Referências Bibliográficas

[Al-Oamri] AL-OMARI, S. B.. **Modelling soot processes in a methane-fueled turbulent diffusion flames operating under atmospheric pressure**. International Journal od Dynamic of Fluids, 3:31–44, 2007. 3.2.3

[Baclic] BACLIC, B. S.. **Least square correction for radiation mean beam length**. Int. Comm. Heat Mass Transfer, 14:353–355, 1987. 4.2.4, 4.3

[Baillie *et al.*] BAILLIE, S.; CAULFIELD, M.; COOK, D. K. ; DOCHERTY, P.. **A phenomenological model for predicting the thermal loading to a cylindrical vessel impacted by high pressure natural gas jet fires**. Transactions of the Institution of Chemical Engineers: Part B: Process Safety and Environmental Protection, 76:3–13, 1998. (document), 2.2, 2.17

[Barlow and Dreizler] BARLOW, R.; DREIZLER, A.. **Sandia /tud piloted ch4/air jet flames**. International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames, 2003. 2.2

[Baukal Jr. *et al.*] JR, C. E. B.; GERSTHTEIN, V. Y. ; LI, X.. **Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion**. CRC Press, 1 edition, 2001. 1.1

[Baukal] BAUKAL, C. E.. **Industrial Burners Handbook**. CRC Press, 1 edition, 2004. 1.1

[Bidi *et al.*] BIDI, M.; HOSSEINI, R. ; NOBARI, M. R. H.. **Numerical analysis of methane-air combustion considering radiation effect**. Energy Conversion and Management, 49:3634–3647, 2008. (document), 2.2, 2.21, 2.2, 2.22, 3.2.4, 3.2.5

[Borghi e Champion] BORGHI, R.; CHAMPION, M.. **Modélisation et Théorie des Flammes**. Editions TECHNIP, 1 edition, 2000. 6.3.1

[Boutoub *et al.*] BOUTOUB, A.; BENTICHA ; SASSI, M.. **Non-gray radiation analysis in participating media with the finite volume method**. Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences, 30:183–192, 2006. 3.2.5

[Bradley *et al.*] BRADLEY, D.; GASKELL, P. H. ; LAU, A. K. C.. **A mixedness-reactedness flamelet model for a turbulent diffusion flames**. 19th Symposium International on Combustion, 24:685–692, 1990. 2.2

[Bray e Peters] BRAY, K. N. C.; PETERS, N.. **Turbulent Reacting Flows – Laminar flamelets in turbulent flames**. Academic Press, 1 edition, 1994. 3.2.2

[Brookes e Moss] BROOKES, S. J.; MOSS, J. B.. **Predictions of soot and thermal radiation properties in confined jet diffusion flames**. Combustion and Flame, 116:486–503, 1999. (document), 2.2, 2.2, 3.2.3, 3.2.3, 3.2.3, 3.2.3, 5.1.2, 5.1.2, 5.9, 5.2.4, 6.2, 6.3.2

[Chandrasekhar] CHANDRASEKHAR, S.. **Radiative Transfer**. Dover, 1 edition, 1960. 3.2.4

[Chang e Charalampopoulos] CHANG, H.; CHARALAMPOPOULOS, T. T.. **Determination of the wavelength dependence of refractive indices of flame soot**. Proceedings of the Royal Society London, 430:577–591, 1990. (document), 3.7, 3.2.6, 4.2.4, 4.3, D.1

[Coelho] COELHO, P. J.. **Numerical simulation of the interaction between turbulence and radiation in reactive flows**. Progress in Energy and Combustion Science, 2007. 3.2.4

[Colson *et al.*] COLSON, G.; PEETERS, F. ; RUYCK, J. D.. **Experimental in-flame study of a 15 mw dual fuel gas/oil burner**. Fuel, 78:1253–1261, 1999. (document), 2.1, 2.1, 2.3, 2.4

[Cumber e Fairweather] CUMBER, P. S.; FAIRWEATHER, M.. **Evaluation of flame emission models combined with the discrete transfer method for combustion system simulation**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 48:5221–5239, 2005. (document), 2.16, 2.2

[Curran *et al.*] CURRAN, H. J.; JAWEERA, T. M.; PITZ, W. P. ; WESTBROOK, C. K.. **A detailed modeling study of propane oxidation**. Western States Section of the Combustion Institute: Spring Meeting, 2004. A.1

[Dalzell and Sarofim] DALZELL, W. H.; SAROFIM, A. F.. **Optical constants of soot and their applications to heat flux calculations**. Journal of Heat Transfer, 91:100–104, 1969. (document), 3.7, 3.2.6, 5.2.1

[Degroux *et al.*] DEGROUX, P.; MERCIER, X. ; THOMSON, K. A.. **Study of the formation of soot precursor and soot particles in flame using**

optical diagnostics. 34th International Symposium on Combustion, 34, 212. 5.2.1

[Demarco *et al.*] DEMARCO, R.; CONSALVI, J. L.; FUENTES, A. ; MELIS, S.. **Assesment of radiative property models in non-gray sooting media**. International Journal of Thermal Sciences, 50:1672–1684, 2011. 4.2.4, 7.1

[Duwel *et al.*] DUWEL, I.; GE, W.; KRONEMAYER, H.; DIBBLE, R.; GUTHEIL, E.; SCHULZ, C. ; WOLFRUM, J.. **Experimental an numerical characterization of a turbulent spray flame**. Proceedings of the Combustion Institute, p. 2247–2255, 2007. 6.3.1

[Edwards e Balakrishnan] EDWARDS, D. K.; BALAKRISHNAN, A.. **Thermal radiation by combustion gases**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 16:25–40, 1973. 2.2

[Endrud] ENDRUD, N. E.. **Soot, radiation and polutant emissions in oxigen-enriched turbulent jet flames**. Master Thesis, The Pensilvania State University, 2000. (document), 1.3, 1.4, 2.2, 2.18, 2.20, 5, 5.1, 5.1.1, 5.1, 5.1.2, 5.2, 5.1.3, 5.2.2, 5.2.2, 5.5, 5.14, 5.15, 5.18, 5.2.5, 5.7, 5.24, 5.2.5, 5.2.6, 5.2.6, 7, 7.1, A.2

[Fairweather *et al.*] FAIRWEATHER, M.; JONES, W. P. ; LINDSTEDT, R. P.. **Predictions of radiative heat transfer from a turbulent reacting jet in a cross-wind**. Combustion and Flame, 82:45–63, 1992. 2.2

