\sum_{ij} u_{ij}(s)} \quad (3.72)$$

$$\sum_{ij} \{u_{ij}(s) [g_{ijl}(s) + f_l^-(s)]\} = F_l^-(s) \therefore f_l^-(s) = \frac{F_l^-(s) - \sum_{ij} [u_{ij}(s) g_{ijl}(s)]}{\sum_{ij} u_{ij}(s)} \quad (3.73)$$

Assumimos o termo do lado direito da Eq.(3.67) como sendo uma função, e chamamos esta de  $G_{ijl}(s)$ . Assim, a equação é reescrita na forma:

$$f_{ijl}^+ + f_{ijl}^- = G_{ijl}(s) \quad (3.74)$$

Inserindo a Eq.(3.71) na Eq.(3.74) resulta em:



$$2g_{i,j,l}(s) + f_l^+ + f_l^- = G_{i,j,l}(s) \quad (3.75)$$

$$\therefore g_{i,j,l}(s) = \frac{1}{2} \{ G_{i,j,l}(s) - [f_l^+(s) + f_l^-] \}$$

### 3.8 Procedimento Numérico

O procedimento numérico para a solução a partir do modelo CW modificado é dado pelos seguintes passos:

- Resolver o modelo CW original para a obtenção de  $J_{i,j,l}^+(s)$  e  $J_{i,j,l}^-(s)$  pelas Eqs.(3.47) (a) e (b);
- Assumir as igualdades:  $J_{ij}^{+(M)}(s) = J_{ij}^+(s)$  e  $J_{ij}^{-(M)}(s) = J_{ij}^-(s)$ , de acordo com a Eq.(3.65);
- Considerar o valor inicial para  $g_{ijl}(s) = 0$ ;
- Determinar as funções  $F_l^+(s)$  e  $F_l^-(s)$  pelas Eqs.(3.72) e (3.73);
- Determinar os coeficientes  $f_{ijl}^+(s)$  e  $f_{ijl}^-(s)$  pela Eq.(3.71);
- Resolver as equações modificadas, Eqs.(3.60) (a) e (b);
- Retornar ao passo (iv) e repetir até a convergência de  $f_{ijl}^+(s)$  e  $f_{ijl}^-(s)$ ;
- Determinar  $g_{ijl}(s)$  pela Eq.(3.75);
- Retornar ao passo (v) e repetir até a *estabilização dos resultados*.

Neste procedimento numérico duas observações são importantes:

- A convergência dos coeficientes  $f_{ijl}^+(s)$  e  $f_{ijl}^-(s)$  pode ser feita pela adoção de um critério de parada, o qual pode ser baseado em um número de *loops* iterativos pré-estabelecidos ou em um “erro” aceitável. Para os casos apresentados neste trabalho o “erro” foi calculado a partir da diferença entre os valores da iteração “atual” e “anterior”, sendo que o ponto de parada é fixado em  $10^{-14}$ , pois os valores dos coeficientes são baixos e já iniciam na ordem de  $10^{-6}$ . Se o critério de *loops* iterativos for adotado, para os casos deste trabalho a convergência é observada em 10 (dez) iterações.
- A expressão *estabilização dos resultados* usada no passo (ix) do procedimento numérico é devida ao fato de que os valores de  $g_{ijl}(s)$  se mostram flutuantes e sem uma tendência que aponte uma convergência. No entanto, é observado que a

partir de 10 (dez) iterações os resultados não apresentam significativas mudanças. Alguns casos apresentados no Capítulo 5 apresentam estabilidade dos resultados com até 3 (três) passos iterativos, porém a maior parte exigiu mais passos. O critério de parada em 10 *loops* satisfaz a estabilidade necessária para resultados conclusivos.

## 4 BANCOS DE DADOS MOLECULARES

Este capítulo discute os bancos de dados moleculares, HITRAN e HITEMP, os quais podem ser usados para obtenção do comportamento espectral das espécies químicas consideradas neste estudo. Além da descrição dos bancos de dados, é apresentada também sua forma de utilização para a geração dos espectros de absorção.

### 4.1 Introdução ao HITRAN/HITEMP

A primeira edição pública do banco de dados espectroscópicos foi distribuída através de fitas magnéticas, em 1973, pelo Laboratório de Pesquisas da Força Aérea de Cambridge (EUA). Na ocasião, o banco de dados era denominado *Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation* – AFCRL (McClatchey *et al.*, 1973).

Nas últimas décadas, o banco de dados HITRAN (*High Resolution Transmission*) tem sido substancialmente expandido, em termos de cobertura espectral, espécies moleculares, parâmetros, números de bandas além de uma melhora significativa na confiabilidade dos dados (Rothman *et al.*, 2005 e 2008). A última atualização ocorreu em 2008, sob direção de Laurence S. Rothman, e nesta apenas foram feitas correções para moléculas de SO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, OCS e H<sub>2</sub>O, sendo que para o vapor d'água as mudanças se limitaram a corrigir intensidades de linhas acima do número de onda 11500 cm<sup>-1</sup>. A base de dados surgiu com a finalidade de facilitar a obtenção de dados para simulações e análises de observações na atmosfera terrestre. Os estudos de combustão envolvem transições que são significativas somente em altas temperaturas. Para isto existe um banco de dados, análogo ao HITRAN, chamado de HITEMP, este fornece as informações para condições de temperatura mais elevadas. O banco de dados HITRAN foi obtido através de medições na temperatura ambiente (296K), de forma que para a obtenção dos dados para temperaturas mais elevadas os dados são interpolados matematicamente. Já, o banco de dados HITEMP, apresenta dados obtidos na temperatura de 1000K, sendo o uso deste mais apropriado para cálculos que envolvam combustão, pois a temperatura envolvida nesses processos pode passar seguramente de 2000K.

A edição atual do HITRAN contém 42 diferentes espécies (moléculas), seus isótopos e sua abundância (Rothman *et al.*, 2008), enquanto o HITEMP conta com as moléculas de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O e CO. A faixa espectral inclui desde ondas de rádio até o ultravioleta (0 – 60000 cm<sup>-1</sup>). A enumeração associada às moléculas faz referência ao surgimento “cronológico” das mesmas na

base de dados. A compilação dos dados é feita a partir do *software* JavaHAWKS, que corresponde a uma interface para auxiliar o usuário na manipulação das informações oferecidas pelo banco de dados. O *software* é fornecido gratuitamente por (HITRAN database).

## 4.2 Organização dos Parâmetros Fornecidos pelo HITRAN/HITEMP

O banco de dados trabalha com arquivos em formato ASCII, e a extensão destes é “.par”. As bibliotecas podem ser obtidas e atualizadas pela internet (HITRAN database). Os arquivos são organizados, de forma a apresentar os vários parâmetros relativos à molécula, em colunas. A

Tabela 1 representa uma parte do arquivo relativo à molécula de água (Ribeiro, 2006). Os significados das siglas (parâmetros) são apresentados na Tabela 2.

Tabela 1 – Dados contidos nos arquivos HITRAN (Ribeiro, 2006)

| <i>Mol/ Iso</i> | $\nu_0$ | <i>S</i>  | $ R ^2$ ou <i>A</i> | $\gamma_{ar}$ | $\gamma_{auto}$ | $E''$     | <i>n</i> | $\delta$ | $v'$ | $v''$ | $Q'$    | $Q''$   | <i>IER</i> | <i>IREF</i> |
|-----------------|---------|-----------|---------------------|---------------|-----------------|-----------|----------|----------|------|-------|---------|---------|------------|-------------|
| 11              | .400700 | 2.330E-28 | 6.370E-02           | .0813         | .0000           | 1907.6170 | .64      | .000000  | 2    | 2     | 4 2 3   | 3 3 0   | 000        | 000         |
| 11              | .401200 | 1.010E-32 | 7.354E-03           | .0335         | .0000           | 3623.7620 | .64      | .000000  | 1    | 1     | 15 7 9  | 16 4 12 | 000        | 000         |
| 14              | .613436 | 1.080E-31 | 8.898E-02           | .0575         | .0000           | 2175.5643 | .64      | .000000  | 1    | 1     | 14 6 8  | 14 6 9  | 000        | 000         |
| 14              | .682472 | 6.260E-28 | 7.338E-02           | .0955         | .0000           | 156.3823  | .64      | .000000  | 1    | 1     | 3 2 1   | 4 1 4   | 000        | 000         |
| 14              | .692995 | 2.930E-32 | 5.188E-04           | .0738         | .0000           | 1405.1257 | .64      | .000000  | 1    | 1     | 13 11 2 | 12 3 9  | 000        | 000         |
| 11              | .741682 | 4.390E-25 | 1.837E-02           | .0906         | .0000           | 446.5110  | .64      | .000000  | 1    | 1     | 6 1 8   | 5 2 3   | 000        | 000         |
| 14              | .744104 | 5.530E-28 | 1.283E-01           | .0833         | .0000           | 373.6659  | .64      | .000000  | 1    | 1     | 5 3 2   | 5 3 3   | 000        | 000         |

Tabela 2 – Significado dos parâmetros dos arquivos HITRAN. (Ribeiro, 2006).

| Parâmetro                 | Descrição  |
|---------------------------|--|
| <i>Mol</i>                | Número da molécula.  |
| <i>Iso</i> <sup>(2)</sup> | Número do Isótopo.   |
| $\nu_0$                   | Número de onda no vácuo, em $\text{cm}^{-1}$ .   |
| <i>S</i>                  | Intensidade, em $\text{cm}^{-1} \cdot \text{molécula}^{-1} \cdot \text{cm}^2$ a 296 K.       |
| $ R ^2$                   | Probabilidade da transição ao quadrado, em Debye <sup>2</sup> .                              |
| <i>A</i>                  | Coefficiente de Einstein, em $\text{s}^{-1}$ .   |
| $\gamma_{ar}$             | Alargamento da MLMA pelo ar, em $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ , 296 K.                         |
| $\gamma_{auto}$           | Auto alargamento da MLMA, em $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ , 296 K.                            |
| $E''$                     | Energia do estado mais baixo, em $\text{cm}^{-1}$ .  |
| <i>n</i>                  | Coefficiente de dependência de temperatura de $\gamma_{ar}$ , adimensional                   |
| $\delta$                  | Deslocamento de linha por pressão do ar, em $\text{cm}^{-1}/\text{atm}$ .                    |
| $v'$                      | Índice quântico global do estado superior.   |
| $v''$                     | Índice quântico global do estado inferior.   |
| $Q'$                      | Números quânticos do estado superior.  |
| $Q''$                     | Números quânticos do estado inferior.  |
| <i>IER</i>                | Índices de precisão para frequência, intensidade e alargamento pelo ar.                      |
| <i>IREF</i>               | Índices para tabelas de referência correspondentes à frequência, intensidade e meia largura. |

Segundo Ribeiro (2006), como a base de dados foi criada para estudos atmosféricos, alguns pontos devem ser observados: (i) a intensidade integrada da linha de absorção inclui a abundância isotópica natural do isotopômero; (ii) o coeficiente  $n$  fornecido contempla somente a parcela da variação com a temperatura do alargamento por pressão do ar, a parcela referente a esta variação por pressão da própria molécula não aparece na base de dados; e (iii) o deslocamento da linha,  $\delta$ , se refere apenas à pressão exercida pelo ar. Neste caso, dados de deslocamento por pressão da própria molécula podem ser obtidos na literatura, quando necessários. Mais detalhes a respeito do tratamento espectroscópico de espécies moleculares e informações específicas do banco de dados HITRAN podem ser encontradas em Ribeiro (2006), Rothman et al. (2008).

### 4.3 Geração de Espectros e Procedimento de Cálculo

A aplicação do modelo CW exige a construção dos espectros de absorção das espécies químicas envolvidas. A partir das informações apresentadas até aqui é possível descrever alguns passos que devem ser seguidos, como segue:

*Passo 1:* obter os dados a partir do HITRAN/HITEMP, utilizando a interface JavaHAWKS. A faixa de temperaturas de aplicação do banco de dados é de 70 a 3000 K. Os parâmetros dependentes da temperatura, tais como a intensidade da linha,  $S_i$ ; as meias-larguras do ar,  $\gamma_{ar}$ , e o coeficiente de dependência da temperatura,  $n$ , os quais estão presentes nas Eqs.(2.12) e (2.13), são dados na temperatura desejada, enquanto que as meias-largura próprias,  $\gamma_{self}$ , são dadas na temperatura padrão de referência, 296 K. A Eq.(2.12) descreve o perfil de Lorentz. Para a construção do espectro esta pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\kappa_{\eta} = C_{\eta} = \sum_i \frac{S_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{(\eta - \eta_i)^2 + \gamma_i^2} \quad (4.1)$$

*Passo 2:* a seguir, depois da aquisição dos dados, é preciso corrigir as meias-larguras próprias, e.g., meia-largura da água  $\gamma_{\text{água}}$ . Isto é feito pela aplicação da Eq.(2.13).

*Passo 3:* uma vez que todos os dados estão ajustados, o espectro pode ser construído pela aplicação da Eq.(4.1). Esta equação avalia os efeitos do alargamento por colisões, os quais são os mais importantes em condições envolvendo a radiação infravermelha na engenharia.

*Passo 4:* calculam-se as funções  $w(C, \eta)$  para cada gás cinza fracional, conforme apresentado no Cap. 3.

Uma observação importante é que, para um único gás, a função  $w(C, \eta)$  é avaliada pela Eq.(3.2). No entanto, para uma mistura de gases, a função  $w(C, \eta)$  é obtida pela Eq.(3.6).

#### 4.4 Validação da Construção Espectral

Segundo Ribeiro (2006), o espectro de determinada espécie molecular é obtido a partir de uma simulação do perfil de Voigt através da convolução da largura Doppler (dependente da temperatura) da linha com o alargamento por pressão/colisões (alargamento por ar e auto-alargamento, que produzem um perfil de linha de Lorentz), na pressão de trabalho, a partir dos dados moleculares. De acordo com Siegel e Howell (2002), em aplicações de engenharia nas quais as temperaturas de interesse são mais elevadas e para faixas de número de onda específicas, o tipo de alargamento mais importante é o por colisões, descrito por Lorentz.

De modo a demonstrar que é possível negligenciar os demais alargamentos (que não sejam por pressão/colisões) é usado o *software* READHi (*Recognition of Experimental Absorption Data for Hitran species*), apresentado por Ribeiro (2006), o qual simula o perfil de Voigt e, após, esses resultados são comparados com o procedimento de construção espectral descrito na seção anterior.

Os resultados são para 100% de vapor d'água na temperatura de 1000 K, e pressão de 1 atm. Como pode ser observado na Figura 14, a qual apresenta apenas uma porção do espectro de alta-resolução, as linhas geradas pelos cálculos efetuados utilizando-se o READHi e as linhas geradas a partir da Eq.(4.1), que considera somente o alargamento por colisões, são perfeitamente coincidentes. Este resultado concorda com a afirmação de Siegel e Howell (2002). Como o procedimento de cálculo feito pelo *software* é extremamente demorado, devido à convolução dos perfis, a possibilidade de obtenção do espectro apenas pelo perfil de Lorentz gera um ganho de tempo de processamento significativo, de horas para segundos.

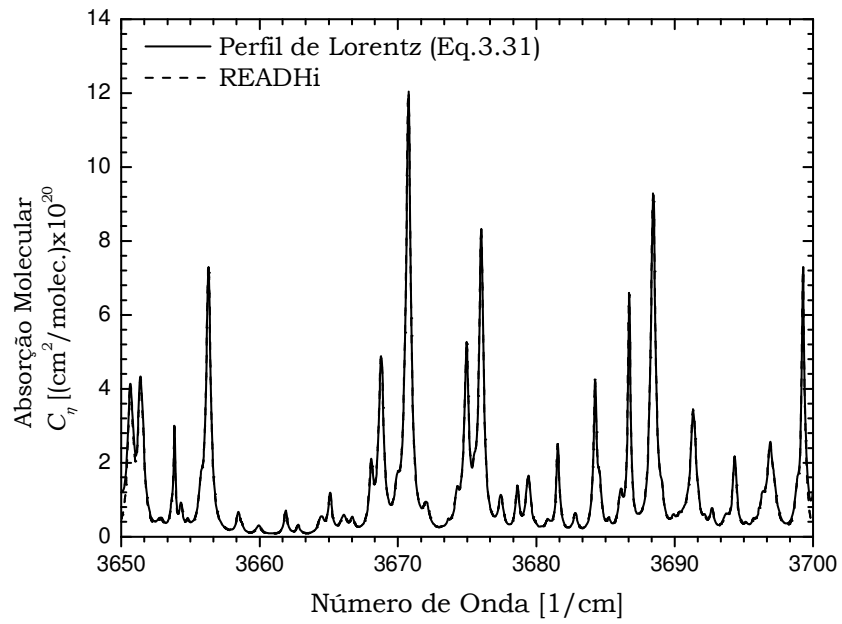


Figura 14 – Comparação entre o programa ReadHi e somente o perfil de Lorentz para espectros de alta-resolução, para 100% de  $\text{H}_2\text{O}$  a 1000 K.

## 5 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados resultados obtidos através da aplicação do modelo CW juntamente com os resultados fornecidos pela correção proposta ao modelo CWM, conforme descrito no Cap. 3. Os resultados são comparados com aqueles obtidos pela integração linha-por-linha (LBL) para problemas unidimensionais. São avaliados meios participantes uniformes e não uniformes. A equação de transporte é resolvida pelo método das ordenadas discretas.

### 5.1 Avaliação do banco de dados utilizado

Seja qual for o banco de dados moleculares utilizado, ao modelo CW é indiferente, pois a metodologia de modelagem será aplicada independentemente das informações terem sido obtidas através do HITRAN ou HITEMP. As variações que podem ocorrer nos resultados dependem somente da fonte de dados usada para gerar os espectros de absorção.

Segundo Solovjov e Webb (2002), a diferença entre os bancos de dados HITRAN e HITEMP para temperaturas inferiores a 1000 K é muito pouca, com exceção para alguns intervalos espectrais, pois o banco de dados HITEMP é significativamente mais completo na faixa de 0 – 10000  $\text{cm}^{-1}$ . Assim, nessas regiões a diferença é grande, como é apresentado na Figura 15.