[Fisher e Moss] FISHER, B. A.; MOSS, J. B.. **The influence of pressure soot production and radiation in turbulent kerosine spray flames**. Combustion Science and Technology, 138:43–61, 1998. (document), 2.1, 2.1, 2.2

[Fleck *et. al.*] FLECK, B. A.; MATOVIC, M. D.; GRANDMAISON, E. W. ; SOBIESIAK, S.. **Modelling of the near field of a multi-jet burner**. IFRF Combustion Journal, 200306:1–15, 2003. (document), 2.3, 2.27

[Fox] FOX, R. O.. **Computational Models for Turbulent Reacting Flows**. Cambirdge, 2 edition, 2003. 1.1

[Glassman e Yetter] GLASSMAN, I.; YETTER, R. A.. **Thermal Radiation Heat Transfer**. Elsevier Academic Press, 4 edition, 2008. 3.2.3, 6.3.1, 6.3.1

[Grosshandler] GROSSHANDLER, W. L.. **Radiative Heat Transfer in Nonhomogeneous Gases: A Simplified Approach**. PhD thesis, Department of Mechanical Engineering, University of California, Berkeley, 1976. 4.1

[Grosshandler] GROSSHANDLER, W. L.. **Radiative heat transfer in nonhomogeneous gases**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 23:1447–1459, 1980. 2.2

[Grosshandler e Nguyen] GROSSHANDLER, W. L.; NGUYEN, H.. **Application of the total transmittance nonhomogeneous radiation model of methane combustion**. Journal of Heat Transfer, 107:445 – 450, 1985. 4.1

[Grosshandler] GROSSHANDLER, W. L.. **Radcal: A narrow-band model for radiation calculations in a combustion environment**. Technical report, National Institute of Satandars and Technology, 1993. (document), 1.4, 2.2, 3.2.5, 4.1, 4.1, 4.1, 4.2, 4.2.4, 5.1.2, B.1.1, B.1, B.2, B.2, B.3

[Hall] HALL, R. J.. **Physical and Chemical Aspects of Combustion**. Gorfon and Breach, 1 edition, 1997. 2.2, 2.2, 3.2.3

[Haworth] HAWORTH, D. C.. **Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows**. Progress in Energy and Combustion Science, 36(2):168–259, 2010. 3.2.2

[Hottel e Sarofim] HOTTEL, H. C.; SAROFIM, A. F.. **Radiative Transfer**. Mc Graw Hill, 1 edition, 1967. 3.2.5, 4.2.4, 5.1.2

[Hughes *et al.*] HUGHES, K. J.; TURANYI, T.; CLAGUE, A. R. ; PILLING, M. J.. **Testing of acomprehensive chemical mechanismfor the oxidationof methane**. International Journal of Chemical Kinetics, 33(9):513–538, 2001. A.2

[Jamaluddin e Smith] JAMALUDDIN, S.; SMITH, P. J.. **Predicting radiative transfer in rectangular enclosures using the ordinate discrete transfer**. Combustion, Science and Technology, 59:321–340, 1988. (document), 3.2.4, 3.1

[Jeans] JEANS, J. H.. **The equations of radiative transfer of energy**. Montly Notices Royal Astronimical Society, 78:28–36, 1917. 3.2.4

[Kent e Bastin] KENT, J. H.; BASTIN, S. J.. **Parametric effects on sooting in turbulent acetilene diffusion flames**. Combustion and Flame, 56):29–42, 1984. 5.2.1

[Khan e Greeves] KHAN, I. M.; GREEVES, G.. **A method for calculating the formation and combustion of soot in diesel engines**. N. H. Afgan and J. M. Beer, editors, Heat Transfer in Flames, Chapter 25, 1974. 3.2.3, 3.2.3

[Köhler *et. al.*] KÖHLER, M.; GEIGLE, K. P.; MEIER, W.; AD K. A. THOMSON, B. M. C. ; SMALLWOOD, G. J.. **Sooting turbulent jet flame: Characterization and quantitative soot measurements**. Applied Physics B - Lasers and Optics, 104:409–425, 2011. (document), 2.1, 2.1, 2.5, 2.6

[Konnov] KONNOV, A.. **Remaining uncertainties in the kinetic mechanism of hydrogen combustion**. Combustion and Flame, 152(4):507–528, 2008. A.2

[Koylu and Faeth] KOYLU, U. O.; FAETH, G. M.. **Optical properties of overfire soot in buoyant turbulent diffusion flames at long residence times**. ASME Journal of Heat Transfer, 116:152–159, 1994. (document), 3.2

[Kuo] KUO, K. Y.. **Principles of Combustion**. John Wiley and Sons, 1 edition, 1986. 3.3.3

[Lallemant *et al.*] LALLEMANT, N.; SAYRET, A. ; WEBER, R.. **Evaluation of emissivity correlations for $h_2o - co_2 - n_2$/air mixtures and coupling with solution methods of the radiative transfer equation**. Progress on Enegry and Combustion Science, 22:543–574, 1996. 3.2.4, 4.1.1, 4.1.2

[Law] LAW, C. K.. **Combustion Physics**. Cambridge University Press, 1 edition, 2006. (document), 3.1, A.1

[Lee *et al.*] LEE, K. B.; THRING, M. W. ; BEER, J. M.. **Procurar**. Combustion and Flame, 6:137–145, 1962. 3.2.3

[Lee e Tien] LEE, S. C.; TIEN, C. L.. **Optical constants od soot in hydrocarbons flames**. Eighteenth Symposium (International) of Combustion, 18:1159–, 1980. (document), 3.7

[Li *et al.*] LI, J.. **An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion**. International Journal Chemical Kinetics, 36(10):566–575, 2004. A.2

[Liu *et al.*] LIU, F.; GULDER, O. L. ; SMALLWOOD, G. J.. **Non-grey gas radiative transfer analyses using the statistical narrow-band model**. International Journal of Heat Transfer, 41:2227 – 2236, 1998. 3.2.5

[Lockwood e Shah] LOCKWOOD, F. C.; SHAH, N. C.. **A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures**. Eighteenth Symposium (International) on Combustion, 18(1):1405–1414, 1981. 3.2.4

[Magnussen e Hjertager] MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H.. **On the mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis of soot formation and combustion**. 16 Symposium International on Combustion, 17:719–727, 1976. 2.2, 2.2, 3.2.3, 3.2.3

[Mahmud e Sangha] MAHMUD, T.; S. K. SANGHA. **Prediction of a turbulent non-premixed natural gas flame in a semi-industrial scale furnace using radiative flamelet combustion model**. Flow Turbulent Combustion, 84:1–23, 2010. (document), 2.2, 2.23, 2.24

[Masri *et al.*] MASRI, A. R.; DIBBLE, R. W. ; BARLOW, R. S.. **The structure of turbulent nonpremixed flames revealed by raman-rayleigh-lif measurements**. Progress on Energy and Combustion Sciences, 22:307–362, 1996. 5.2.2

[Michelfelder e Lowes] MICHELFELDER, S.; LOWES, T. W.. **M2-trials at ijmuiden ifrf**. International Flame Reserarch Foundation, Report No F36/a/4, 1974. (document), 2.2, 2.2, 2.24

[Modest] MODEST, M.. **Radiative Heat Transfer**. Academic Press, 2 edition, 2003. (document), 3.2.4, 3.2.4, 3.2.4, 3.2.4, 3.5, 3.2.6, 3.2.6, 4.1.1

[Moss *et al.*] MOSS, J. B.; PERERA, S. A. L.; STEWART, C. D. ; MAKIDA, M.. **Radiation heat transfer in gas turbine combustors**. Proceedings of 16th International Symposium on Airbreathing Engines, 17, 2003. 3.2.3

[Mossi] MOSSI, A.. **Modelagem da radiação térmica em chamas laminares da combustão de metano e ar**. Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011. (document), 1.4, 3.2.5, 4, 4.2, 4.2.1, 4.2.4, 4.2.4, 4.6, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 4.3, 5, 5.2.6, 5.25, 5.26, 5.27, 5.28, 5.29, C.1

[Nakamura *et al.*] NAKAMURA, M.; HWANG, S.; NAKAO, Y.; NISHIOKA, D.; HAYASHI, J. ; AKAMATSU, F.. **Measuremente of spray characteristics of coaxial jet spray flames under high pressure**. 3rd IASME/WSEAS Int. Conf. on Energy and Environment, 1:51–54, 2008. (document), 2.1, 2.1, 2.4, 6, 6.3, 6.3.3, 6.3.3, 6.3.3, 6.17, 6.18

[Nakamura *et al.*] NAKAMURA, M.; NISHIOKA, D.; HAYASHI, J. ; AKAMATSU, F.. **Soot formation, spray characteristics, and structure of jet spray flames**. Combustion and Flame, 158:1615–1623, 2011. (document), 1.3, 1.4, 2.1, 2.7, 2.8, 2.1, 2.9, 2.1, 2.4, 6, 6.1, 6.1, 6.2, 6.2, 6.2, 6.3, 6.3.1, 6.3.1, 6.3, 6.3.1, 6.4, 6.5, 6.6, 6.3.1, 6.7, 6.3.1, 6.8, 6.3.2, 6.11, 6.3.2, 6.3.2, 6.3.2, 6.12, 6.13, 6.3.3, 6.3.3, 6.14, 6.16, 7, 7.1, A.2, E

[Nieckele *et. al.*] NIECKELE, A. O.; NACCACHE, M. F. ; GOMES, M. S. P.. **Combustion performance of an aluminium melting furnace operating with natural gas and liquid fuel**. Applied Thermal Engineering, 31:841–851, 2011. (document), 2.2, 2.25

[Nooren *et al.*] NOOREN, P. A.; WOUTERS, H. A.; PEETERS, T. W. J.; ROEKAERTS, D.; MAAS, U. ; SCHMIDT, D.. **Monte carlo pdf modeling of a turbulent natural-gas diffusion flame**. Combustion Theory and Modeling, 1:79–96, 1997. 3.3.1

[O Conaire *et al.*] OCONAIRE, M.; CURRAN, H. J.; SIMMIE, J. M.; PITZ, W. J. ; WESTBROOK, C. K.. **A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation**. International Journal Chemical Kinetics, 35(11):603–622, 2004. A.2

[Olfe] OLFE, D. B.. **Beam mean calculation for radiation from non-transparent gases**. J. Quant. Spectorsc. Radiat. Tranfer, 1:169–176, 1961. 4.2.4, 4.3

[Ozisick] OSIZIK, M. N.. **Radiative Transfer and Interactions with Combustion and Convection**. Wiley Interscience Publication, 1 edition, 1973. 3.2.5

[Patch] PATCH, R. W.. **Effective absorption coefficient for radiant energy transport in non-gray non scattering gases**. Journal of Quantum Spectroscopy Radiative Transfer, 7:611–637, 1967. 4.1.1

[Patel *et al.*] PATEL, A.; REITZ, S. K. R.. **Development and validation of a reduced reaction mechanism for hcci engine simulations**. SAE Technical Paper, 2004-01-0558, 2004. 6, E

[Peters] PETERS, N.. **Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion**. Progress in Energy and Combustion Science, 10:319–339, 1984. 3.2.2, 3.2.2

[Peters] PETERS, N.. **Turbulen Combustion**. Cambridge University Press, 1 edition, 2000. 3.2.2

[Poinsot e Veynante] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.. **Theoretical and Numerical Combustion**. Edwards, 2 edition, 2005. 3.2.2, 3.2.2

[Poirier *et. al.*] POIRIER, D.; GRANDMAISON, E. W.; MATOVIC, M. D.; BARNES, K. R. ; NELSON, B. D.. **High temperature oxidation of steel in an oxygen-enriched low nox furnace environment**. IFRF Combustion Journal, 200602:1–27, 2006. (document), 2.26

[Ranz e Marshal] RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R.. **Evaporation from drops, part. i**. Chemical Engineering Progress, 48:141 – 146, 1952. 3.3.3

[Sabel'nikov *et al.*] SABEL'NIKOV, V. A.; DESHAIES, B. ; DA SILVA, L. F. F.. **Revisited flamelet model for nonpremixed combustion in supersonic turbulent flows**. Combustion and Flame, 114:577–584, 1998. 3.2.2

[Sacomano] SACOMANO, F.. **Simulações de chamas turbulentas de etanol com modelo de turbulência k-ε**. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2011. 3.3.4

[Sarkar e Balakrishnan] SARKAR, S.; BALAKRISHNAN, L.. **Application to a reynolds-stress turbulence model for the compressible shear layer**. Technical report, NASA CR 182002, 1990. 3.2.1