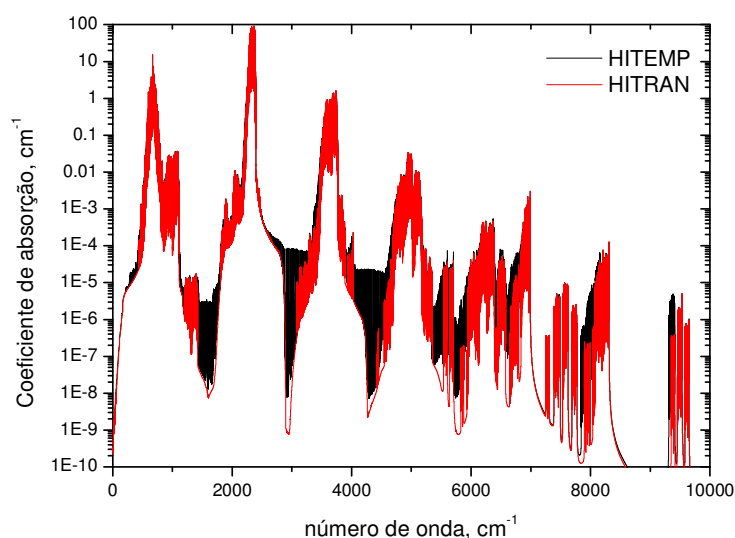


Figura 15 - Espectro obtido para 100%  $\text{CO}_2$  (Temperatura 750 K)



Para temperaturas mais elevadas essa diferença fica mais evidente, e diferenças significativas nos resultados para o coeficiente de absorção são observadas. Isso pode ser assumido como sendo uma extrapolação de correlações matemáticas de interpolação, as quais perdem a validade para valores de temperaturas que se encontram muito afastados daqueles utilizados como referência para a obtenção dos dados. Desta forma, a utilização do banco de dados HITEMP se torna mais interessante para os a obtenção de resultados mais realistas aos casos de combustão, uma vez que este banco de dados utiliza resultados empíricos para temperatura de referência em 1000 K. A Figura 16 apresenta os espectros obtidos por ambos os bancos de dados, considerando dióxido de carbono a 2000 K.

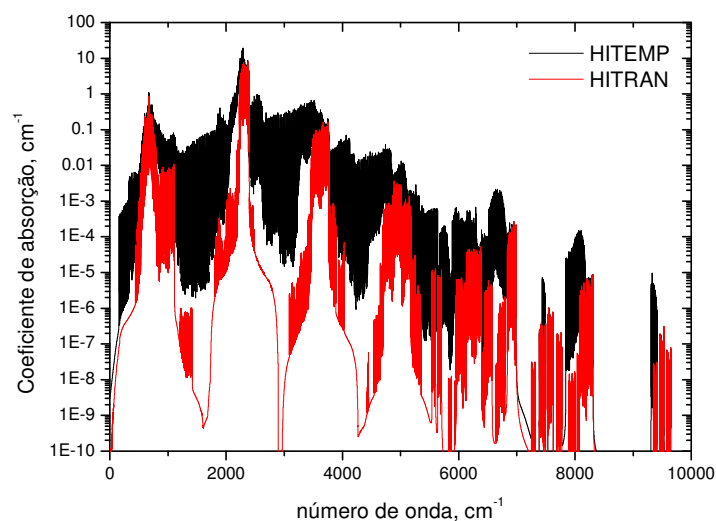


Figura 16 - Espectro obtido para 100% de CO<sub>2</sub> (Temperatura 2000 K)

Podemos observar que existem diferenças entre os dados do HITRAN e HITEMP. Para temperaturas abaixo de 1000 K, embora Solovjov e Webb (2002) tenham relatado que as diferenças não eram significativas, fica evidente que certas regiões do espectro acabam sendo consideradas “janelas” transparentes e, conseqüentemente, não levadas em conta nos cálculos da energia radiante.

Outra verificação que se faz necessária é avaliar o comportamento molecular quanto à variação da concentração. Modelos para a avaliação das propriedades radiantes de gases, como o CW, fazem uso da hipótese de que o espectro de absorção apenas se modifica na amplitude com a variação da concentração. Isto significa negligenciar a parcela de alargamento gerada pelas próprias moléculas. As Figura 17 e Figura 18 apresentam uma comparação, para avaliação desta hipótese, entre o dióxido de carbono e o vapor d’água, que são os principais gases resultantes da queima de hidrocarbonetos. Primeiramente calcula-se o espectro de um gás considerando uma

concentração,  $Y_s$ , a partir das Eqs. (2.12) e (2.13). Em seguida, calcula-se o espectro do gás considerando a substância pura, ou seja, 100%. Desta forma, segundo a hipótese descrita anteriormente, multiplicando-se o resultado obtido para a substância pura pela concentração desejada (utilizada no primeiro espectro),  $Y_s$ , resultaria no resultado idêntico ao mesmo.

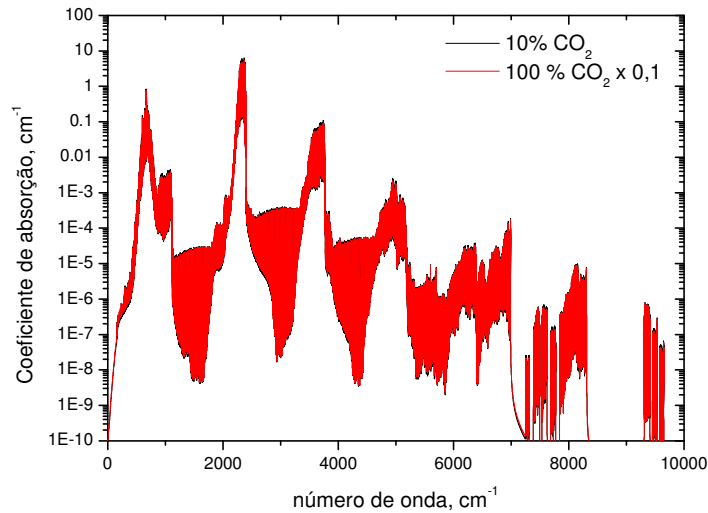


Figura 17 - Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de  $\text{CO}_2$  em relação à concentração à temperatura de 1000 K.

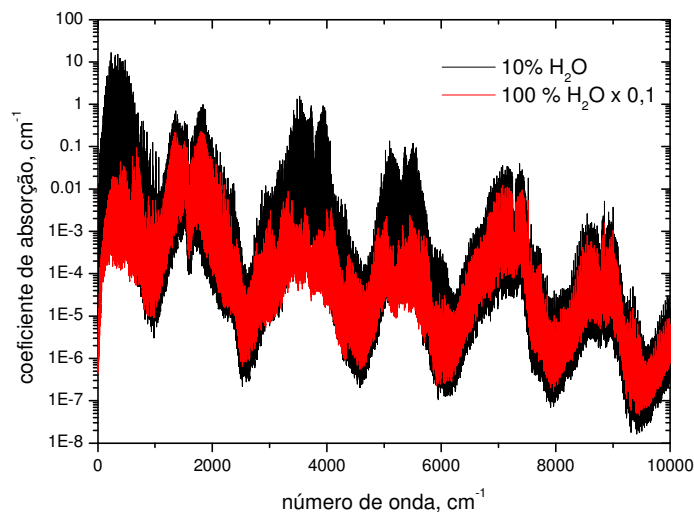


Figura 18 - Dependência do coeficiente de absorção das moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  em relação à concentração à temperatura de 1000 K.

A parcela de auto-alargamento para o dióxido de carbono, como pode ser visto na Figura 17, é insignificante, portanto, a hipótese pode ser aplicada sem restrições para concentrações menores que 100%, bastando multiplicar o coeficiente de absorção molecular pela

concentração desejada do gás. Por outro lado, como pode ser observado no espectro apresentado na Figura 18, para o vapor d'água, a hipótese de que o auto-alargamento pode ser negligenciado para a variação da concentração não é verificada. Os resultados, neste caso, não seriam confiáveis, apresentando uma significativa alteração dos coeficientes de absorção moleculares.

Assim, para o caso de aplicação de qualquer que seja o modelo usado para o meio participante, a molécula de  $H_2O$  não assegura a compatibilidade dos resultados para campos radiantes próximos do “real”, porém em nível de aproximação e funcionalidade dos modelos os dados moleculares podem ser usados. Casos em que as concentrações não variam também podem ser modelados sem problemas, uma vez que o espectro gerado seria aquele referente à concentração de interesse. Na presença de  $H_2O$ , para casos gerais, é aconselhada a aplicação do espectro em diferentes concentrações.

## 5.2 Validação

Pelo fato de o CW ser um modelo recente, havendo ainda poucos resultados disponíveis na literatura, a validação foi efetuada com auxílio de resultados apresentados para outros modelos, dentre eles a integração LBL (considerada *benchmark*). Tendo em vista que boa parte dos trabalhos existentes na literatura fizeram uso do banco de dados HITRAN04 (versão de 2004), o mesmo foi aplicado num primeiro momento.

### 5.2.1 Placa participante unidimensional

Tendo em vista que o foco do presente trabalho é de fundamentação teórica, ou seja, as análises são feitas com bases nas proposições físicas originalmente apresentadas por Solovjov e Webb (2002) e naquelas propostas para correção descritas no Cap.3 desta tese, o problema será tratado unidimensionalmente considerando duas placas planas, paralelas e infinitas com propriedades radiantes de corpo negro.

Para um problema unidimensional, aplicando ordenadas discretas, a Eq.(3.19) pode ser resolvida pelas seguintes relações apresentadas nas Eqs.(3.47) (a) e (b), considerando o modelo CW originalmente proposto, e nas Eqs.(3.60) (a) e (b) para os cálculos efetuados a partir da modificação apresentada neste trabalho. Para meios uniformes, independe a formulação, por razões explicadas mais à frente.

Tendo em vista que o foco principal desta tese é o estudo detalhado do efeito da dependência espectral das propriedades do meio participante na transferência de calor radiante, será considerada uma geometria unidimensional constituída por duas placas planas paralelas delimitando o meio. Elimina-se, assim, a complexidade geométrica do problema para facilitar o entendimento das diferenças entre o modelo CW e o método CWM, proposto nesta pesquisa para atender ao balanço de energia radiante no meio. Os resultados dos dois métodos serão comparados com a integração linha-por-linha (LBL) para diferentes perfis de temperatura e de concentração das espécies participantes.

Para tanto, as condições de contorno para este caso tem a forma:

$$J_{ij}^+(0, \mu_l) = J_{bij}(0) \quad (5.1)$$

$$J_{ij}^-(L, \mu_l) = J_{bij}(L) \quad (5.2)$$

Utilizando as intensidades dos gases cinzas fracionais, o fluxo radiante,  $q_R(x)$ , e a taxa volumétrica de geração de calor radiante,  $Q_R(x)$ , podem ser calculados por:

$$q_R(x) = \sum_{ij} q_{Rij}(x) \quad (5.3)$$

onde:

$$q_{Rij}(x) = 2\pi \sum_l \mu_l w_l [J_{ij}^{+(M)}(x, l) - J_{ij}^{-(M)}(x, l)] \quad (5.4)$$

$$Q_R(x) = \sum_{ij} Q_{Rij}(x) \quad (5.5)$$

onde:

$$Q_{Rij}(x) = 2\pi \kappa_j(x) \sum_l w_l [J_{ij}^{+(M)}(x, l) + J_{ij}^{-(M)}(x, l)] - 4\pi \kappa_j(x) J_{bij}(x) \quad (5.6)$$

### 5.2.2 Características de máquina e simulação

Para todos os casos analisados foram utilizados 20 gases cinzas, o  $\Delta_i = 100$  (número de divisões de banda cobrindo o espectro), a malha entre as paredes paralelas foi dividida em 100

elementos para  $L = 1$  m,  $L = 2$  m e  $L = 0,02$  m (câmara cilíndrica). O número de direções para o método de ordenadas discretas foi de 30, obtidas através da expansão dos polinômios de Legendre. O número de iterações para as funções de correção  $g_{ijl}(s)$ ,  $f_{ijl}^-(s)$  e  $f_{ijl}^+(s)$ , para os casos não uniformes, descritas no Cap.3 foi 10 (dez), juntamente com o critério de parada para diferença entre os valores “anteriores” e “atuais” de  $f_{ijl}^-(s)$  e  $f_{ijl}^+(s)$  sendo igual a  $10^{-14}$ . Os desvios percentuais quanto ao balanço de energia global, desvios médio e máximo encontrados para a solução LBL, embora não sejam altos, se devem ao fato da limitação quanto ao refinamento da malha e dos espectros utilizados. Por ser uma forma de solução bastante exaustiva computacionalmente um maior refinamento numérico não foi possível.

As características de *hardware* para as simulações são: CPU Intel® Pentium® dual-core 2GHz, DDR2 RAM 4GB. O compilador utilizado foi o *Compaq Visual FORTRAN v6.6*.

Observou-se que para o modelo CWM o tempo de simulação aumentou consideravelmente em relação ao modelo CW, cerca de 70 (setenta) vezes mais (de em torno de 3 segundos para o CW para 3,5 minutos para o CWM), a integração LBL leva aproximadamente 1,5 minutos. No entanto esse tempo, em casos bidimensionais aumenta significativamente de acordo com a literatura, o que não é esperado para o CWM, uma vez que os *loops* iterativos serão os mesmos. É importante lembrar que este tempo não contabiliza a extração de dados espectrais, os cálculos para a construção dos espectros e a montagem dos bancos de dados, é apenas o tempo de processamento da solução da equação de transporte pelo modelo. Por exemplo, o tempo para cálculo de um único espectro (para dada temperatura e dada concentração) é em torno de oito horas.

O modelo CW, proposto por Solovjov e Webb (2002), não utiliza da hipótese do  $k$ -correlacionado e esta é considerada a principal vantagem na predição dos resultados. Uma providência para facilitar o trabalho com este modelo é a criação de um banco de dados das funções  $w(C, \eta)$ . Assim, são construídos os espectros de absorção das espécies químicas de interesse para substância pura, *i.e.*, 100% de  $\text{CO}_2$ , e para um determinado número de coeficientes de absorção molar, distribuídos logaritmicamente,  $C_j$  – de  $10^{-17}$  até  $10^{-20}$   $\text{cm}^2/\text{molec.}$ . No banco de dados são gerados os espectros para uma faixa de temperatura que varia de 300 a 2600 K, com  $\Delta T = 50$  K. Com o banco de dados e fazendo uso de funções de interpolação, tem-se liberdade para trabalhar com quaisquer valores de coeficientes de absorção molar e de temperatura.

O desvio global do balanço de energia é calculado a partir da relação apresentada na Eq.(5.7).

$$\gamma_G = \frac{[q(s=0) - q(s=L)] - E_G}{E_G} \times 100\% \quad (5.7)$$

onde  $E_G$  é a energia gerada em  $\text{W/m}^3$  e dada por:

$$E_G = Q_{i=0} \times \frac{\Delta s}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} (Q_i \times \Delta s) + Q_{i=N} \times \frac{\Delta s}{2} \quad (5.8)$$

e  $\Delta s = L/N$ , sendo  $N$  o número de elementos de discretização e  $L$  a dimensão total entre as placas.

### 5.2.3 Meio homogêneo, Isotérmico

Para todos os casos desta seção, o meio participante preenche o espaço entre duas paredes negras paralelas infinitas, mantidas a 0 K. Este é constituído de 100% de vapor d'água à temperatura de 1000 K, e a distância entre as paredes é de 1.0 m. A Figura 19 mostra o divergente do fluxo (taxa volumétrica de geração de calor radiante) obtido através da modelagem CW comparado aos resultados de integração linha-por-linha apresentados por Denison e Webb (1993a).

Como podem ser observados, os resultados apresentam uma concordância bastante boa em relação à solução *benchmark*. Da mesma forma, o fluxo de calor nas paredes também teve uma boa predição, com um desvio relativo de 1,03%.

Outra comparação entre CW e LBL é apresentada na Figura 20. Neste caso as paredes são espaçadas em 2 m e mantidas a 0 K. O meio é constituído de 20% de vapor d'água e 80% de ar à temperatura de 1500 K. Nota-se que o divergente do fluxo radiante obtido utilizando-se o modelo CW, para este caso, também apresenta uma excelente concordância com os resultados de Denison e Webb (1993b). O desvio relativo dos fluxos nas paredes ficou em 1,5%.

Os combustíveis mais comuns são constituídos principalmente por hidrogênio e carbono, e são chamados combustíveis hidrocarbonetos. A combustão completa de combustíveis hidrocarbonetos produz gás constituído por vapor d'água e dióxido de carbono. Sua concentração depende do tipo de combustível e da razão ar/combustível na reação química. Para os três casos seguintes, os produtos da combustão estequiométrica do metano são considerados como a mistura de gás. Os resultados para as trocas radiantes são comparados com aqueles obtidos por Maurente *et al.*(2006), através do MC-ALBDF (*Monte Carlo applied to the Absorption-Line Blackbody Distribution Function*) para razões de excesso de ar de 50 e 100%.

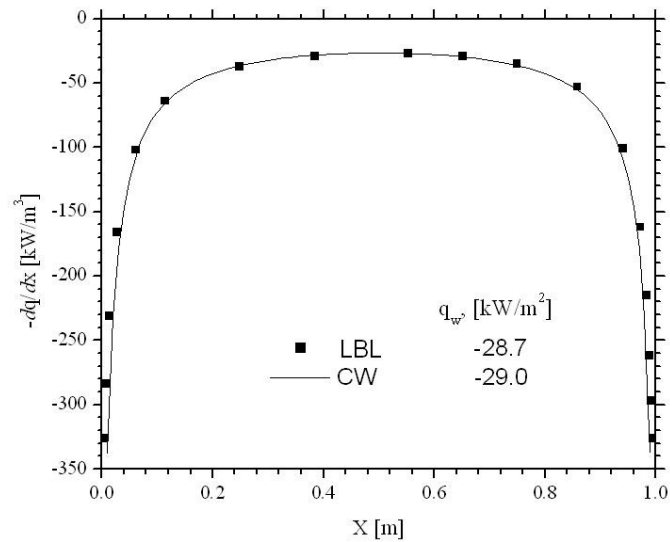


Figura 19 – Divergente do fluxo de calor radiante para um meio de 100% de H<sub>2</sub>O a 1000 K.

Três casos são comparados. *Caso 1*: reação com 50% de excesso de ar, com 13,1% de vapor d'água e 6,55% de CO<sub>2</sub>. *Caso 2*: reação com 100% de excesso de ar, com 10% de vapor d'água e 5% de CO<sub>2</sub>. *Caso 3*: combustão de octano, resultando em uma mistura com 14% de H<sub>2</sub>O e 12,5% de CO<sub>2</sub>, além de outras espécies não participantes. As temperaturas adiabáticas de chama consideradas para cada caso são de 1780 K, 1476 K e 2304 K, para o *Caso 1*, *Caso 2* e *Caso 3* respectivamente. As paredes são assumidas negras e mantidas a 300 K, afastadas a 1 m. A Figura 21 apresenta os resultados para o divergente do fluxo radiante e o fluxo de calor nas paredes.

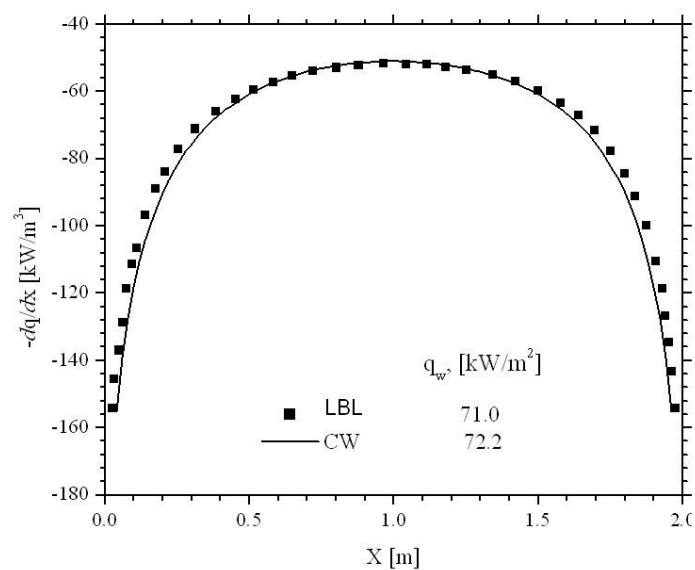


Figura 20 – Divergente do fluxo de calor radiante para um meio de 20% de H<sub>2</sub>O, 1500K.

Os resultados mostram uma aceitável concordância entre os valores encontrados pela aplicação do modelo CW e aqueles obtidos pelo método MC-ALBDF. Embora as curvas apresentem comportamentos semelhantes e estejam razoavelmente próximas umas das outras, os valores de fluxo de calor nas paredes apresentaram desvios significativos em todos os casos (7,3%, 27,2%, 18,2% para os casos 1, 2 e 3 respectivamente). Comparações com o LBL para estes resultados não são apresentadas devido ao fato de que para casos uniformes o modelo CW apresenta excelente concordância com a solução *benchmark*, como apresentado nos resultados anteriores, e também devido ao foco (neste caso) em comparar o CW com um modelo antecessor, considerado, da mesma forma, moderno na solução de meios participantes. Uma vez que o modelo CW é o que mais se aproxima das soluções LBL quando comparado com modelos ALB e SLW, de acordo com Solovjov e Webb (2002), a diferença entre os resultados para os modelos testados pode ser explicada por erros nas correlações para a função ALB que foram utilizadas na solução pelo MC-ALBDF.

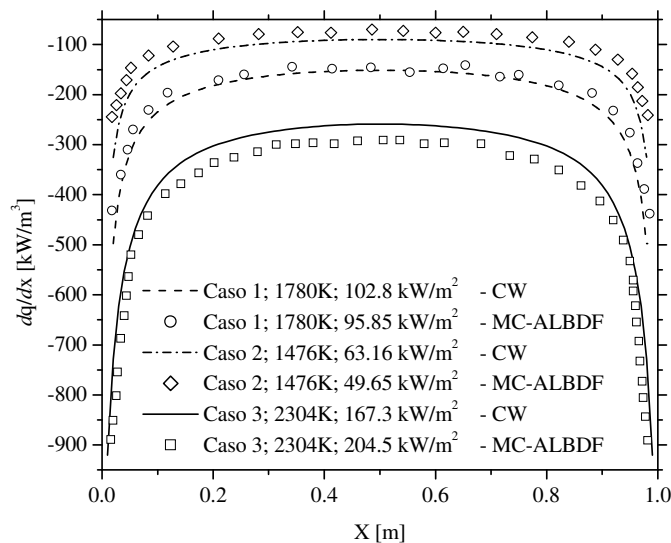


Figura 21 – Comparação de resultados obtidos com modelos CW e MC-ALBDF.

A Figura 22 mostra o efeito da concentração da espécie química para o caso quando as paredes são espaçadas em 1 m e mantidas à temperatura de 500 K. O meio é constituído por vapor d'água e ar (para os casos que consideram excesso de ar). A temperatura do meio é assumida como 1000 K. As concentrações de H<sub>2</sub>O variam de 10% até 100%. Como pode ser visto, nas regiões próximas ao centro (entre as duas paredes), *i. e.*, em torno de 0,5 m, o efeito da concentração do gás é muito pequeno. Isto ocorre devido ao fato do meio ser isotérmico, e desta forma os efeitos das paredes não contribuem significativamente no cálculo do divergente do



fluxo. Quanto mais próximo às paredes, maior é o efeito das paredes, conseqüentemente, maior é a energia trocada. O aumento da concentração do vapor d'água de 10% para 100% leva ao aumento do fluxo de calor nas paredes em mais de duas vezes, passando de -12,7 para -26,6kW/m<sup>2</sup>.

A partir desses resultados, conforme já era esperado de acordo com as observações feitas no Cap.3, para meios isotérmicos e com concentrações constantes, o modelo CW descreve bem os processos de transferência de energia radiante em gases participantes.

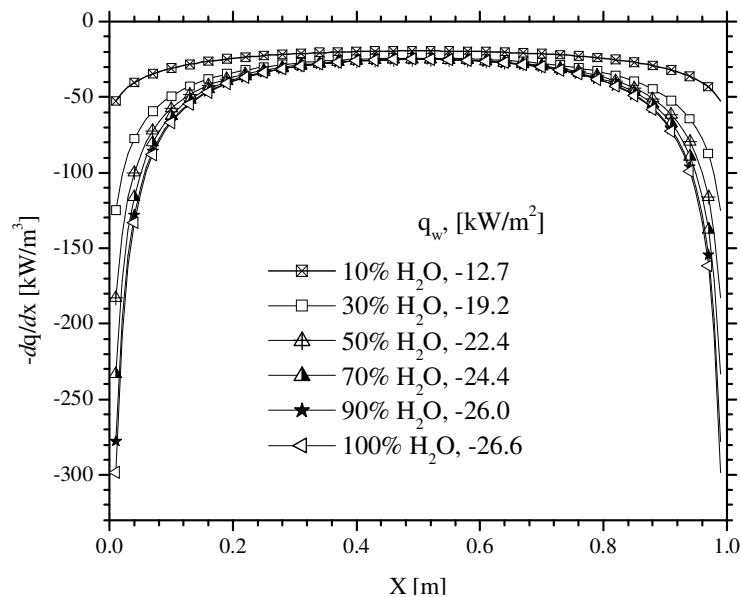


Figura 22 – Efeito da concentração de H<sub>2</sub>O na taxa volumétrica de geração de calor radiante.

O meio homogêneo e isotérmico é bem resolvido por boa parte dos modelos existentes na literatura, sendo o balanço de energia verificado e com excelente resposta. Para todos os casos uniformes os desvios não alcançaram o valor de 1%.

#### 5.2.4 Meios não uniformes

A formulação proposta neste trabalho, desenvolvida no Cap.3, procura resolver a inconsistência física da integração espectral e que é percebida através dos termos de correção espaciais,  $u_{ij}(s)$ . Os resultados para meios isotérmicos e homogêneos apresentaram boa concordância com a literatura devido ao fato de que nenhuma correção espacial é necessária, pois o estado termodinâmico do meio é todo ele idêntico. Assim, o problema do não atendimento ao balanço de energia fica evidenciado para casos em que o gás participante não é uniforme.

Uma vez que meios não uniformes, seja pela variação de temperatura e/ou concentração, representam melhor a realidade em problemas de engenharia envolvendo processos de combustão, um modelo que possa descrever o comportamento térmico de tais sistemas torna-se bastante útil.

Antes da solução de alguns casos, algumas verificações são analisadas. Solovjov e Webb (2002) afirmam que as diferenças entre as bases de dados HITRAN de diferentes edições e a base de dados HITEMP não resultam em diferenças significativas. Ainda assim, essa verificação é feita e apresentada na Figura 23. Conforme já foi mencionado, os modelos espectrais são aplicáveis independentemente dos dados utilizados, pois a formulação é de caráter fenomenológico e apenas recebe os valores espectrais (vindos dos bancos de dados) para efetuar a modelagem.

O problema considerou um meio homogêneo e não-isotérmico, sendo que o gás entre as duas placas paralelas (distantes 1 m) é o dióxido de carbono na concentração de 10%. O perfil de temperatura do meio é assumido parabólico e simétrico, variando de 500K nas paredes até 1000K no centro.

De acordo com o apresentado na Figura 17, para o CO<sub>2</sub>, eram esperados resultados com muito pouca diferença com relação ao banco de dados aplicado. Os resultados apresentados na Figura 23 mostram o divergente do fluxo radiante para o problema unidimensional supra descrito.

Devido ao fato de que não foram encontrados, na literatura, resultados obtidos com o modelo CW para o banco de dados HITRAN96, foram utilizados aqueles obtidos através da integração linha-por-linha apresentados por Modest *et al.* (2000). Estes dados já não estão mais disponíveis (pois foram atualizados), e a comparação foi feita com os bancos de dados HITRAN (2004) e HITEMP através do CW. A partir desta comparação fica evidente, mais uma vez, que mesmo para o dióxido de carbono as diferenças dos dados espectrais entre as duas bases não podem ser ignoradas.

A partir deste ponto, devido à falta de resultados na literatura, duas decisões foram tomadas:

- Fixar uma base de dados HITRAN ou HITEMP para tratar dos problemas não uniformes;
- O desenvolvimento de um código que gerasse resultados a partir da integração LBL com banco de dados atual para que as comparações possam ser todas na mesma base.

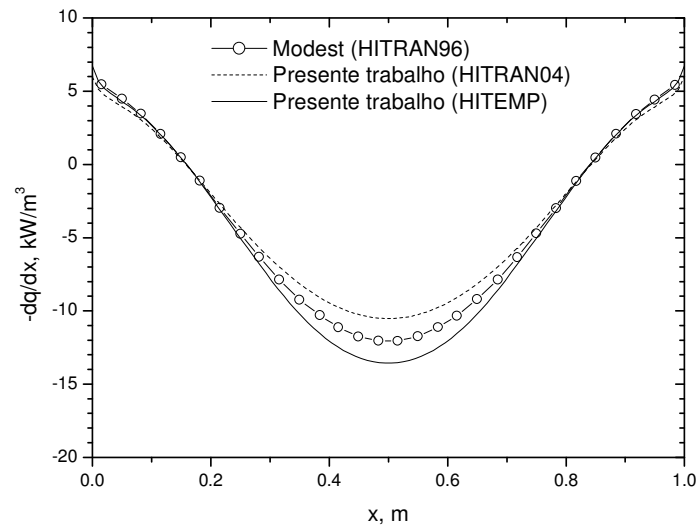


Figura 23 – Comparação de resultados para diferentes bancos de dados.

Assim, a escolha se deu pelo banco de dados HITEMP. Embora o modelo CW possa ser utilizado com qualquer que seja o banco de dados, o HITEMP é obtido a partir de temperaturas mais elevadas, considerando as “linhas-quentes” de absorção e, desta forma, representando um comportamento mais próximo ao real, uma vez que os próximos casos avaliam problemas não uniformes. Além disso, o banco de dados HITEMP é dividido em três partes, uma para cada gás – CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O e CO, de maneira que a utilização é direta e os dados de interesse (substâncias resultantes da combustão de metano ou óleo combustível) não necessitam ser extraídos de um arquivo maior (contendo todas as mais de 40 substâncias). As análises, a partir daqui, contemplam somente casos envolvendo o CO<sub>2</sub>, pois, conforme apresentado na Seção 5.1, a molécula de vapor d’água não apresenta comportamento padrão e previsível de acordo com a variação na concentração. Também, por ser este trabalho uma abordagem de fundamentos físicos, e é assumido que, uma vez utilizados os dados moleculares corretamente, o modelo será igualmente eficiente independentemente da molécula em questão.

#### 5.2.4.1 Meio homogêneo, não-isotérmico

Apresentam-se aqui os resultados para meios não-isotérmicos. Os casos avaliam o divergente do fluxo de calor radiante, bem como o próprio comportamento do fluxo de calor radiante. As equações fundamentais resolvidas são as mesmas que para os casos uniformes e isotérmicos. São comparados os resultados obtidos a partir da aplicação do modelo CW

apresentado por Solovjov e Webb (2002) e aqueles obtidos pelo modelo CW modificado, identificado agora como CWM.

Os casos analisados consideram uma camada de um meio composto por 10% de CO<sub>2</sub> com espessura de 1m entre duas placas planas infinitas e paralelas entre si. As propriedades radiantes das placas são assumidas como corpo negro. Os perfis de temperatura variam de um caso para outro e os resultados são comparados com resultados obtidos a partir da solução *benchmark* LBL. As propriedades radiantes do gás variam de acordo com o comportamento espectral da molécula envolvida, tendo como estado termodinâmico de referência padrão a temperatura média do meio.

O primeiro problema considera um perfil de temperatura parabólico e simétrico descrito pela Eq.(5.9).

$$T(x) = 1000 - 500 \left( \frac{2x}{L} - 1 \right)^2 \quad (5.9)$$

Este resultado é o único apresentado por Solovjov e Webb (2002) a partir da aplicação do modelo CW. Posteriormente em Solovjov e Webb (2008), o resultado é reproduzido com uma metodologia multicamada, a qual fez uso do modelo CW também. A Figura 24 mostra as curvas para o divergente do fluxo de calor radiante e o comportamento do fluxo de calor radiante obtidos pelas aplicações da modelagem CW original, CWM e LBL.

Os resultados na Figura 24 mostram que o divergente do fluxo de calor radiante, tanto para o modelo CW quanto para o CWM, apresentam boa concordância com a solução LBL. Diferenças pouco significativas são observadas entre estas curvas. Uma suave melhoria, à medida que se avança das paredes para o centro da camada participante, é observada para o CWM, enquanto que, aparentemente nas regiões próximas às paredes o CW original apresenta pontos um pouco mais próximos aos da curva *benchmark*, também de forma quase imperceptível. Assim, esperam-se curvas de fluxo de calor radiante com o mesmo comportamento e relativamente próximas à curva gerada pela solução LBL. Como pode ser visto na Figura 24b, o resultado apresentado pelo modelo CW original se afasta de maneira significativa da integração linha-por-linha nas regiões mais próximas às paredes, e assim o balanço de energia para o modelo não é atendido, apresentando um desvio global de 43,4%.

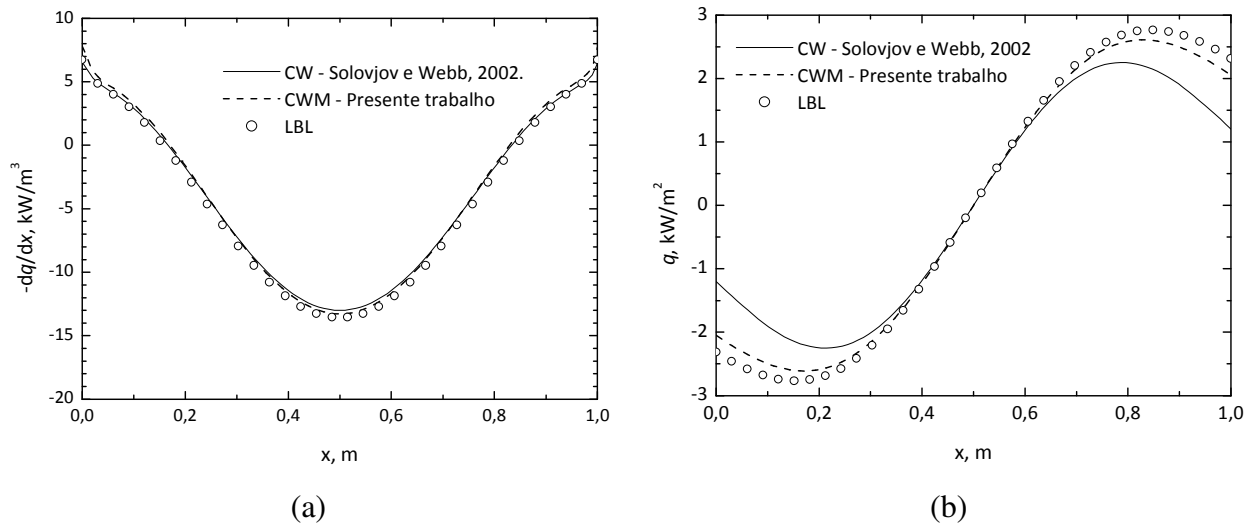


Figura 24 – (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura parabólico.

Uma vez que a integração do divergente do fluxo de calor radiante é o próprio fluxo de calor acrescido de uma constante, o comportamento da curva para o fluxo de calor deve ser o semelhante dos resultados *benchmark*. Esta semelhança é aferida tanto para o CW quanto para o CWM, mesmo com as diferenças apontadas. Porém, a derivada do fluxo de calor deve reproduzir o divergente, o que não se confirma para o modelo CW justamente pelo afastamento dos resultados nas regiões próximas às paredes (Apêndice A). Assim, além da verificação matemática com relação ao não respeito à conservação de energia radiante apresentada no Cap.3, na simulação numérica isto é confirmado.

O próximo caso simula um perfil linear de temperatura ao longo da camada de CO<sub>2</sub>, sendo o perfil de temperatura descrito pela Eq.(5.10). Os resultados para este são apresentados na Figura 25.

$$T(x) = 500 + 500 \left( \frac{x}{L} \right) \quad (5.10)$$

Novamente pode ser notada a boa concordância dos modelos CW e CWM com o LBL em relação ao divergente do fluxo. Como no caso anterior, poucas diferenças entre CW e CWM são evidenciadas no que diz respeito a este campo, o que era esperado, pois o exige-se que o divergente do fluxo radiante no CWM seja igual ao do CW; e o comportamento geral das curvas se aproxima aos resultados *benchmark*.

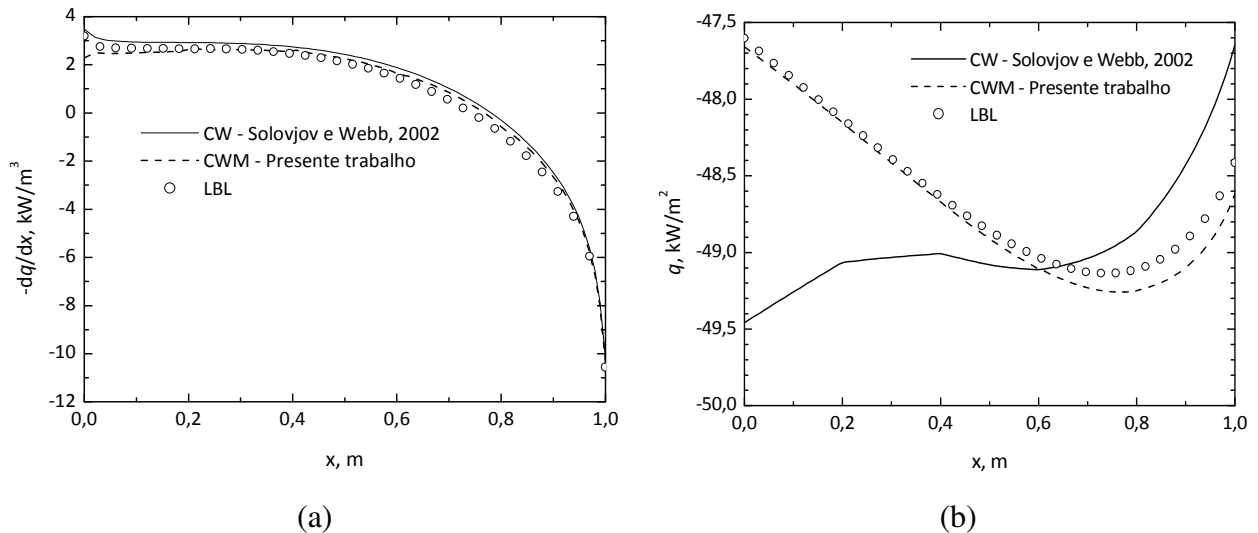


Figura 25 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura linear.