[Sarlej *et al.*] SARLEJ, M.; PETR, P. ; STEHLIK, P.. **Low-nox burner design evaluation by cfd**. 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering - ESCAPE17, p. 1–6, 2007. (document), 2.2, 2.13, 2.14

[Sazhin] SAZHIN, S. S.. **An approximation for the absorption coeficient of soot in a radiating gas**. Manuscript - Fluent Europe, 1994. 2.2, 3.2.6, 3.2.6, 3.2.6, 4, 4.2, 4.2.4, 4.3, 5, 5.1.2, 5.2.1, 5.2.3, 5.2.4, 5.2.4, 5.2.6, 6.2

[Sazhin] SAZHIN, S. S.. **Advanced models od fuel droplet heating and evaporation**. Progress in Energy and Combustion Science, 32:162–214, 2006. (document), E, E, E, E.2

[Shafieee e Topal] SHAFIEEE, S.; TOPAL, E.. **When will fossil fuel reserves be diminished?** Energy Policy, 37:181–189, 2009. 1.1

[Shih *et al.*] SHIH, T. H.; LIOU, W. W.; SHABBIR, A.; YANG, Z. ; ZHU, J.. **A new $k - \varepsilon$ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows**. Computer Fluids, 24(3):227–238, 1995. 3.2.1

[Siegel e Howel] SIEGEL, R.; HOWELL, J. R.. **Thermal Radiation Heat Transfer**. Hemisphere Publishing Corporation, 3 edition, 1992. 3.2.4, 3.2.4

[Siegel] SIEGEL, R.; HOWELL, J. R.. **Thermal Radiation Heat Transfer**. Editorial Reverté S.A., 4 edition, 2002. (document), 3.2.6, 3.6

[Smith *et al.*] SMITH, T. F.; SHEN, Z. F. ; FRIEDMAN, J. N.. **Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model**. Journal of Heat Transfer, p. 102–608, 1982. (document), 3.2.5, 3.2, 3.2.5, 3.2.6, 4, 4.2, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 4.2.4, 5, 5.2.1, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.5, 5.2.6, 5.25, 5.26, 5.27, 5.28, 5.29, 6.2

[Smith *et al.*] SMITH, G. P.; GOLDEN, D. M.; FRENKLACH, M.; MORIARTY, N. W.; EITENEER, B.; GOLDENBERG, M.; BOWMAN, C. T.; HANSON, R. K.; SONG, S.; GARDINER, W. C. ; LISSIANKI, V. V. Z.. **Gri-mech 3.0**. Technical report, Gas Research Institute, 1999. 2.2, 5.1.2, A.2

[Smith e Webster] SMITH, J. D.; WEBSTER, T.. **Using cdf to solve challenges of ultra low nox burner in retrofit in refinery process heaters**. Petroleum Technology Quaterly, 2002. 1.1

[Smyth *et al.*] SMYTH, K. C.; MILLER, J. H.; DORFMAN, R. C.; MALLARD, W. G. ; SANTORO, R. J.. **Soot inception in a methane/air diffusion flame as characterized by detailed species profiles**. Combustion and Flame, 62:157–181, 1985. 3.2.3

[Smyth e Shaddix] SMYTH, K. C.; SHADDIX, C. R.. **The elusive history of m = 1.57 - 0.56i for the refractive index of soot**. Combustion and Flame, p. 314–320, 1996. 5.2.1

[Soufiani e Taine] SOUFIANI, A.; TAINE, J.. **High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for h_2o, co_2 and co, and k-correlated model for h_2o and co_2**. International Journal of Heat Mass Transfer, 40(4):987–991, 1997. 3.2.5

[Spangelo] SPANGELO, O.. **Experimental and Theoretical Studies of a Low NOx Swirl Burner**. PhD thesis, Norwegian University of Science and Technology, 2004. (document), 1.1, 2.2, 2.10, 2.11, 2.2, 2.12

[Syed *et al.*] SYED, J. K.; STEWRT, C. D. ; MOSS, J. B.. **Modelling soot formation and thermal radiation in buoyant turbulent diffusion flames**. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, 23:1523–1541, 1990. 3.2.3

[Talbot *et al.*] TALBOT, L.. **Thermophoresis of particles in a heated boundary layer**. Journal of Fluid Mechanics, 101:737–758, 1980. 3.3.1, 3.3.1

[Tesner *et al.*] TESNER, P. A.; SNERIGOVA, T. D. ; KNORRE, V. G.. **Kinetics of dispersed carbon formation**. Combustion and Flame, 17:253–260, 1971. 3.2.3, 3.2.3

[Tien e Wang] TIEN, C. L.; WANG, L. S.. **On the calculation of beam mean for a radiating gas**. J. Quant. Spectorsc. Radiat. Tranfer, 5:543–546, 1964. 4.2.4

[Truelove] FOR FLAME RADIATION, A. M. G. G. M.. **J. s. truelove**. Technical report, AERE-R8494, UKAEA, Harwell, 1973. 2.2

[Turns] TURNS, S.. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**. McGraw Hill, 1 edition, 2000. 3.2.3

[Venkata] VENKATA, V.. **Advanced Flamelet Modelling of Turbulent Nonpremixed and Partially Premixed Combustion**. PhD thesis, Loughborough University, 2008. 3.2.2

[Versteeg e Malalasekera] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W.. **An Introduction to Computatioanl Fluid Dynamics - The Finite Volume Method**. Pearson Prentice Hall, 2 edition, 2007. 1.1, 1.2, A.1

[Viskanta] VISKANTA, R.. **Concerning the definitions of th mean absorption coefficient**. International Journal of Heat and Mass Transfer, 7:1047–1049, 1964. 3.2.4

[Wang *et al.*] WANG, L.; ENDRUD, N. E.; TURNS, S. R.; D'AGOSTINI, M. D. ; SLAVEJKOV, A. G.. **A study of the influence of oxygen index on soot, radiation, and emission characteristics of turbulen jet flames**. Combustion Science and Technology, 174(8):45–72, 2002. (document), 1.4, 2.2, 2.20, 2.4, 5, 5.1.2, 5.2.4, 5.3, 5.4, 5.6, 5.2.5, 7.1

[Wang] WANG, L.. **Detailed Chemistry, Soot, and Radiation Calculations in Turbulent Reacting Flows**. PhD thesis, PhD Thesis, The

Pensilvania State University, 2004. 1.1, 1.4, 2.2, 2.2, 2.4, 5, 5.1.2, 5.2.2, 5.2.2, 7.1