No entanto uma acentuada mudança de comportamento é observada para o resultado do fluxo de calor radiante com relação ao modelo CW. O correto seria, ao menos, que o formato da curva se mantivesse semelhante aos outros modelos, porém um desvio bastante abrupto é identificado na região próxima à parede da esquerda, onde  $x = 0$  m, para o modelo CW, consequência do não atendimento ao balanço de energia. Também pode ser visto que, embora a partir de  $x = 0,4$  m os resultados aparentemente apresentem uma tendência próxima ao esperado, e em seguida os valores rapidamente se afastam das outras duas soluções. Desta forma, o balanço de energia não se faz presente para a modelagem CW originalmente proposta, apresentando um desvio global de 256,02%, contra apenas 3,45% do CWM. Para a simulação que considera o CWM, uma boa concordância em termos de tendência de curva e de resultados é observada. A partir de  $x = 0,5$  m um pequeno desvio com relação à integração linha-por-linha se apresenta, o que coincide com aqueles também aparentes na curva do divergente para a mesma região.

Como pode ser observada, a simples variação do perfil de temperatura no meio ocasionou em um comportamento bastante inesperado para a solução que faz uso da modelagem original do CW. Assim, torna-se interessante a análise de outros perfis para se ter a idéia da extensão das divergências entre os modelos.

A próxima solução faz uso de um perfil senoidal para a variação da temperatura do meio, o qual é descrito pela Eq.(5.11). A Figura 26 mostra os resultados comparativos entre os modelos.

$$T(x) = 1000 - 500 \left[ \text{sen} \left( \frac{x\pi}{L} \right) \right] \quad (5.11)$$

Para o perfil de temperatura senoidal, conforme pode ser observado nos resultados, a concordância entre o modelo CWM e a solução LBL apresentaram-se de forma excelente. O modelo CW embora tenha fornecido resultados muito bons para o divergente de calor do fluxo radiante, com uma diferença, aparentemente pouco significativa para os valores em torno do centro,  $x = 0,5$  m, apresentou divergências significativas para o fluxo de calor à medida que o estado termodinâmico varia com a proximidade das paredes. Este resultado leva a crer, juntamente com o resultado anterior para o perfil linear, que o modelo CW é bastante sensível ao problema não-isotérmico, o que se deve seguramente às hipóteses equivocadas na integração incorreta da RTE em cada gás cinza fracional,  $D_{ij}$ . Aparentemente não existe um padrão, ou alguma tendência a ser esperada para o erro no cálculo do fluxo radiante no método CW com relação à mudança do perfil de temperatura. O desvio global para o balanço de energia deste caso apresentou 44,56% e 3,11% para os modelos CW e CWM, respectivamente.

Os perfis de temperaturas propostos até aqui eram relativamente suaves e sem variações abruptas de uma posição no meio à outra. No entanto, alguns processos térmicos em engenharia, como combustão, apresentam fortes gradientes de temperatura. De modo a analisar o desempenho dos modelos CW e CWM para uma variação mais brusca na temperatura no meio, considera-se em seguida o perfil exponencial apresentado abaixo:

$$\begin{aligned} T(x) &= 500e^{(\pi x/L)} & 0 \leq x \leq L/2 \\ T(x) &= 11570e^{(-\pi x/L)} & L/2 < x \leq L \end{aligned} \quad (5.12)$$

Os valores de temperatura variam entre 500K, nas proximidades das paredes, e atingem o valor máximo em torno de 2400K. Os resultados são mostrados na Figura 27.

Conforme podem ser observados, os resultados para esta situação não apresentaram tão boa concordância com aqueles obtidos pela solução LBL. O divergente do fluxo de calor radiante a partir dos modelos CW e CWM se manteve concordante entre ambos, porém os modelos mostram resultados afastados do *benchmark* na região mais próxima ao centro da camada de gás participante. Tendo em vista que a proposta do CWM é de corrigir o fechamento físico para o balanço de energia radiante, já era esperado que se o CW não apresentasse boa concordância com o LBL, o CWM também não poderia.

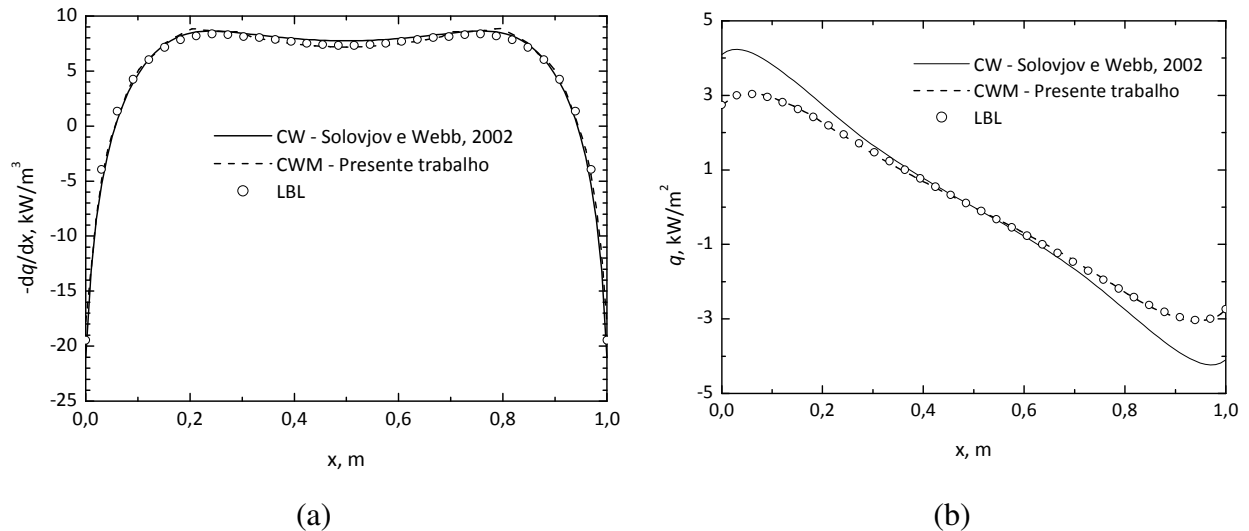


Figura 26 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura senoidal.

Embora em alguns dos resultados anteriores o divergente do fluxo de calor tenha sofrido algumas pequenas variações, quando se comparam os modelos original e modificado, estas não foram significativas e podem ter explicação em questões puramente numéricas, pois devido a questões de memória de máquina e limitações do compilador, maiores refinamentos não foram possíveis (malha, espectro, etc.).

Os resultados para o fluxo de calor radiante, conseqüentemente, mesmo para o CWM não apresentaram a mesma proximidade à curva da integração LBL vista nos casos anteriores. Ainda assim, o balanço de energia foi assegurado (2,74% de desvio global para o CWM e 83,80% para o CW).

Um último caso, para avaliação da resposta dos modelos CW e CWM quanto a campos não isotérmicos, é simulado. Neste, um problema real de combustão, Figura 28, é considerado através de resultados para uma câmara de combustão cilíndrica obtidos por Barve e Ezekoye (2006). O perfil de temperatura é assumido de forma unidimensional para a seção transversal localizada na coordenada azimutal  $x = 12\text{mm}$ , seção AA. As paredes da câmara cilíndrica são assumidas como negras. Os resultados são apresentados na Figura 29 para o divergente do fluxo de calor radiante, bem como para o fluxo de calor radiante. São comparados os modelos CW e CWM com aquele considerado o *benchmark*, LBL. A concentração de gás no interior da câmara é fixada em 10% de  $\text{CO}_2$ .



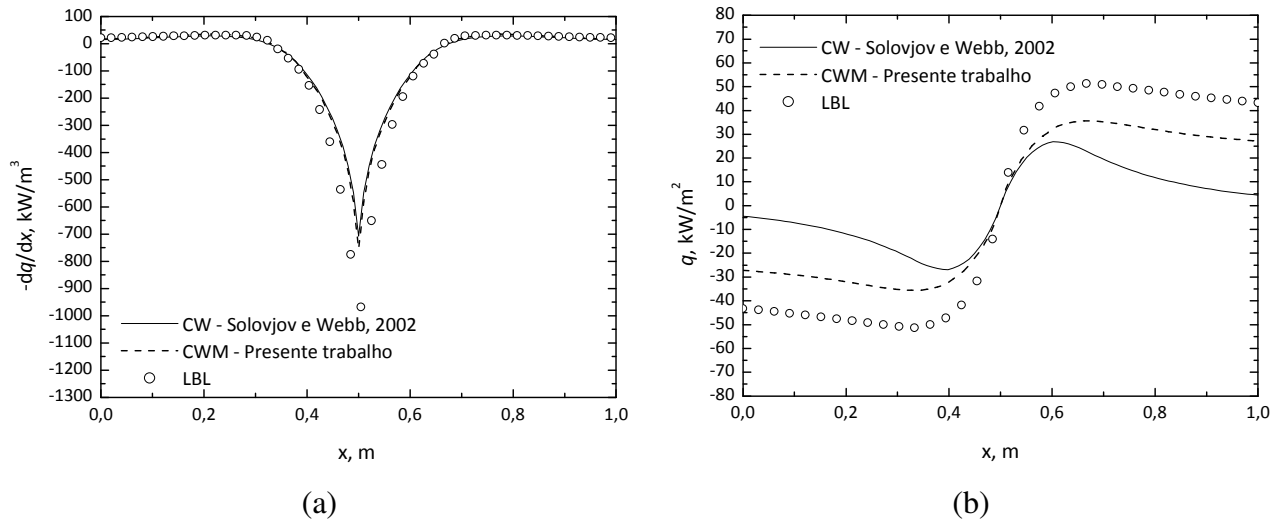


Figura 27 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura exponencial.

Conforme pode ser visto nos resultados da Figura 29, as curvas para o divergente do fluxo de calor radiante apresentaram concordância muito boa com os valores obtidos através da solução LBL. Este resultado é bastante positivo, pois retrata uma variação mais coerente com a realidade para problemas de engenharia em casos de combustão. A faixa de temperatura para este caso não diferiu muito daquelas aplicadas nos casos anteriores, porém os gradientes de temperatura, nesta câmara, são bem mais intensos tendo em vista que a camada de meio participante é somente 20 mm e, nesta pequena dimensão a temperatura varia de 450 K até 1950K.

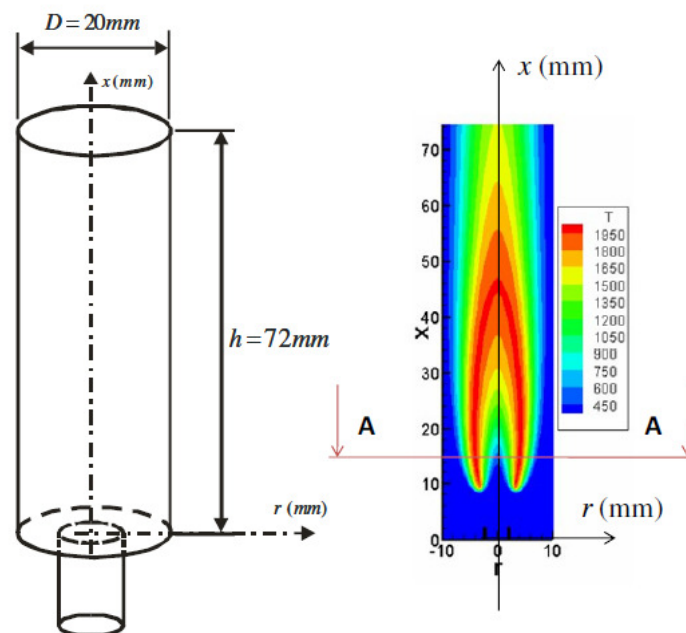


Figura 28 – Esquema representativo da câmara de combustão cilíndrica e campo de temperatura obtido por Barve e Ezekoye (2006).

O fluxo de calor radiante respondeu de forma mais concordante para o CWM do que para o CW, como era esperado, e o balanço de energia é encontrado com desvio global menor para o modelo modificado (1,6%) em relação ao original (73,41%).

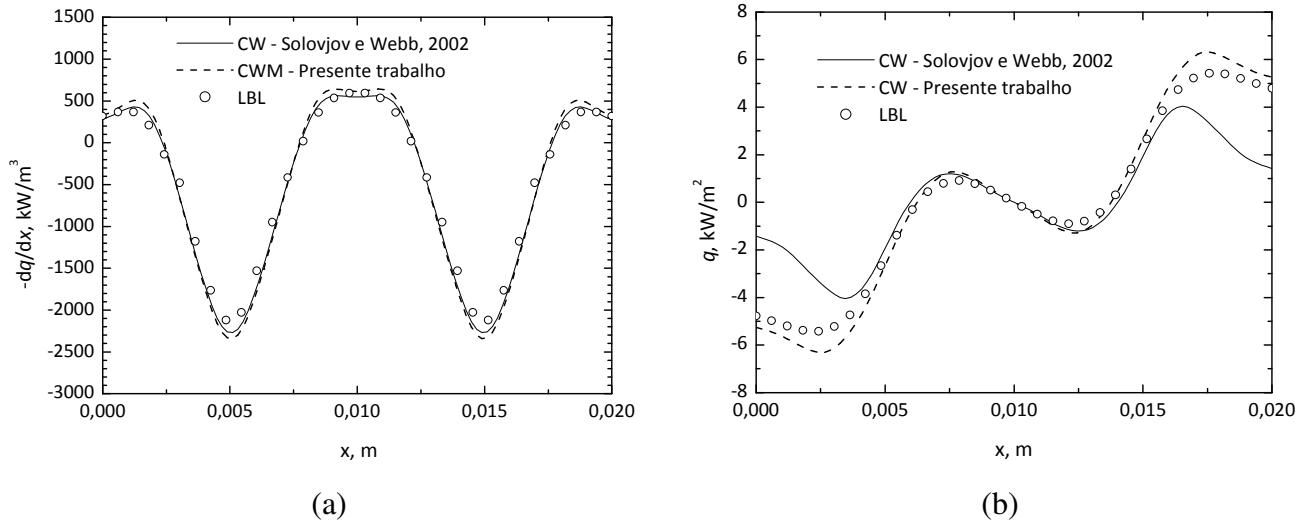


Figura 29 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de temperatura de acordo com Barve e Ezekoye (2006).

Uma vez que a proposta de modificação do modelo CW para o CWM é corrigir o comportamento do fluxo de calor, garantindo o atendimento da conservação de energia, e manter o resultado para o divergente do fluxo de calor radiante, para os casos homogêneos e não-isotérmicos isto é assegurado. De forma a dar uma visão geral dos casos não-isotérmicos simulados até aqui, a Tabela 3 traz os valores para os desvios global, médio local e máximo local do balanço de energia encontrados em cada situação e para cada um dos modelos, calculados a partir das Eqs.(5.7) e (5.13). A Eq. (5.13) representa o desvio local para o balanço de energia, assim os valores médios apresentados na Tabela 3 são obtidos através da média de todos os desvios locais de cada caso, sendo o valor de desvio máximo o maior valor encontrado na amostragem de dados. A comparação das diferenças locais quanto ao balanço de energia são apresentadas no Apêndice A.

$$\gamma(s) = \frac{[q(s - \Delta s) - q(s + \Delta s)] - Q(s) \times 2\Delta s}{Q_{MAX} \times 2\Delta s} \times 100 \quad (5.13)$$

Tabela 3 – Comparação entre os desvios globais para o balanço de energia entre os modelos CW e CWM para casos não-isotérmicos.

| Temperatura       | CW         |        |        | CWM        |        |        | LBL        |        |        |
|-------------------|------------|--------|--------|------------|--------|--------|------------|--------|--------|
|                   | Desvio (%) |        |        | Desvio (%) |        |        | Desvio (%) |        |        |
|                   | Médio      | Máximo | Global | Médio      | Máximo | Global | Médio      | Máximo | Global |
| Parabólico        | 10,63      | 17,23  | 43,40  | 1,42       | 3,50   | 1,81   | 2,61       | 4,41   | 0,73   |
| Linear            | 19,91      | 50,20  | 256,02 | 0,24       | 3,44   | 3,45   | 1,29       | 2,79   | 2,60   |
| Senoidal          | 10,45      | 31,42  | 44,56  | 1,50       | 4,40   | 3,11   | 1,57       | 3,22   | 0,23   |
| Exponencial       | 4,70       | 20,48  | 83,80  | 0,08       | 7,34   | 2,74   | 0,28       | 3,81   | 0,24   |
| Câmara Cilíndrica | 6,44       | 40,11  | 73,41  | 1,95       | 4,46   | 1,60   | 0,46       | 3,19   | 0,68   |

### 5.2.4.2 Meio não-homogêneo, não-isotérmico

Para os casos não-isotérmicos observou-se que a correção proposta apresentou resultados de boa concordância em relação àqueles obtidos pela solução *benchmark*. No entanto, a solução da RTE também é afetada por variações na concentração do gás participante. Desta forma, é adicionada mais uma dificuldade na solução do problema. Para o mesmo sistema unidimensional alguns casos são simulados aplicando-se perfis para variação de concentração do gás juntamente com perfis de temperatura para a camada de meio participante. O gás é mantido como dióxido de carbono. A variação do estado termodinâmico no meio participante faz uso das Eqs. (5.9), (5.10), (5.11) e (5.12) para descrever o comportamento da temperatura, e das Eqs.(5.14), (5.15), (5.16) e (5.17) para a avaliação das variações na concentração do CO<sub>2</sub> em parabólica, linear, senoidal e exponencial, respectivamente. Algumas combinações são testadas e avaliadas quanto ao desempenho dos modelos CW e CWM.

$$Y_{CO_2}(x) = 0,2 - 0,15 \left( 2 \frac{x}{L} - 1 \right)^2 \quad (5.14)$$

$$Y_{CO_2}(x) = 0,15 \left( \frac{x}{L} \right) + 0,05 \quad (5.15)$$

$$Y_{CO_2}(x) = 0,05 + 0,15 \left[ \text{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right] \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned}
 Y_{CO_2}(x) &= 0,05e^{(\pi x/L)} & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\
 Y_{CO_2}(x) &= 1,157e^{(-\pi x/L)} & \frac{L}{2} < x < L
 \end{aligned}
 \tag{5.17}$$

Resultados para todas as combinações foram analisados, porém apenas alguns serão apresentados em virtude de que certos casos são “redundantes”, ou seja, o fato de se levar em conta a variação da concentração não representou mudanças significativas. A primeira situação considera a combinação de perfis parabólicos, tanto para a temperatura quanto para a concentração de gás ao longo do meio. Os resultados são apresentados na Figura 30.