[Wang *et al.*] WANG, L.; HARWORTH, D. C.; TURNS, S. R. ; MODEST, M. F.. **Interactions among soot, thermal radiation, and nox emissions in oxigen-enriches turbulent nonpremixed flames: A computational fluids dynamics modeling study**. Combustion and Flame, 141:170–179, 2005. (document), 1.4, 2.2, 2.2, 2.2, 2.19, 2.20, 2.4, 5, 5.1, 5, 5.1, 5.1.2, 5.2.1, 5.2.1, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.2, 5.6, 5.7, 5.2.2, 5.2.4, 5.24, 5.2.5, 5.2.5, 5.2.6, 5.2.6, 5.30, 5.2.7, 5.2.7, 7.1

[Warnatz *et. al.*] WARNATZ, J.; MAAS, U. ; DIBBLE, R. W.. **Combustion, Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation**. Springer-Verlag, 2 edition, 1999. 2.2

[Weihong e Wlodzimierz] WEIHONG, Y.; WLODZIMIERZ, B.. **Cfd as applied to high temperature air combustion in industrial furnaces**. IFRF Combustion Journal, 1:1–21, 2006. (document), 2.3, 2.28, 2.29

[Wen *et al.*] WEN, Z.; YUN, S.; THOMSON, M. J. ; LIGHTSTONE, M. F.. **Modeling soot formation in turbulent kerosene / air jet difussion flames**. Combustion and Flame, 135:323–340, 2003. (document), 2.2, 2.15, 3.2.3, 3.2.3, 5.1.2

[Williamham *et al.*] WILLIAMHAM, C. B.; TAYLOR, W. J.; PIGNOCCO, J. M. ; ROSSINI, F. D.. **Vapor pressures and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons**. J. Res. Natl. Bur. Stand. (U.S.), 35:219–244, 1945. (document), E, E.1, E, E.2

[Wu e Fricker] WU, H. L.; FRICKER, N.. **The characteristics of swirl-stabilized natural gas flames, part 2: The behaviour of swirling jet flames in a narrow cylindrical furnace**. Journal of the Institute of Fuel, 49:144–151, 1976. (document), 2.16, 2.2

[Yeoh e Yuen] YEOH, G. H.; YUEN, K. K.. **Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering - Theory, Modelling and Practice**. Academic Press, 1 edition, 2009. 3.2.1, 3.2.4, 3.2.5

[Young *et al.*] YOUNG, K. J.; STEWARD, C. D. ; MOSS, J. B.. **Soot formation in turbulen nonpremixed kerosine-air flames burning at**

elevated pressure. Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion, 49:609–617, 1994. 2.1, 2.2

[van de Hulst] VAN DE HULST, H. C.. **Light Scattering by Small Particles**. Dover Publications, 1 edition, 1981. 3.2.6

A
Cinética Química das Reações de Combustão

A.1
Estado da Arte

A combustão de hidrocarbonetos com o ar envolve um número considerável de etapas (iniciação, propagação, transferência de cadeia e terminação) com a presença de espécies intermediários (também chamados de radicais) antes da formação final de produtos (Law, 2006). A cinética química - ou mecanismo - das reações de combustão determina o tempo que um sistema leva para atingir o estado final de equilíbrio (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Idealmente, um mecanismo de cinética química deve ser capaz de descrever a oxidação do combustível em uma ampla faixa de condições de operação (temperatura, pressão, riqueza, etc.) e para uma ampla gama de sistemas simples, tais como reatores de fluxo contínuo, tubos de choque, chamas de difusão, chamas pré-misturadas, etc. (Curran *et al.*, 2004).

As taxas de consumo dos reagentes e formação dos produtos de combustão aparecem no termo fonte da equação de transporte das espécies químicas que participam em uma reação de combustão. Considera-se apenas a k-ésima reação elementar reversível descrita por

$$\sum_{i=1}^{N} \nu_{ik}^{'} \mathcal{M}_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{N} \nu_{ik}^{''} \mathcal{M}_i, \quad k = 1, 2, ..., K, \tag{A-1}$$

onde $\nu_{ik}^{'}$ e $\nu_{ik}^{''}$ são os coeficientes estequiométricos das espécies químicas, $\mathcal{M}_i$. A taxa de progresso da k-ésima reação elementar pode ser escrita como o produto dos coeficientes de todas as N espécies químicas participantes na k-ésima reação elementar,

$$\dot{q}_k = k_k^f \prod_{i=1}^{N} [\mathcal{M}_i]^{\nu_{ik}^{'}} - k_k^b \prod_{i=1}^{N} [\mathcal{M}_i]^{\nu_{ik}^{''}}, \tag{A-2}$$

onde k_k^f e k_k^b representam respectivamente os coeficientes direito e reverso da velocidade da k-ésima reação e $[\mathcal{M}_i]$ é a concentração da espécie $\mathcal{M}_i$,

$$[\mathcal{M}_i] \equiv [X_i] = \frac{\rho_i Y_i}{MW}, \tag{A-3}$$

onde $\overline{MW}$ é o peso molecular da mistura. O coeficiente da velocidade direito da k-ésima reação é expresso pela lei de Arrhenius,

$$k_k^f = A_k T_k^m \exp\left(-\frac{E_{Ak}}{RT}\right), \tag{A-4}$$

onde R é a constante universal dos gases ($8,3143$ kJ/mol-K), A_k, m_k e E_{Ak} são, para cada reação elementar, o fator pré-exponencial de Arrhenius, o expoente da temperatura e a energia de ativação. O coeficiente reverso da k-ésima reação é obtido a partir da constante de equilíbrio, Kc_k, definida como,

$$Kc_k = \frac{k_k^f}{k_k^b} = \prod_{i=1}^{N} [\mathcal{M}_i]^{(\nu_{ik}^{''} - \nu_{ik}^{'})}. \tag{A-5}$$

A conversão da i-ésima espécie química na k-ésima reação elementar, $\dot{q}_{ik} = d[\mathcal{M}_{ik}]/dt$, é definida como,

$$\dot{q}_{ik} = \frac{d[\mathcal{M}_{ik}]}{dt} = \left(\nu_{ik}^{''} - \nu_{ik}^{'}\right)\dot{q}_k = \left(\nu_{ik}^{''} - \nu_{ik}^{'}\right)\left[k_k^f \prod_{i=1}^{N} [\mathcal{M}_i]^{\nu_{ik}^{'}} - k_k^b \prod_{i=1}^{N} [\mathcal{M}_i]^{\nu_{ik}^{''}}\right], \tag{A-6}$$

logo, a taxa de produção química da i-ésima espécie, $\dot{\omega}_i$, é escrita como,

$$\dot{\omega}_i = \overline{MW}_i \sum_{k=1}^{K} \dot{q}_{ik}, \tag{A-7}$$

onde W_i é o peso molecular da i-ésima espécie química.