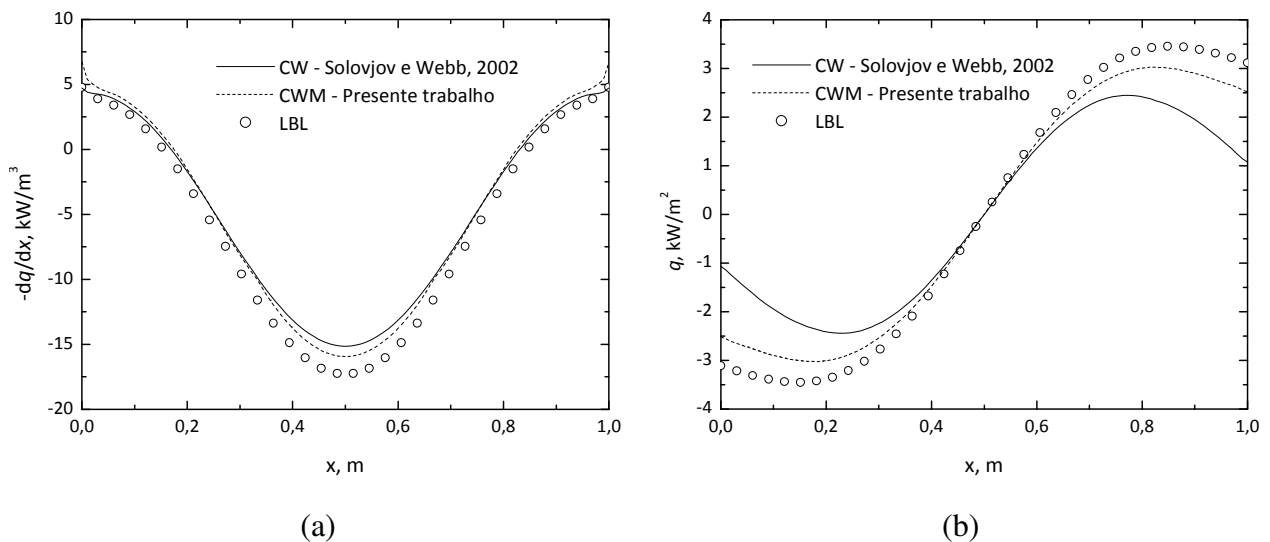


Figura 30 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – parabólico; concentração - parabólico.

A concordância dos resultados do CW e CWM para o divergente do fluxo radiante, em relação à solução LBL, não foram tão boa se comparada ao caso em que somente a temperatura varia. Em particular, os resultados encontrados para a região central encontram-se mais afastados. No entanto, a questão do balanço de energia radiante (desvio global de 2,25% para o CWM e 55,91% para o CW) é novamente observada e, assim, o comportamento do fluxo de calor radiante apresentou um comportamento mais coerente para o modelo CWM.

Ainda com o perfil de temperatura parabólico, uma combinação com um perfil linear para a concentração foi simulada. A Figura 31 traz os resultados comparativos.

Como pode ser observado na Figura 31, o resultado para o divergente do fluxo de calor radiante obtido a partir do modelo CWM permanece seguindo o comportamento esperado e

muito próximo à curva de resultados do modelo CW. Notam-se valores um pouco mais elevados para o divergente do fluxo de calor para localizações próximas à parede do lado direito. Uma vez que o perfil linear é adotado para a variação da concentração este comportamento é esperado, pois a concentração aumenta no sentido de  $x = 1\text{m}$ . Assim, com uma maior concentração de  $\text{CO}_2$ , mais energia é absorvida pelos elementos de gás e, conseqüentemente, maior é o gradiente de temperatura com relação à parede direita; uma vez que a temperatura é a mesma para ambas as paredes (perfil de temperatura é parabólico).

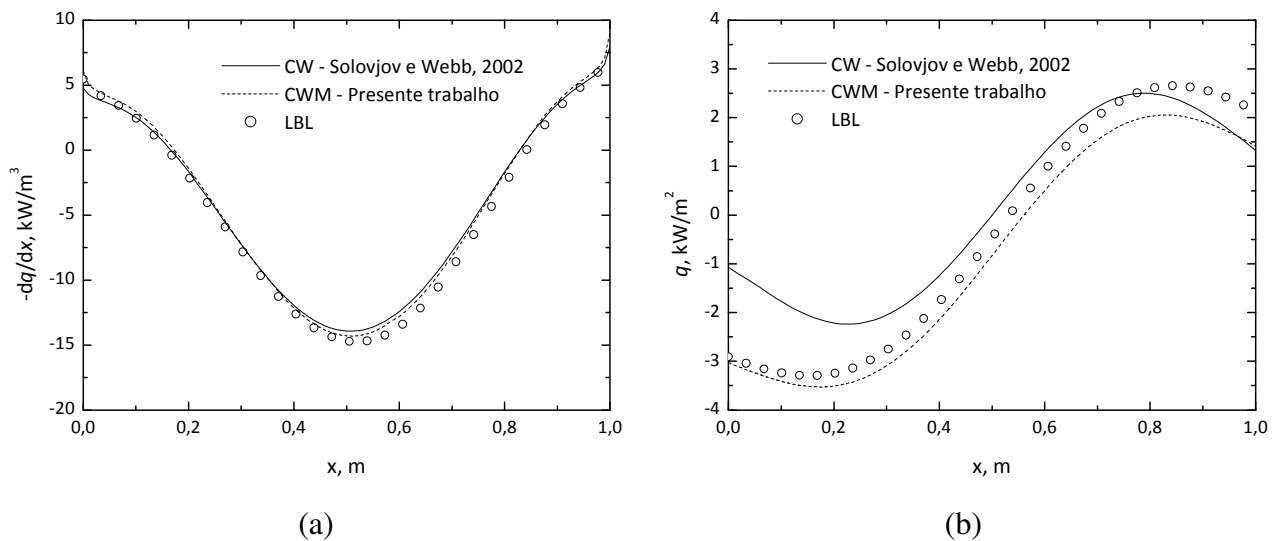


Figura 31 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – parabólico; concentração - linear.

Os resultados do fluxo de calor radiante para o modelo CWM também para este caso se mostraram melhores em relação ao CW. Entretanto é notável que a proximidade da curva do fluxo para o modelo modificado não se manteve tão boa quanto os casos anteriores, porém a conservação de energia é garantida, apresentando um desvio global de 3,1% (45,20% para o CW).

Claramente, a inclusão de mais uma variação de propriedade (concentração), além da temperatura tornou o problema mais complexo de ser compreendido. São muitos os termos de correção  $u_{ij}(s)$ , bem como são muitas as variáveis envolvidas nos cálculos. Conforme Solovjov e Webb (2002) afirmam, estes termos locais são artifícios matemáticos sem uma explicação física, o que dificulta ainda mais o tratamento dos mesmos. Desta forma, a concordância não tão boa do modelo modificado se deve às próprias limitações do modelo original.

O próximo caso considera perfis lineares para a temperatura e concentração de dióxido de carbono. É sugerida a simulação deste devido ao fato de que, aparentemente, o perfil linear da

concentração foi responsável pelos maiores desvios no caso anterior. Os resultados são mostrados na Figura 32.

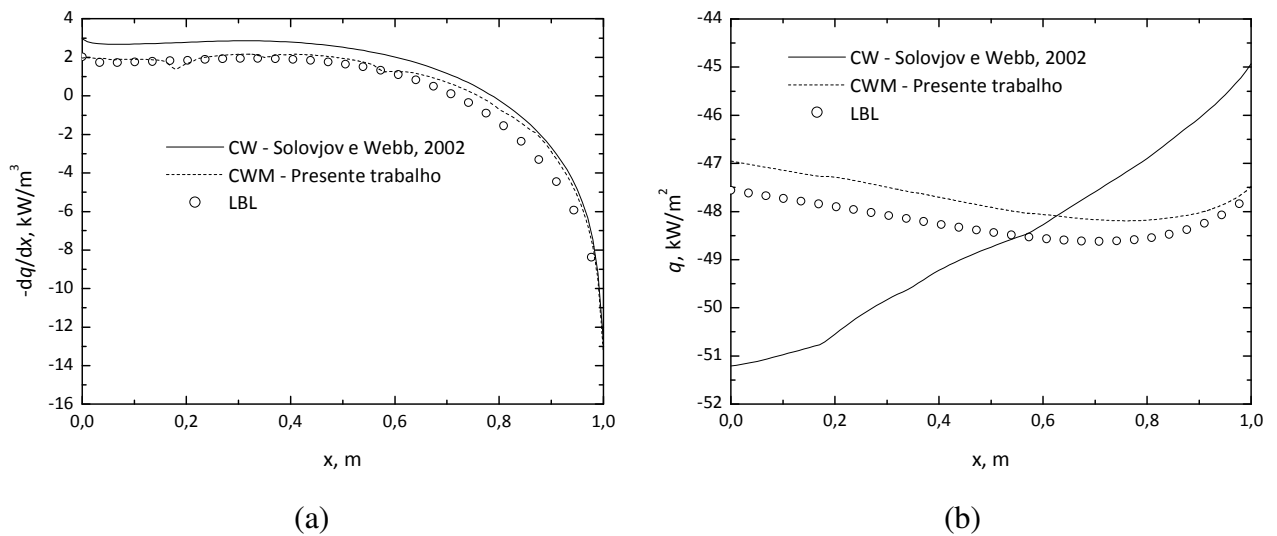


Figura 32 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – linear; concentração - linear.

Conforme pode ser visto nos resultados, a aplicação de ambos os perfis como lineares apresenta resultados para o modelo CWM em boa concordância com a solução *benchmark*. Mesmo podendo assumir que os resultados para o divergente do fluxo de calor radiante obtidos pelo modelo CW são aceitáveis (dentro das limitações da modelagem), é sugerido que o modelo modificado levou os resultados para mais próximos da curva dada pela solução LBL. Quanto ao comportamento do fluxo de calor radiante, fica evidente a melhoria em relação o CW. O balanço de energia apresentou um baixo desvio para o CWM (2,5%), enquanto o modelo original gera um valor significativamente alto, 616,24%.

De maneira a verificar o comportamento dos resultados a partir de uma concentração que varia linearmente, uma nova simulação é feita a partir de um perfil de temperatura exponencial. As curvas destes resultados são apresentadas na Figura 33.

Assim como no caso homogêneo e não-isotérmico para o perfil de temperatura exponencial (Figura 27), os resultados da Figura 33 apresentaram boa concordância entre os modelos CW e CWM para o divergente do fluxo de calor. Pelos mesmos motivos de limitação da modelagem inerentes ao CW, a curva obtida pela integração linha-por-linha apresentou valores para o divergente um pouco maiores em direção ao centro da camada de CO<sub>2</sub>. As curvas que comparam o comportamento do fluxo de calor também apontam uma maior proximidade dos resultados gerados a partir da modelagem CWM com relação à solução LBL. Da mesma forma,

o balanço de energia é mantido pela modificação proposta no presente trabalho, com desvio global de 2,2% contra 85,42% para o CW.

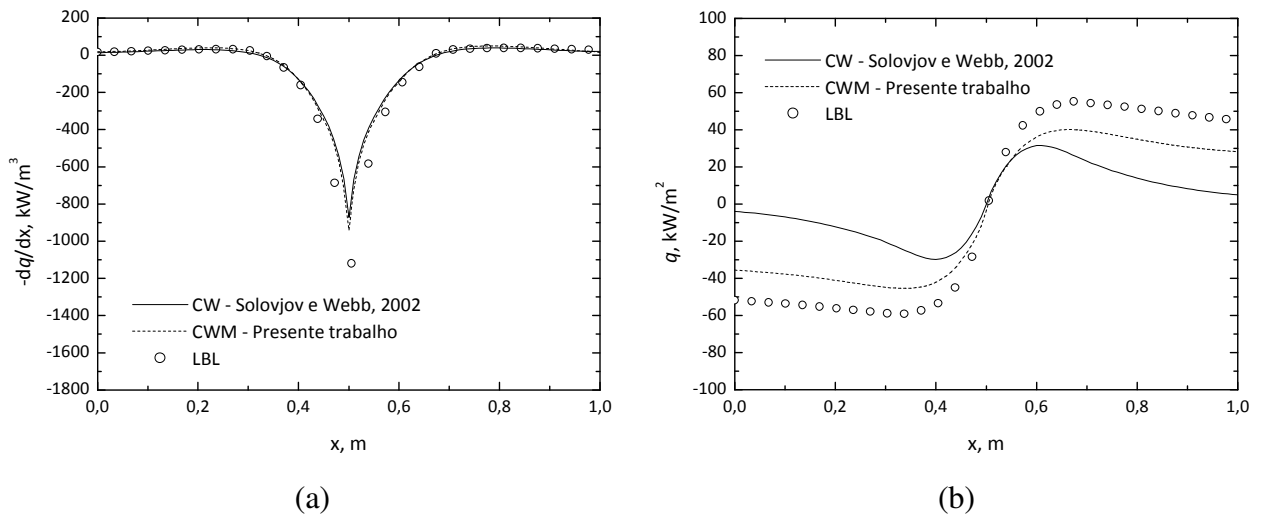


Figura 33 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – exponencial; concentração - linear.

Uma possível explicação para que o perfil de concentração linear não tenha influenciado significativamente os resultados em relação ao caso homogêneo, pode ser o fato de que com um perfil de temperatura exponencial os gradientes são influenciados em sua maior parte devido à variação de temperatura ser mais pronunciada, e assim o domínio dos fenômenos físicos de transferência de energia fica por conta do campo de temperatura. Com o propósito de verificar isto, simulações que consideram os outros perfis de concentração combinados com o perfil de temperatura exponencial foram feitas. Os resultados mostraram-se com pouca variação em relação a esse apresentado na Figura 33, e não serão todos apresentados aqui. No entanto o caso mais extremo dentre esses, o qual considera ambos os perfis exponenciais é mostrado na Figura 34. Todas as outras combinações de perfis apresentaram variações que se encaixam entre estes dois conjuntos de curvas (Figura 33 e Figura 34).

Para este caso, combinando ambos os perfis exponenciais, é possível notar um maior afastamento das curvas CWM e CW para o divergente do fluxo de calor em relação à curva LBL. Este maior afastamento, como consequência, acabou aparecendo também nas curvas que descrevem o fluxo de calor radiante. No entanto, com a modelagem CWM, a conservação de energia radiante foi observada, atendendo ao propósito da correção ao modelo deste trabalho (3,01% de desvio).

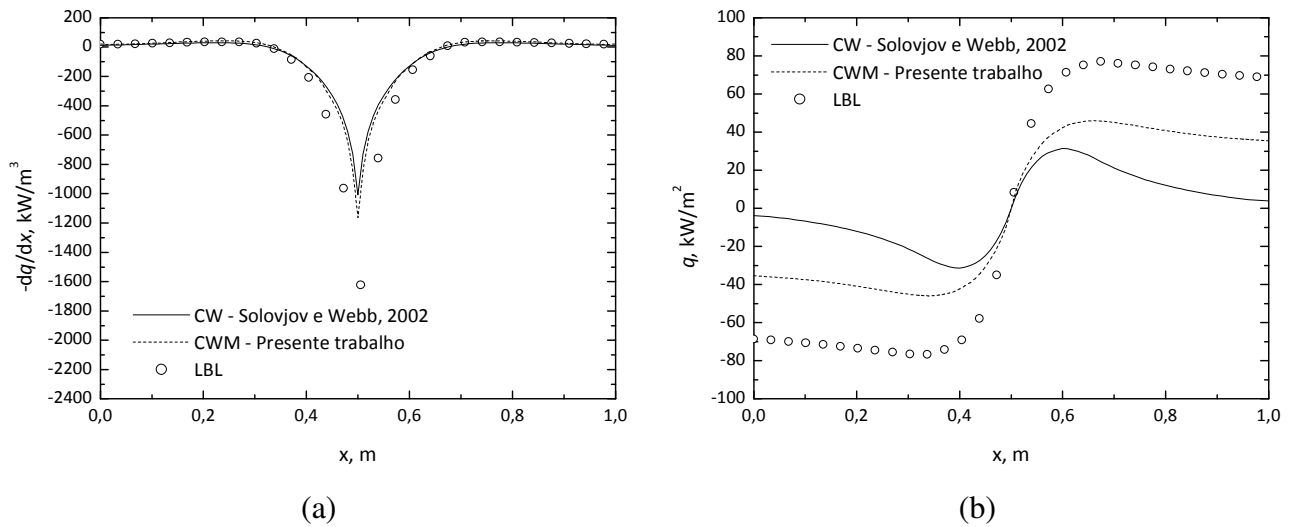


Figura 34 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – exponencial; concentração - exponencial.

De forma a avaliar outras possibilidades de variações para a concentração do gás, casos que consideram perfis senoidais para a mesma também são simulados. O próximo caso faz uso de um comportamento parabólico para a temperatura enquanto a concentração varia de forma senoidal. A Figura 35 apresenta esses resultados.

Como podem ser notados, os resultados praticamente se repetiram com relação àqueles apresentados na Figura 30, ou seja, a consideração de um perfil para concentração menos “comportado” não apresentou grandes influências. Novamente é sugerido que as oscilações na concentração são muito pouco percebidas pelo meio em termos de troca térmica para valores baixos, e normalmente encontrados nas misturas geradas por processos de combustão (queima de metano ou óleo combustível). Assim, novamente é possível observar a melhor concordância do modelo CWM com relação ao LBL. Os resultados não se sobrepuseram, mas isto fica a cargo das limitações e aproximações impostas pelo modelo CW original. A partir das correções apresentadas aqui, o balanço de energia é verificado para os casos apresentados até o momento e, um comparativo destes é apresentado na Tabela 4 no final desta seção.



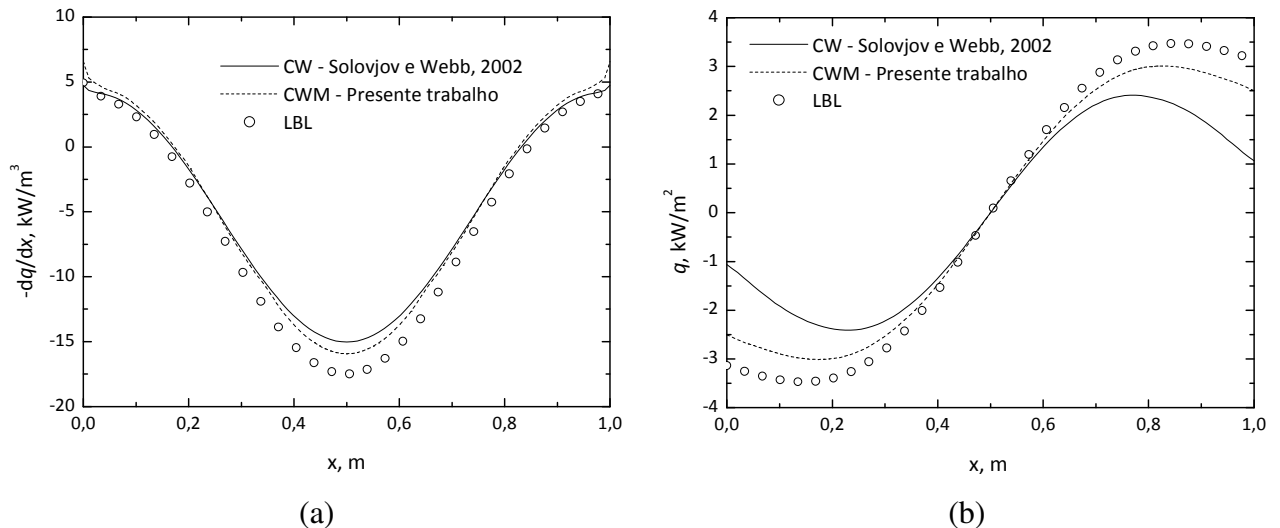


Figura 35 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – parabólica; concentração - senoidal.

De um modo geral, os resultados tem se mostrado dentro dos padrões encontrados para as soluções LBL. Os desvios entre os modelos são inerentes às hipóteses assumidas como simplificações. Porém, nem todas as possibilidades de combinações analisadas apresentaram-se de maneira esperada, como é o caso dos dois próximos conjuntos de resultados, Figura 36 e Figura 37. Estes casos, devido impossibilidade de um melhor refinamento numérico, não estão completamente convergidos. No entanto, apresentam uma tendência em atender bem à modificação, como pode ser visto, também, nos resultados da Tabela 4.

Conforme mostrado, os resultados da simulação que considera variação de temperatura linear em conjunto a uma variação senoidal da concentração, para o divergente do fluxo de calor radiante apresentaram algumas instabilidades para o modelo CWM. Instabilidades semelhantes também são encontradas no caso quando a temperatura apresenta um perfil linear em conjunto a uma concentração exponencial, Figura 37. Por outro lado, mesmo com estas instabilidades, os resultados mostram uma aparente tendência em “seguir” a curva da solução LBL. A modelagem de meios participantes por si só já é bastante complexa, somado a isto, as modificações propostas neste trabalho adicionam novas variáveis a esta, aumentando o número de cálculos a serem efetuados e, conseqüentemente, exigindo maior desempenho computacional.

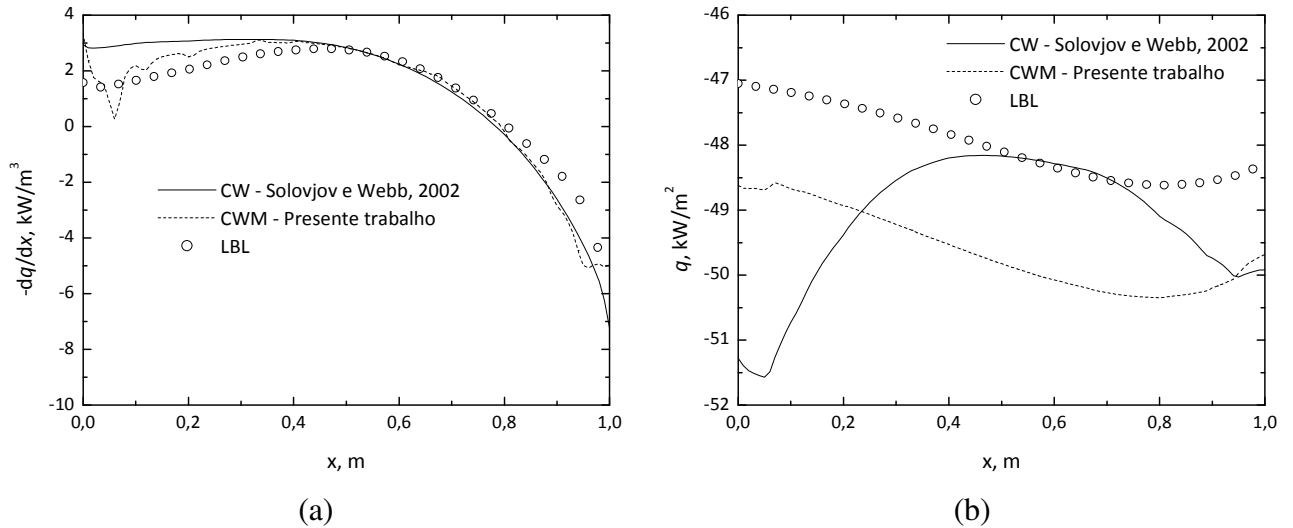


Figura 36 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – linear; concentração - senoidal.

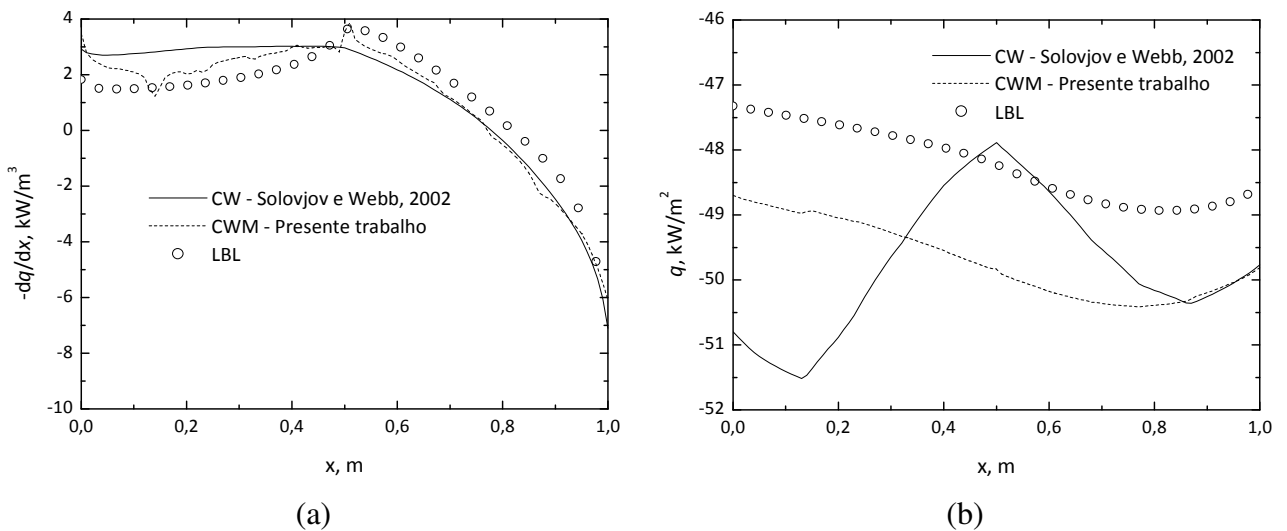


Figura 37 - (a) Divergente do fluxo de calor radiante; (b) Fluxo de calor radiante. Perfil de: temperatura – linear; concentração - exponencial.

Com base na maioria dos resultados apresentados, os quais demonstram boa concordância entre si, é possível que estas instabilidades sejam oriundas da necessidade de maiores refinamentos de malha espectral e/ou do sistema unidimensional. Estes refinamentos não foram possíveis devido às limitações de utilização de memória do compilador utilizado. No entanto, lembrando que as modificações neste trabalho propostas visam corrigir o comportamento do fluxo de calor radiante, podendo-se assumir que o modelo CW gera

resultados aceitáveis para o divergente do fluxo de calor radiante, pode ser visto que neste sentido houve uma melhora significativa para todos os casos.

Tabela 4 - Comparação entre os desvios globais para o balanço de energia entre os modelos CW e CWM para casos não-homogêneos e não-isotérmicos.

| <i>Temperatura/<br/>Concentração</i> | <b>CW</b>         |               |               | <b>CWM</b>        |               |               | <b>LBL</b>        |               |               |
|--------------------------------------|-------------------|---------------|---------------|-------------------|---------------|---------------|-------------------|---------------|---------------|
|                                      | <b>Desvio (%)</b> |               |               | <b>Desvio (%)</b> |               |               | <b>Desvio (%)</b> |               |               |
|                                      | <i>Médio</i>      | <i>Máximo</i> | <i>Global</i> | <i>Médio</i>      | <i>Máximo</i> | <i>Global</i> | <i>Médio</i>      | <i>Máximo</i> | <i>Global</i> |
| Parabólico / Parabólico              | 19,90             | 35,74         | 55,91         | 2,30              | 5,86          | 2,25          | 2,70              | 4,05          | 0,38          |
| Parabólico / Linear                  | 16,71             | 29,57         | 45,20         | 1,80              | 4,60          | 3,10          | 2,80              | 4,41          | 0,43          |
| Linear / Linear                      | 118,19            | 178,45        | 616,24        | 0,49              | 5,50          | 2,50          | 0,76              | 4,32          | 0,36          |
| Exponencial / Linear                 | 5,14              | 21,70         | 85,42         | 0,15              | 6,20          | 2,20          | 0,37              | 3,23          | 0,46          |
| Exponencial / Exponencial            | 5,19              | 25,83         | 88,50         | 0,14              | 7,52          | 3,01          | 0,29              | 2,55          | 0,58          |
| Parabólico / Senoidal                | 20,50             | 33,62         | 56,01         | 2,20              | 5,40          | 4,40          | 2,90              | 4,38          | 0,51          |
| Linear / Senoidal                    | 116,56            | 474,74        | 192,34        | 1,30              | 15,20         | 2,92          | 1,79              | 3,61          | 0,38          |
| Linear / Exponencial                 | 137,43            | 358,23        | 161,12        | 2,80              | 14,30         | 4,79          | 1,21              | 3,87          | 0,39          |

A melhor concordância das curvas, para o fluxo de calor, geradas pelo modelo CWM pode ser vista no formato geral das mesmas em relação ao LBL, além disto, o modelo modificado proposto aqui garante a conservação de energia. Um panorama geral dos desvios quanto ao balanço de energia global, médio local e máximo local são apresentados na Tabela 4, calculados a partir das Eqs. (5.7) e (5.13).

## 6 CONCLUSÕES E PROPOSTAS DE TRABALHOS FUTUROS

O trabalho tratou de modelos avançados para o tratamento das propriedades radiantes em gases e, em maior detalhe apresentou o modelo do número de onda cumulativo, CW, suas hipóteses simplificadoras e suas limitações. Foi identificada uma inconsistência física na formulação proposta por Solovjov e Webb (2002), a qual não garante que o balanço de energia radiante no meio seja satisfeito. Uma formulação modificada foi proposta com o intuito de garantir o fechamento físico do problema, tornando a modelagem conservativa. Devido às grandes mudanças no equacionamento, considerou-se justificável dar um novo nome ao método proposto para distinção do método original, passando a ser identificado como CWM, sendo acrescido o *M* de *Modificado*.

Foram analisados os resultados para um sistema unidimensional formado por duas placas planas perfeitamente negras e paralelas. Os gases participantes considerados foram o dióxido de carbono e o vapor d'água, escolhidos por serem produtos típicos da combustão de gases e óleos combustíveis. Uma primeira validação bem sucedida do modelo CW foi feita considerando-se meios isotérmicos e homogêneos, comparando-se os resultados gerados com os modelos MC-ALBDF e LBL. Casos não uniformes foram posteriormente avaliados e a falha da modelagem CW se evidenciou para meios não isotérmicos e homogêneos, se estendendo aos meios não isotérmicos e não homogêneos. Os resultados avaliaram os comportamentos do divergente do fluxo de calor radiante, bem como do fluxo de calor radiante, e a comparação foi feita entre o modelo originalmente proposto, CW, juntamente com aqueles obtidos pelo modelo CWM e LBL. O gás considerado para as simulações em meios não uniformes foi o CO<sub>2</sub> devido ao comportamento irregular do espectro de vapor d'água, que é intrínseco à espécie química. Com relação aos bancos de dados espectrais, foi observado que a hipótese adotada pela maioria dos modelos de gases participantes, a qual descreve uma variação por interpolação para espectros de uma mesma espécie química com relação à temperatura e concentração, não se faz valer para moléculas de H<sub>2</sub>O. Devido a esse comportamento, a utilização do vapor d'água não foi utilizada no estudo pois seria imposto um esforço computacional muito maior. O banco de dados utilizado para a obtenção das propriedades espectrais de absorção/emissão foi o HITEMP. Foi apresentada no trabalho a forma de obtenção e geração dos bancos de dados espectrais para a aplicação nos modelos CW e CWM.

As equações de transporte radiante (RTE) foram resolvidas pela utilização do método das ordenadas discretas (DOM), por este ser um método de simples implementação para casos unidimensionais, além de apresentar uma rápida e boa solução.

Os resultados apresentados mostraram que a modelagem original, CW, apresenta valores para o divergente do fluxo de calor radiante em boa concordância com aqueles gerados a partir da integração linha-por-linha para todos os casos estudados em meios não uniformes. A falha do modelo original se dá na integração da RTE nos gases cinzas fracionais, a qual, para meios uniformes não apresenta variação devido ao estado termodinâmico ser idêntico em qualquer localização no sistema. Com isso, os resultados para o fluxo de calor radiante calculado pelo modelo CW não seguem a mesma tendência daqueles apresentados pela solução LBL, não atendendo à conservação de energia. A modelagem CWM mostrou, para todos os casos analisados, significativa melhora no comportamento do fluxo de calor radiante, bem como no desvio relativo ao balanço de energia (global e local). Ficou evidenciado, também, que ao incluir a variação da concentração da espécie química ao problema a complexidade da solução aumentou, pois como são muitas as variáveis envolvidas nos cálculos, os erros associados à solução foram mais percebidos para os casos em que se considerou a variação de temperatura e concentração combinadas. É preciso reforçar como o modelo CW ainda serve de base para o modelo CWM, parte dos erros ainda permanecem no método proposto devido às limitações existentes na formulação original.

Por outro lado, o método CWM impôs um custo computacional muito maior do que o método CW. Este aumento foi causado pela inserção de dois grandes “loops” ao modelo original, o que fez com que o CW fosse resolvido com 100 (cem) vezes mais equações (dependendo do número de passos iterativos para as funções  $g_{ijl}(s)$ ,  $f_{ijl}^-(s)$  e  $f_{ijl}^+(s)$ ). Pelo fato de que a proposição garante o balanço de energia fazendo uso de artifícios matemáticos na sua formulação, esta forma de solução é apenas uma dentre as infinitas possíveis funções que podem ser propostas para as funções  $f_{ijl}^-(s)$  e  $f_{ijl}^+(s)$ .

De uma forma geral, o modelo CWM garantiu o atendimento da conservação de energia radiante, corrigindo os resultados para o fluxo de calor radiante e mostrando uma melhor concordância como a solução LBL, quando comparado ao modelo CW.

Algumas propostas de continuidade da pesquisa são apresentadas a seguir. Estas visam reduzir as dificuldades até aqui encontradas pra os futuros trabalhos em modelagem de gases participantes em radiação térmica. São elas:

- Elaboração de um algoritmo amigável que possa fazer a extração dos dados dos bancos de dados (HITRAN, HITEMP, CDSD-1000, etc.), de forma direta a partir

do arquivo completo do banco de dados. Neste trabalho, os dados foram extraídos por partes, com auxílio do JavaHAWKS, o qual não estará mais disponível, pois está em fase de extinção. O mesmo algoritmo pode ser responsável pela construção dos espectros de acordo com as temperaturas de interesse do usuário. Esta etapa foi feita de forma separada, após a extração dos dados pelo JavaHAWKS. Um algoritmo com esta característica certamente reduziria o tempo de construção do banco de dados espectrais para utilização nos modelos CW e CWM;

- Testar o desempenho do modelo para outras condições de simulação. Incluindo novos perfis de temperatura e concentração; outras espécies químicas; misturas; mudança das condições de contorno, aplicando paredes cinza, por exemplo. São esperadas respostas igualmente boas para o CWM com estas condições, no entanto novas condições podem auxiliar no aparecimento de novas alternativas para solução do erro existente no modelo CW;
- Avaliar novas funções de correção para serem inseridas no CWM, visando, principalmente reduzir o tempo computacional elevado, que atualmente é a maior desvantagem do novo modelo. Uma possível alternativa é a busca de funções as quais tragam uma abordagem mais física do que apenas matemática aos termos de correção;
- Verificar o desempenho dos modelos, tanto CW quanto CWM em problemas bidimensionais;
- Analisar a possibilidade de combinar modelos anteriores (SLW, FSCK, MC-ALBDF, etc.) com a nova formulação do CWM, buscando mais simplicidade de implementação e agilidade computacional.

**REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

Abramowitz, M., Stegun, I. A., 1972, “**Handbook of Mathematical Functions**”, Whashington: Federal Bureau of Standards.

Barve, V. V., Ezekoye, O., 2006, “Computations of Strongly Forced Laminar Cold-Flow Jet and Methane-Air Diffusion Flames”, **M. S. Thesis, Univ. do Texas**, Austin, Texas.

Chandrasekhar, Subrahmanyan, 1960, “**Radiative Transfer**”, Dover, New York.

Denison, M. K., Webb, B. W., 1993a, “A Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary RTE Solvers”, **J. Heat Transfer**, Vol. 115, pp. 1004-1012.

Denison, M. K., Webb, B. W., 1993b, “An Absorption-Line Blackbody Distribution Function for Efficient Calculation of Total Gas Radiative Transfer”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 50, pp. 499-510.

Denison, M. K., Webb, B. W., 1995a, “Development and Application of an Absorption-Line Blackbody Distribution Function for CO<sub>2</sub>”, **J. Heat Mass Transfer**, Vol. 10, pp. 1813-1821.

Denison, M. K., Webb, B. W., 1995b, “The Spectral Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model in Nonisothermal Nonhomogeneous Media”, **J. Heat Transfer**, Vol. 117, pp. 359-365.