A.2
Mecanismos de Cinética Química Detalhada

Atualmente, existem mecanismos detalhados de cinética química razoavelmente confiáveis que estão disponíveis para combustíveis simples tais como o hidrogênio [Li *et al.*, (2004); O Conaire *et al.*, (2004); Konnov (2008), etc.] e metano [GRI-Mech 3.0 (Smith *et al.*, 1999); Leeds 1.5, (Hughes *et al.*,2001); San Diego 20111122, etc.], cuja faixa de validade é bem estabelecida. Trabalhos recentes permitem, descrever os processos da combustão com ar de hidrocarbonetos envolvendo até quatro átomos de carbono tais propano, butano, metanol e etanol. No entanto, a faixa de validade é tão mais restrita quanto maior a complexidade da estrutura química-molecular do combustível.

São objetos de desenvolvimentos recentes mecanismos detalhados de cinética para a modelagem da combustão de hidrocarbonetos representativos a combustíveis líquidos, como gasolina, querosene e Diesel. Estes mecanismos

envolvem um número considerável de espécies químicas e reações elementares, o que difculta a tarefa de empregá-los em uma simulação numérica.

O aparecimento de computadores com grande capacidade de processamento e armazenamento de dados, e a derivação de algoritmos numéricos acurados para a resolução de equações cinéticas simultâneas contribuiram decisivamente para o desenvolvimento de mecanismos, os quais requerem de valores de propriedades termoquímicas fundamentais para poderem ser utilizados, tais como, a energia de ativação, coeficiente de frequência de colisão, etc.

Espera-se que em um futuro próximo, os mecanismos de cinética química da oxidação dos principais hidrocarbonetos de interesse industrial, permitam predizer, com uma boa exatidão, os diferentes fenômenos aerotermoquímicos relacionados à combustão.

A seguir, listam-se dois mecanismos de cinética química detalhada que foram empregados nas simulações de combustão turbulenta nos queimadores de Endrud (2000) e Nakamura *et al.* (2011)

A.2.1
Mecanismo GRI-Mech 3.0

O Mecanismo GRI-Mech 3.0, que possui 325 reações químicas elementais e 53 espécies químicas, foi utilizado para gerar a biblioteca de elementos de chama que é utilizada para a simulação da combustão turbulenta do propano com o oxigênio enriquecido com ar.

```
! GRI-Mech Version 3.0 7/30/99  CHEMKIN-II format
! See README30 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;
! WorldWideWeb home page http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ or
! through http://www.gri.org , under 'Basic  Research',
! for additional information, contacts, and disclaimer
ELEMENTS
O  H  C  N  AR
END
SPECIES
H2          H           O           O2          OH          H2O         HO2         H2O2
C           CH          CH2         CH2(S)      CH3         CH4         CO          CO2
HCO         CH2O        CH2OH       CH3O        CH3OH       C2H         C2H2        C2H3
C2H4        C2H5        C2H6        HCCO        CH2CO       HCCOH       N           NH
NH2         NH3         NNH         NO          NO2         N2O         HNO         CN
HCN         H2CN        HCNN        HCNO        HOCN        HNCO        NCO         N2
AR          C3H7        C3H8        CH2CHO      CH3CHO
END
!THERMO
! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file
!END
REACTIONS
2O+M<=>O2+M                                     1.200E+17   -1.000        .00
H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/  .83/
O+H+M<=>OH+M                                    5.000E+17   -1.000        .00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+H2<=>H+OH                                     3.870E+04    2.700     6260.00
O+HO2<=>OH+O2                                   2.000E+13     .000        .00
O+H2O2<=>OH+HO2                                 9.630E+06    2.000     4000.00
O+CH<=>H+CO                                     5.700E+13     .000        .00
O+CH2<=>H+HCO                                   8.000E+13     .000        .00
O+CH2(S)<=>H2+CO                                1.500E+13     .000        .00
O+CH2(S)<=>H+HCO                                1.500E+13     .000        .00
O+CH3<=>H+CH2O                                  5.060E+13     .000        .00
O+CH4<=>OH+CH3                                  1.020E+09    1.500     8600.00
```

```
O+CO(+M)<=>CO2(+M)                          1.800E+10     .000     2385.00
   LOW/ 6.020E+14     .000     3000.00/
H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/ AR/ .50/
O+HCO<=>OH+CO                               3.000E+13     .000        .00
O+HCO<=>H+CO2                               3.000E+13     .000        .00
O+CH2O<=>OH+HCO                             3.900E+13     .000     3540.00
O+CH2OH<=>OH+CH2O                           1.000E+13     .000        .00
O+CH3O<=>OH+CH2O                            1.000E+13     .000        .00
O+CH3OH<=>OH+CH2OH                          3.880E+05    2.500     3100.00
O+CH3OH<=>OH+CH3O                           1.300E+05    2.500     5000.00
O+C2H<=>CH+CO                               5.000E+13     .000        .00
O+C2H2<=>H+HCCO                             1.350E+07    2.000     1900.00
O+C2H2<=>OH+C2H                             4.600E+19   -1.410    28950.00
O+C2H2<=>CO+CH2                             6.940E+06    2.000     1900.00
O+C2H3<=>H+CH2CO                            3.000E+13     .000        .00
O+C2H4<=>CH3+HCO                            1.250E+07    1.830      220.00
O+C2H5<=>CH3+CH2O                           2.240E+13     .000        .00
O+C2H6<=>OH+C2H5                            8.980E+07    1.920     5690.00
O+HCCO<=>H+2CO                              1.000E+14     .000        .00
O+CH2CO<=>OH+HCCO                           1.000E+13     .000     8000.00
O+CH2CO<=>CH2+CO2                           1.750E+12     .000     1350.00
O2+CO<=>O+CO2                               2.500E+12     .000    47800.00
O2+CH2O<=>HO2+HCO                           1.000E+14     .000    40000.00
H+O2+M<=>HO2+M                              2.800E+18    -.860        .00
O2/ .00/ H2O/ .00/ CO/ .75/ CO2/1.50/ C2H6/1.50/ N2/ .00/ AR/ .00/
H+2O2<=>HO2+O2                              2.080E+19   -1.240        .00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O                          11.26E+18    -.760        .00
H+O2+N2<=>HO2+N2                            2.600E+19   -1.240        .00
H+O2+AR<=>HO2+AR                            7.000E+17    -.800        .00
H+O2<=>O+OH                                 2.650E+16    -.6707   17041.00
2H+M<=>H2+M                                 1.000E+18   -1.000        .00
H2/ .00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO2/ .00/ C2H6/3.00/ AR/ .63/
2H+H2<=>2H2                                 9.000E+16    -.600        .00
2H+H2O<=>H2+H2O                             6.000E+19   -1.250        .00
2H+CO2<=>H2+CO2                             5.500E+20   -2.000        .00
H+OH+M<=>H2O+M                              2.200E+22   -2.000        .00
H2/ .73/ H2O/3.65/ CH4/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .38/
H+HO2<=>O+H2O                               3.970E+12     .000      671.00
H+HO2<=>O2+H2                               4.480E+13     .000     1068.00
H+HO2<=>2OH                                 0.840E+14     .000      635.00
H+H2O2<=>HO2+H2                             1.210E+07    2.000     5200.00
H+H2O2<=>OH+H2O                             1.000E+13     .000     3600.00
H+CH<=>C+H2                                 1.650E+14     .000        .00
H+CH2(+M)<=>CH3(+M)                         6.000E+14     .000        .00
      LOW  /  1.040E+26   -2.760    1600.00/
      TROE/    .5620   91.00   5836.00   8552.00/
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+CH2(S)<=>CH+H2                            3.000E+13     .000        .00
H+CH3(+M)<=>CH4(+M)                         13.90E+15     -.534      536.00
      LOW  /  2.620E+33   -4.760    2440.00/
      TROE/    .7830    74.00   2941.00   6964.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/3.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+CH4<=>CH3+H2                              6.600E+08    1.620    10840.00
H+HCO(+M)<=>CH2O(+M)                        1.090E+12     .480     -260.00
      LOW  /  2.470E+24   -2.570     425.00/
      TROE/    .7824   271.00   2755.00   6570.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+HCO<=>H2+CO                               7.340E+13     .000        .00
H+CH2O(+M)<=>CH2OH(+M)                      5.400E+11     .454     3600.00
      LOW  /  1.270E+32   -4.820    6530.00/
      TROE/    .7187   103.00   1291.00   4160.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)                       5.400E+11     .454     2600.00
      LOW  /  2.200E+30   -4.800    5560.00/
      TROE/    .7580    94.00   1555.00   4200.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH2O<=>HCO+H2                             5.740E+07    1.900     2742.00
H+CH2OH(+M)<=>CH3OH(+M)                     1.055E+12     .500       86.00
      LOW  /  4.360E+31   -4.650    5080.00/
      TROE/    .600   100.00   90000.0   10000.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH2OH<=>H2+CH2O                           2.000E+13     .000        .00
H+CH2OH<=>OH+CH3                            1.650E+11     .650     -284.00
H+CH2OH<=>CH2(S)+H2O                        3.280E+13     -.090      610.00
H+CH3O(+M)<=>CH3OH(+M)                      2.430E+12     .515       50.00
      LOW  /  4.660E+41   -7.440    14080.0/
      TROE/    .700   100.00   90000.0 10000.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH3O<=>H+CH2OH                            4.150E+07    1.630     1924.00
H+CH3O<=>H2+CH2O                            2.000E+13     .000        .00
H+CH3O<=>OH+CH3                             1.500E+12     .500     -110.00
```

```
H+CH3O<=>CH2(S)+H2O                          2.620E+14    -.230    1070.00
H+CH3OH<=>CH2OH+H2                           1.700E+07    2.100    4870.00
H+CH3OH<=>CH3O+H2                            4.200E+06    2.100    4870.00
H+C2H(+M)<=>C2H2(+M)                         1.000E+17   -1.000       .00
      LOW   /  3.750E+33   -4.800   1900.00/