Denison, M. K., Webb, B. W., 1995c, “The Spectral-Line Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> Mixtures”, **J. Heat Transfer**, Vol. 117, pp. 788-792.

Fiveland, W. A., 1991, “The Selection of Discrete Ordinate Quadrature Sets for Anisotropic Scattering”, **Fundamentals of Radiation Heat Transfer**, Vol. 160, pp.89 – 96.

Galarça, M. M., Maurente, A., Vielmo, H. A., França, F. H., 2008, “Correlations for The Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model Using Data Generated From The Absorption-Line Blackbody Distribution Function”, *In Press. Proceedings of the 12<sup>th</sup> Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, ENCIT 2008*. Belo Horizonte, MG.

Goody, R. M., e Yung, Y. L., 1989, “**Atmopheric Radiation**”, Oxford University Press, 2<sup>nd</sup> edition, New York.

Goody, R., West, L., Chen, L., Crisp, D., 1989, “The Correlated- $k$  Method for Radiation Calculations in Nonhomogeneous Atmospheres”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 42, pp. 539-550.

Hartmann, J. M., Leon, R. L., Taine, J., 1984, “Line-by-Line and Narrow-Band Statistical Model Calculations for H<sub>2</sub>O”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 32, pp. 119-127.

HITRAN database, Disponível em: <<http://cfa-www.harvard.edu/hitran/>>. Acesso em: 9 out. 2007.

Hottel, H. C. e Cohen, E. S., 1958, “Radiant heat exchange in a gas-filled enclosure: allowance for nonuniformity of gas temperature”, **AIChE Journal**, Vol. 4, pp. 3-14.

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

Lathrop, K. D., Carlson, B. G., 1965, “Discrete-Ordinates Angular Quadrature of The Neutron Transport Equation”, **Technical Information Series Report LASL-3186**, Los Alamos Scientific Laboratory.

Liu, F., Smallwood, G. J., Gülder, Ö. L., 2000, “Application of the Statistical Narrow-Band Correlated- $k$  Method to Low-Resolution Spectral Intensity and Radiative Heat Transfer Calculations – Effects of the Quadrature Scheme”, **J. Thermophys. Heat Transfer**, Vol. 43, n. 17, pp. 3119-3135.

Marin, O., Buckius, R., 1996, “Wide Band Correlated- $k$  Method Applied to Absorbing, Emitting and Scattering Media”, **J. Thermophys. Heat Transfer**, Vol. 10, pp. 364-371.

Maurente, A., Vielmo, H. A., França, F. H. R., 2007, “A Monte Carlo Implementation to Solve Radiation Heat Transfer in Non-uniform Media With Spectrally Dependent Properties”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 108, pp. 295-307.

Maurente, A., Vielmo, H. A., França, F. H. R., 2008, “Comparison of The Standard Weighted-Sum-of-Gray-Gases With The Absorption-Line Blackbody Distribution Function for The Computation of Radiative Heat Transfer in H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> Mixtures”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 109, pp. 1758-1770.



McClatchey, R.A., Benedict, W.S., Clough, S.A., Burch, D.E., Calfee, R.F., Fox, K., Rothman, L.S., Garing, J.S., 1973, "AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation," **AFCRL-TR-0096**.

Modest, M. F., 1991, "The Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model for Arbitrary Solution Methods in Radiative Transfer", **J. Heat Transfer**, Vol. 113, pp. 650-656.

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

Modest, M. F., Zhang, H., 2000, "The Full-Spectrum Correlated- $k$  Distribution and Its Relationship to the Weighted-Sum-Of-Gray-Gases Method". **Proceeding of the 2000 IMECE**, Vol. HTD-366-1, ASME, Orlando, FL, pp. 75-84.

Modest, M. F., Zhang, H., 2002, "The Full-Spectrum Correlated- $k$  Distribution for Thermal Radiation From Molecular Gas-Particulates Mixtures", **J. Heat Transfer**, Vol. 124, pp. 30-38.

Moura, L. M., Baillis, D., Sacadura, J. F., 1998, "Análise do Método de Ordenadas Discretas: Discretização Espacial", **Proceedings of the 7<sup>th</sup> Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, ENCIT 1998**, Rio de Janeiro, RJ.

Özişik, M. N., 1973, "**Radiative Transfer**", Wiley, New York.

Rao, K. N., 1985, "**Molecular Spectroscopy: Modern Research, III**". New York: Academic Press, Inc..

Ribeiro, R. J., 2006, "Simulação de Espectros de Absorção Para Determinação de Temperaturas em Chamas", **Dissertação de Mestrado**, INPE, São José dos Campos. 144p.

Rothman, L. S.; Jacquemart, D.; Barbe, A.; Benner, D.C.; Birk, M.; Brown, L.R.; Carleer, M.R.; Chackerian Jr., C.; Chance, K.; Coudert, L.H.; Dana, V.; Devi, V.M.; Flaud, J. -M.; Gamache, R.R.; Goldman, A.; Hartmann, J. -M.; Jucks, K.W.; Maki, A.G.; Mandin, J. -Y.; Massie, S. T.; Orphal, J.; Perrin, A.; Rinsland, C. P.; Smith, M. A.H.; Tennyson, J.; Tolchenov, R. N.; Toth, R. A.; Auwera, J. V.; Varanasi, P.; Wagner, G., 2005, "The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database", **J. Quant. Spectrosc. Radiant. Transfer**, Vol. 96, p. 139-204.

Rothman, L. S.; Gordon, I.E., Barbe, A., Benner, D.C., Bernarth, P.F., Birk, M., Boudon, V., Brown, L.R., Campargue, A., Champion, J.P., Chance, K., Coudert, L.H., Dana, V., Devi, V.M., Fally, S., Flaud, J.M., Gamache, R.R., Goldman, A., Jacquemart, D., Kleiner, I., Lacombe, N., Lafferty, W.J., Mandin, J.Y., Massie, S.T., Mikhailenko, S.N., Miller, C.E., Moazzen-Ahmadi, N., Naumenko, O.V., Nikitin, A.V., Orphal, J., Peravalov, V.I., Perrin, A., Predoi-Croos, A., Rinsland, C.P., Rotger, M., Šimečková, M., Smith, M.A.H., Sung, K., Tashkun, S.A., Tennyson, J., Toth, R.A., Vandaele, A.C., Auwera, J.V., 1998, "The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database", **J. Quant. Spectrosc. Radiant. Transfer**, Vol. 110, pp. 533-572.

Salinas, C. T., 2008, "Fast Approximate Technique for The Cumulative Wavenumber Model to Modeling Radiative Transfer in a Mixture of Real Gas Media", **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 109, pp. 2078-2093.

Schuster, A., 1905, "Radiation Through a Foggy Atmosphere", **Astrophys. J.**, Vol. 21, pp. 1-22.

Schwarzschild, K., 1906, "Equilibrium of The Sun's Atmosphere", **Ges. Wiss. Gottingen Nachr., Math-Phys. Klasse**, Vol. 1, pp. 41-53.

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

Smith, T. F., Shen, Z. F., e Friedman, J. N., 1982, "Evaluation of Coefficients for the Weighted Sum of Gray Gases Model", **J. Heat Transfer**, Vol. 104, pp. 602-608.

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2000, "SLW Modeling of Radiative Transfer in Multicomponent Gas Mixture", **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 65, pp. 655-672.

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2002, "A Local-Spectrum Correlated Model for Radiative Transfer in Non-uniform Gas Media", **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 73, pp. 361-373.

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2005, "The Cumulative Wavenumber Method for Modeling Radiative Transfer in Gas Mixtures with Soot", **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 93, pp. 273-287.

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2008, “Multilayer Modeling of Radiative Transfer by SLW and CW Methods in Non-isothermal Gaseous Medium”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 109, pp. 245-257.

Solovjov, V. P., Webb, B. W., 2010, “Application of CW Local Correction Approach to SLW Modeling of Radiative Transfer in Non-Isothermal Gaseous Media”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 111, pp. 318-324.

Taylor, P. B., Foster, P. J., 1974, “The Total Emissivities of Luminous and Non-luminous Flames”, **J. Heat Mass Transfer**, Vol. 17, pp. 1591-1605.

Zhang, H., e Modest, M. F., 2002, “A Multi-Scale Full-Spectrum Correlated- $k$  Distribution for Radiative Heat Transfer in Inhomogeneous Gas Mixtures”, **J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer**, Vol. 73, n.2-5, pp. 349-360.

## APÊNCICE A – BALANÇO DE ENERGIA LOCAL PARA OS CASOS NÃO UNIFORMES

O balanço de energia local é calculado a partir dos resultados para os valores de fluxo de calor radiante. Assim, a partir da derivada do fluxo é obtido o divergente deste conforme Eq.(A.1)

$$Q(x) = \frac{|q_{out}| - |q_{in}|}{\Delta x} \approx -\frac{dq}{dx} \quad (\text{A.1})$$

Desta forma, quanto menor for o desvio no balanço de energia local, mais próximas as curvas para o divergente do fluxo de calor radiante serão. São apresentadas as verificações para os casos não uniformes, primeiramente para os homogêneos e não isotérmicos e, posteriormente, para os não homogêneos e não isotérmicos. Os perfis de temperatura e concentração são apresentados no Cap.5. As comparações são feitas com relação aos modelos CW original e modificado (CWM). A expressão “solução direta” encontrada nas figuras diz respeito aos resultados obtidos através da solução da RTE pelo algoritmo de forma direta.

### Meios homogêneos não isotérmicos

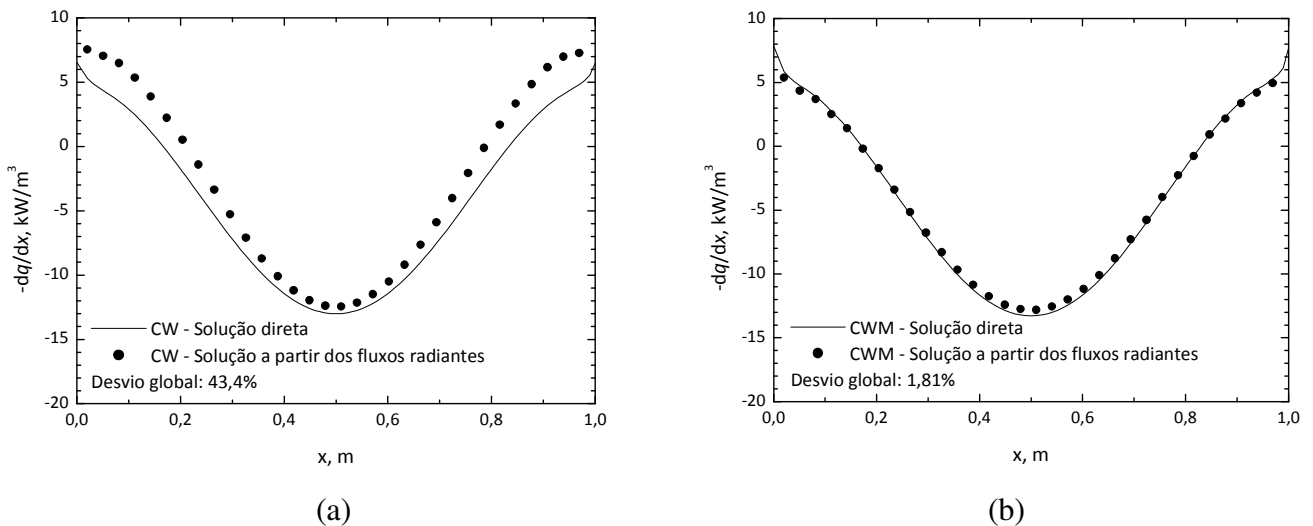
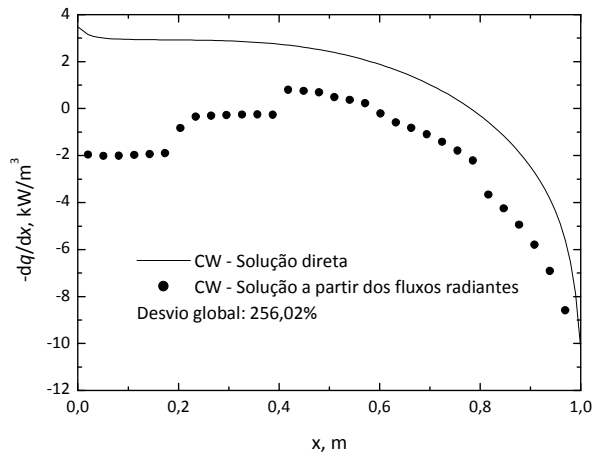
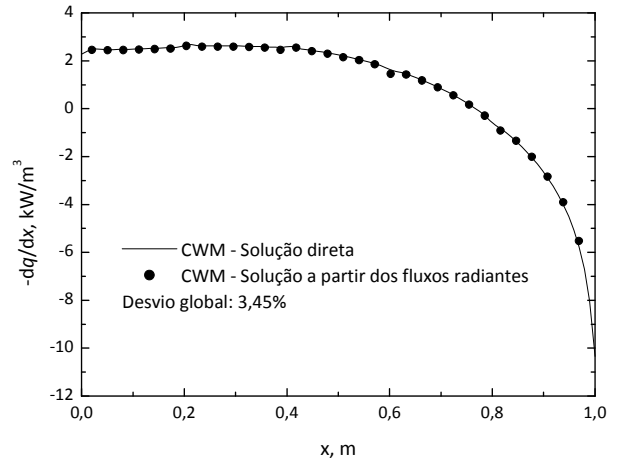


Figura A.1 – Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura parabólico. (a) CW original; (b) CWM.

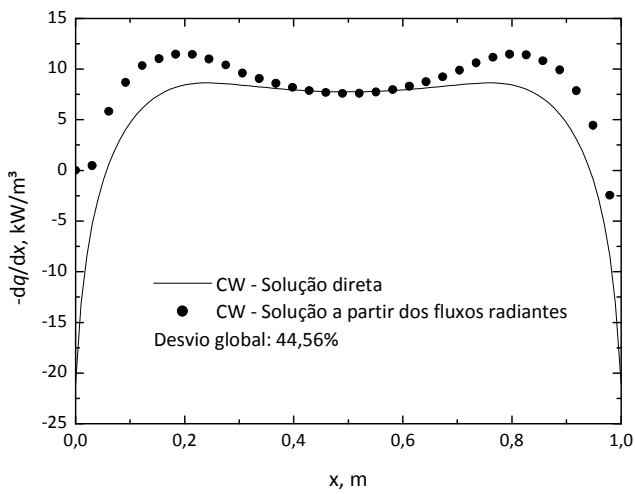


(a)

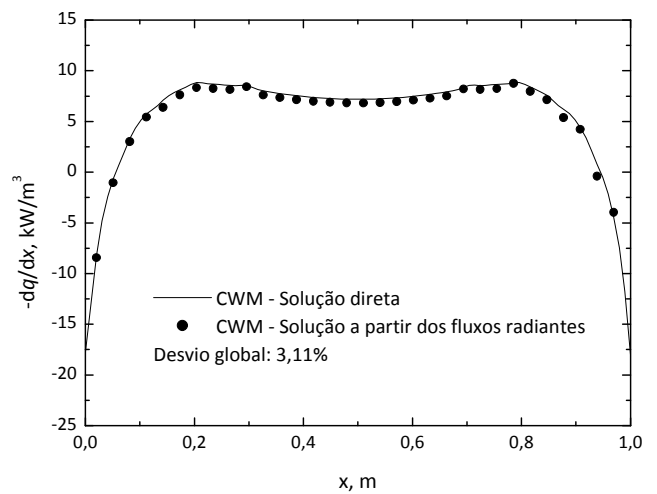


(b)

Figura A.2 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura linear. (a) CW original; (b) CWM.

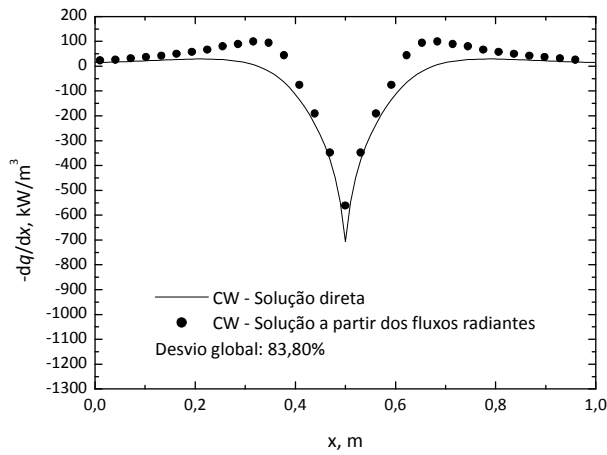


(a)

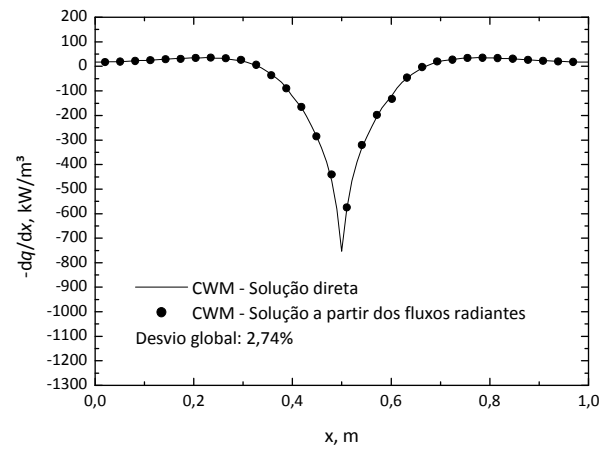


(b)

Figura A.3 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura senoidal. (a) CW original; (b) CWM.



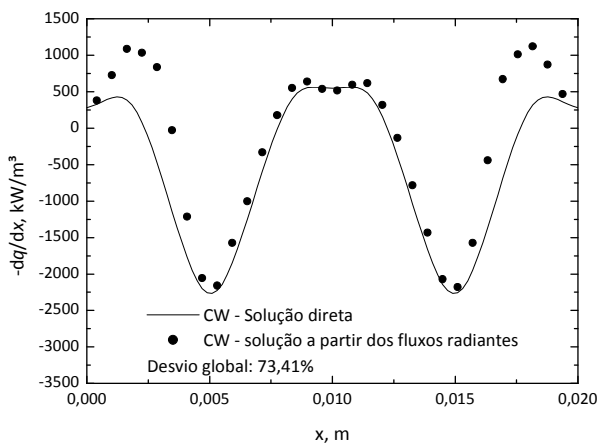
(a)



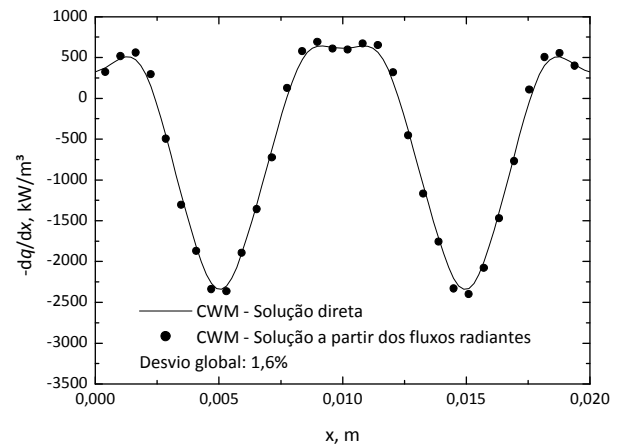
(b)

Figura A.4 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura exponencial.

(a) CW original; (b) CWM.



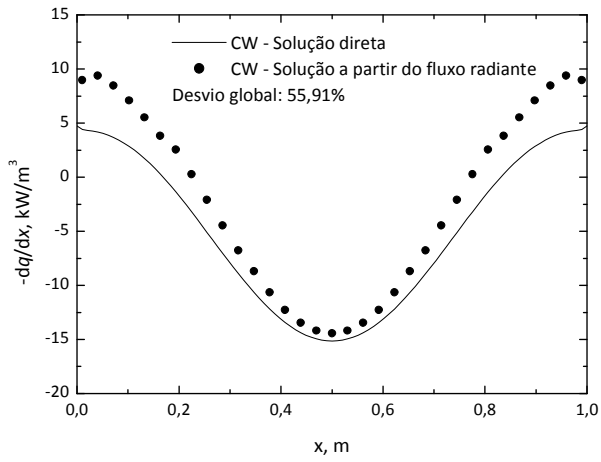
(a)



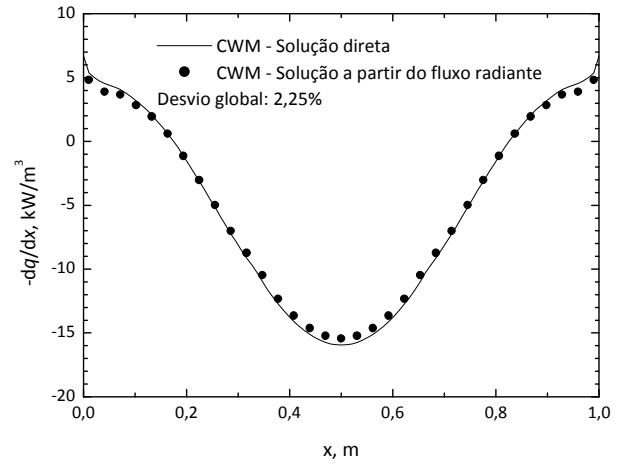
(b)

Figura A.5 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperaturas da câmara cilíndrica simulada por Barve e Ezekoye (2006). (a) CW original; (b) CWM.

## Meios não homogêneos e não isotérmicos

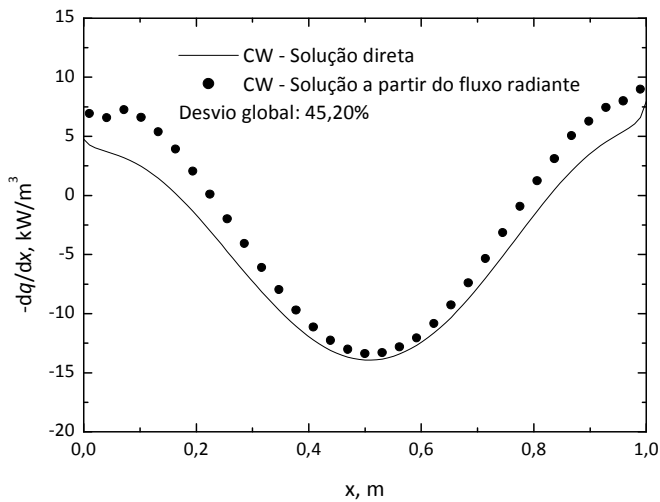


(a)

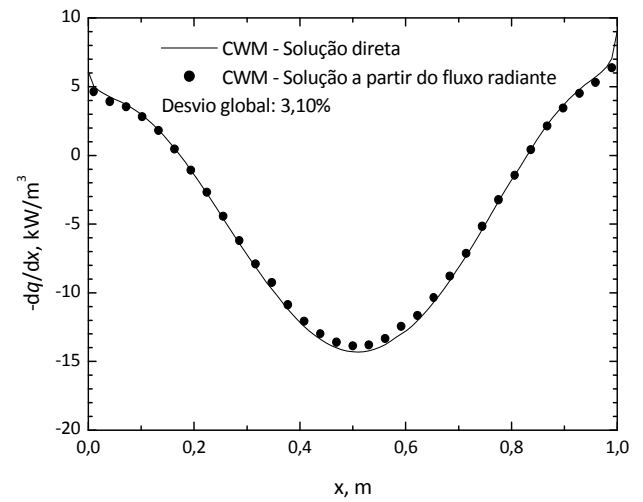


(b)

Figura A.6 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura parabólico e concentração parabólico. (a) CW original; (b) CWM.

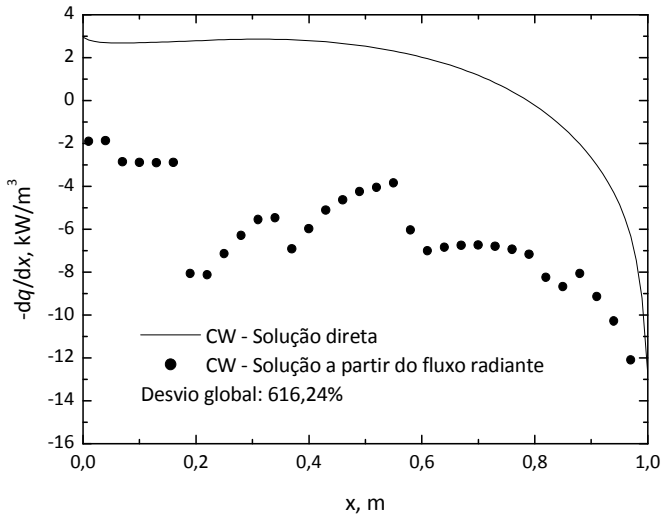


(a)

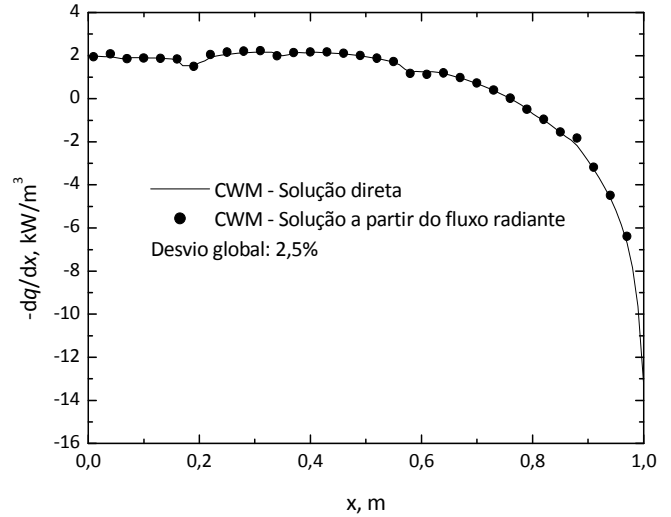


(b)

Figura A.7 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura parabólico e concentração linear. (a) CW original; (b) CWM.

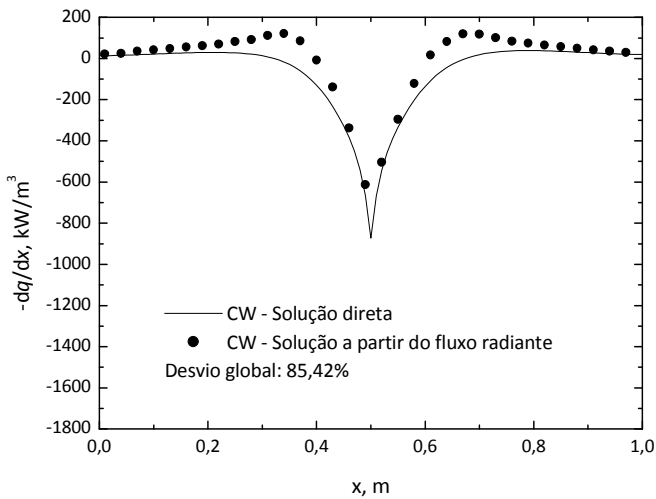


(a)

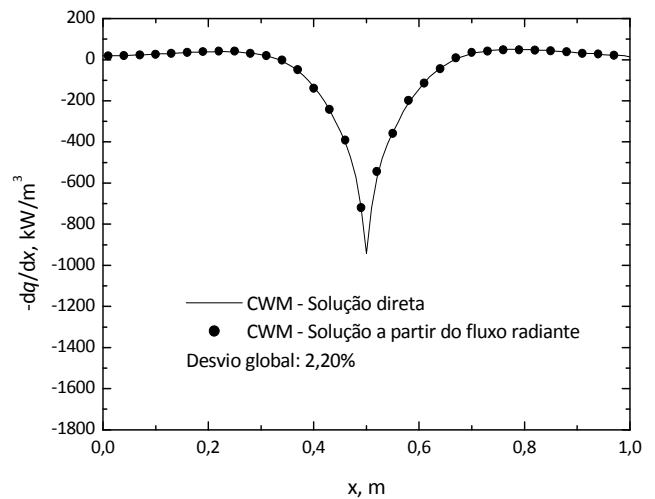


(b)

Figura A.8 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura linear e concentração linear. (a) CW original; (b) CWM.



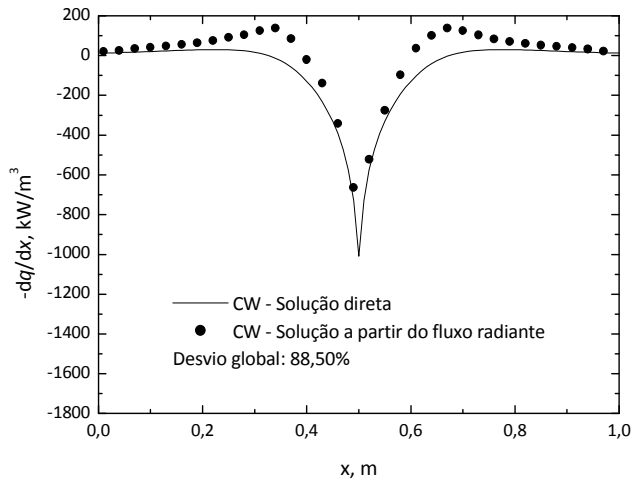
(a)



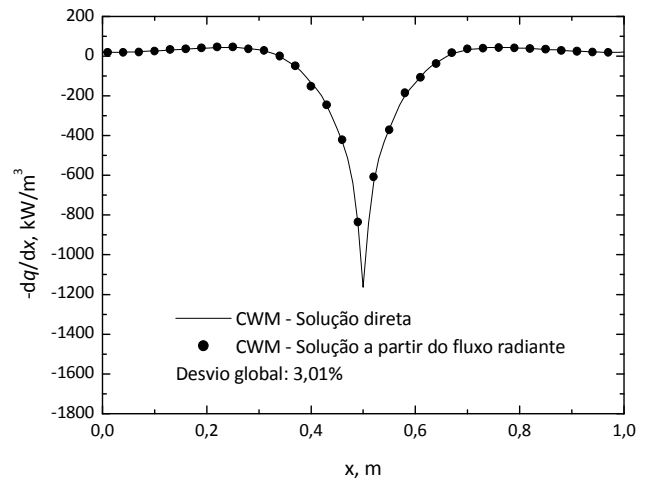
(b)

Figura A.9 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura exponencial e concentração linear. (a) CW original; (b) CWM.



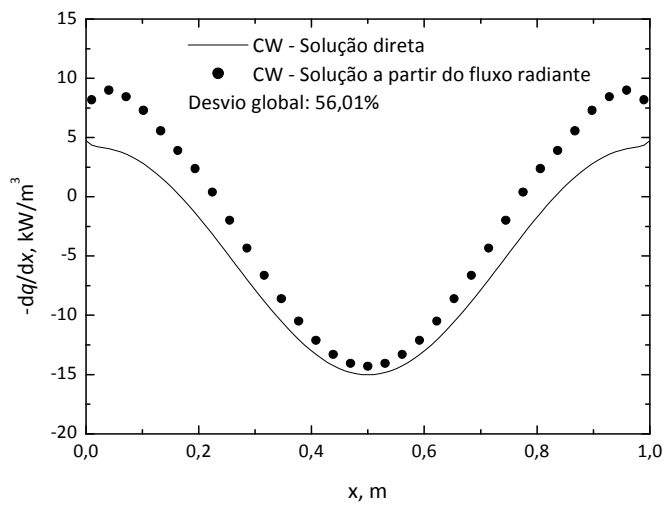


(a)

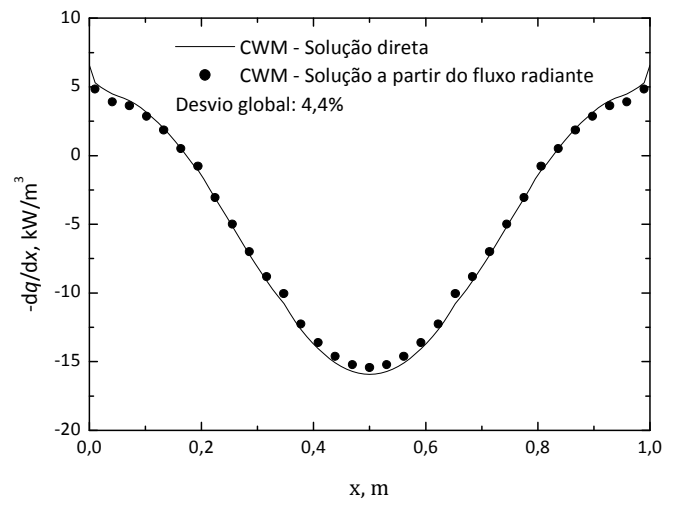


(b)

Figura A.10 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura exponencial e concentração exponencial. (a) CW original; (b) CWM.

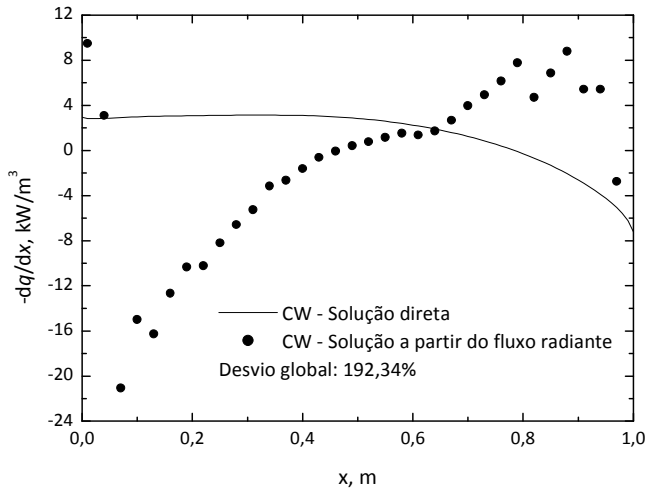


(a)

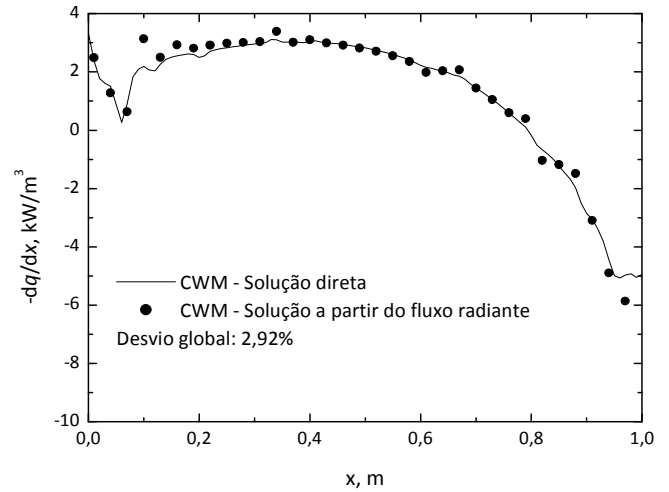


(b)

Figura A.11 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura parabólico e concentração senoidal. (a) CW original; (b) CWM.

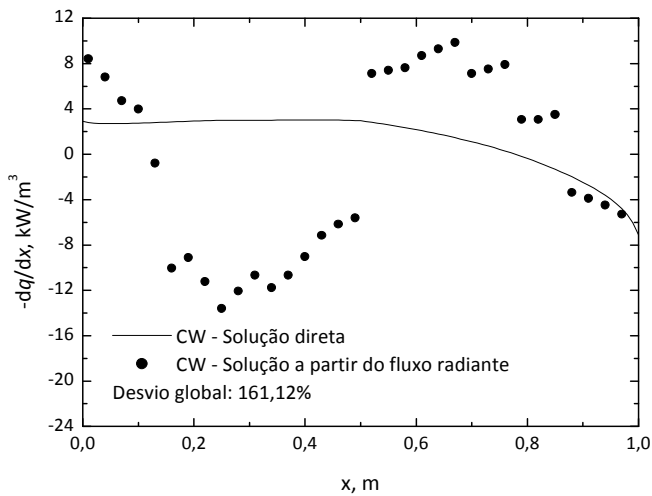


(a)

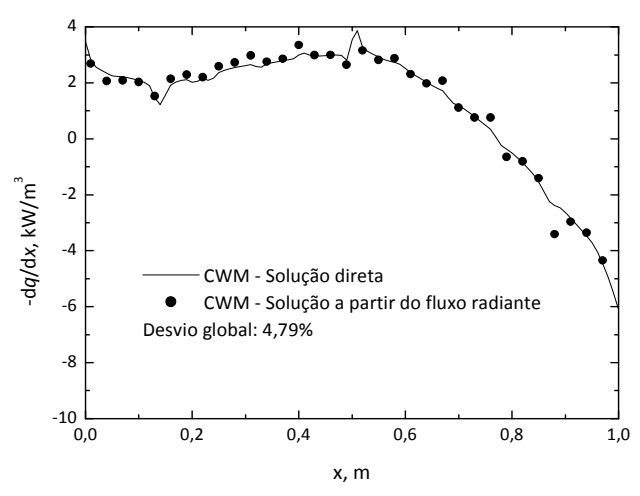


(b)

Figura A.12 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura linear e concentração senoidal. (a) CW original; (b) CWM.



(a)



(b)

Figura A.13 - Divergente do fluxo de calor radiante para perfil de temperatura linear e concentração exponencial. (a) CW original; (b) CWM.