      TROE/    .6464   132.00  1315.00  5566.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H2(+M)<=>C2H3(+M)                        5.600E+12    .000    2400.00
      LOW   /  3.800E+40   -7.270   7220.00/
      TROE/    .7507    98.50  1302.00  4167.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H3(+M)<=>C2H4(+M)                        6.080E+12    .270     280.00
      LOW   /  1.400E+30   -3.860   3320.00/
      TROE/    .7820   207.50  2663.00  6095.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H3<=>H2+C2H2                             3.000E+13    .000       .00
H+C2H4(+M)<=>C2H5(+M)                        0.540E+12    .454    1820.00
      LOW   /  0.600E+42   -7.620   6970.00/
      TROE/    .9753   210.00   984.00  4374.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H4<=>C2H3+H2                             1.325E+06    2.530   12240.00
H+C2H5(+M)<=>C2H6(+M)                        5.210E+17    -.990    1580.00
      LOW   /  1.990E+41   -7.080   6685.00/
      TROE/    .8422   125.00  2219.00  6882.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H5<=>H2+C2H4                             2.000E+12    .000       .00
H+C2H6<=>C2H5+H2                             1.150E+08    1.900    7530.00
H+HCCO<=>CH2(S)+CO                           1.000E+14    .000       .00
H+CH2CO<=>HCCO+H2                            5.000E+13    .000    8000.00
H+CH2CO<=>CH3+CO                             1.130E+13    .000    3428.00
H+HCCOH<=>H+CH2CO                            1.000E+13    .000       .00
H2+CO(+M)<=>CH2O(+M)                         4.300E+07    1.500   79600.00
      LOW   /  5.070E+27   -3.420  84350.00/
      TROE/    .9320   197.00  1540.00 10300.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
OH+H2<=>H+H2O                                2.160E+08    1.510    3430.00
2OH(+M)<=>H2O2(+M)                           7.400E+13    -.370       .00
      LOW   /  2.300E+18    -.900  -1700.00/
      TROE/    .7346    94.00  1756.00  5182.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
2OH<=>O+H2O                                  3.570E+04    2.400   -2110.00
OH+HO2<=>O2+H2O                              1.450E+13    .000    -500.00
  DUPLICATE
OH+H2O2<=>HO2+H2O                            2.000E+12    .000     427.00
  DUPLICATE
OH+H2O2<=>HO2+H2O                            1.700E+18    .000   29410.00
  DUPLICATE
OH+C<=>H+CO                                  5.000E+13    .000       .00
OH+CH<=>H+HCO                                3.000E+13    .000       .00
OH+CH2<=>H+CH2O                              2.000E+13    .000       .00
OH+CH2<=>CH+H2O                              1.130E+07    2.000    3000.00
OH+CH2(S)<=>H+CH2O                           3.000E+13    .000       .00
OH+CH3(+M)<=>CH3OH(+M)                       2.790E+18   -1.430    1330.00
      LOW   /  4.000E+36   -5.920   3140.00/
      TROE/    .4120   195.0   5900.00  6394.00/
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
OH+CH3<=>CH2+H2O                             5.600E+07    1.600    5420.00
OH+CH3<=>CH2(S)+H2O                          6.440E+17   -1.340    1417.00
OH+CH4<=>CH3+H2O                             1.000E+08    1.600    3120.00
OH+CO<=>H+CO2                                4.760E+07    1.228      70.00
OH+HCO<=>H2O+CO                              5.000E+13    .000       .00
OH+CH2O<=>HCO+H2O                            3.430E+09    1.180    -447.00
OH+CH2OH<=>H2O+CH2O                          5.000E+12    .000       .00
OH+CH3O<=>H2O+CH2O                           5.000E+12    .000       .00
OH+CH3OH<=>CH2OH+H2O                         1.440E+06    2.000    -840.00
OH+CH3OH<=>CH3O+H2O                          6.300E+06    2.000    1500.00
OH+C2H<=>H+HCCO                              2.000E+13    .000       .00
OH+C2H2<=>H+CH2CO                            2.180E-04    4.500   -1000.00
OH+C2H2<=>H+HCCOH                            5.040E+05    2.300   13500.00
OH+C2H2<=>C2H+H2O                            3.370E+07    2.000   14000.00
OH+C2H2<=>CH3+CO                             4.830E-04    4.000   -2000.00
OH+C2H3<=>H2O+C2H2                           5.000E+12    .000       .00
OH+C2H4<=>C2H3+H2O                           3.600E+06    2.000    2500.00
OH+C2H6<=>C2H5+H2O                           3.540E+06    2.120     870.00
OH+CH2CO<=>HCCO+H2O                          7.500E+12    .000    2000.00
2HO2<=>O2+H2O2                               1.300E+11    .000   -1630.00
  DUPLICATE
2HO2<=>O2+H2O2                               4.200E+14    .000   12000.00
  DUPLICATE
HO2+CH2<=>OH+CH2O                            2.000E+13    .000       .00
HO2+CH3<=>O2+CH4                             1.000E+12    .000       .00
```

```
HO2+CH3<=>OH+CH3O                                 3.780E+13     .000        .00
HO2+CO<=>OH+CO2                                   1.500E+14     .000   23600.00
HO2+CH2O<=>HCO+H2O2                               5.600E+06    2.000   12000.00
C+O2<=>O+CO                                       5.800E+13     .000     576.00
C+CH2<=>H+C2H                                     5.000E+13     .000        .00
C+CH3<=>H+C2H2                                    5.000E+13     .000        .00
CH+O2<=>O+HCO                                     6.710E+13     .000        .00
CH+H2<=>H+CH2                                     1.080E+14     .000    3110.00
CH+H2O<=>H+CH2O                                   5.710E+12     .000    -755.00
CH+CH2<=>H+C2H2                                   4.000E+13     .000        .00
CH+CH3<=>H+C2H3                                   3.000E+13     .000        .00
CH+CH4<=>H+C2H4                                   6.000E+13     .000        .00
CH+CO(+M)<=>HCCO(+M)                              5.000E+13     .000        .00
      LOW   /   2.690E+28    -3.740    1936.00/
      TROE/    .5757   237.00   1652.00   5069.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
CH+CO2<=>HCO+CO                                   1.900E+14     .000   15792.00
CH+CH2O<=>H+CH2CO                                 9.460E+13     .000    -515.00
CH+HCCO<=>CO+C2H2                                 5.000E+13     .000        .00
CH2+O2=>OH+H+CO                                   5.000E+12     .000    1500.00
CH2+H2<=>H+CH3                                    5.000E+05    2.000    7230.00
2CH2<=>H2+C2H2                                    1.600E+15     .000   11944.00
CH2+CH3<=>H+C2H4                                  4.000E+13     .000        .00
CH2+CH4<=>2CH3                                    2.460E+06    2.000    8270.00
CH2+CO(+M)<=>CH2CO(+M)                            8.100E+11     .500    4510.00
      LOW   /   2.690E+33    -5.110    7095.00/
      TROE/    .5907   275.00   1226.00   5185.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
CH2+HCCO<=>C2H3+CO                                3.000E+13     .000        .00
CH2(S)+N2<=>CH2+N2                                1.500E+13     .000     600.00
CH2(S)+AR<=>CH2+AR                                9.000E+12     .000     600.00
CH2(S)+O2<=>H+OH+CO                               2.800E+13     .000        .00
CH2(S)+O2<=>CO+H2O                                1.200E+13     .000        .00
CH2(S)+H2<=>CH3+H                                 7.000E+13     .000        .00
CH2(S)+H2O(+M)<=>CH3OH(+M)                        4.820E+17   -1.160    1145.00
      LOW   /   1.880E+38    -6.360    5040.00/
      TROE/    .6027   208.00   3922.00   10180.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
CH2(S)+H2O<=>CH2+H2O                              3.000E+13     .000        .00
CH2(S)+CH3<=>H+C2H4                               1.200E+13     .000    -570.00
CH2(S)+CH4<=>2CH3                                 1.600E+13     .000    -570.00
CH2(S)+CO<=>CH2+CO                                9.000E+12     .000        .00
CH2(S)+CO2<=>CH2+CO2                              7.000E+12     .000        .00
CH2(S)+CO2<=>CO+CH2O                              1.400E+13     .000        .00
CH2(S)+C2H6<=>CH3+C2H5                            4.000E+13     .000    -550.00
CH3+O2<=>O+CH3O                                   3.560E+13     .000   30480.00
CH3+O2<=>OH+CH2O                                  2.310E+12     .000   20315.00
CH3+H2O2<=>HO2+CH4                                2.450E+04    2.470    5180.00
2CH3(+M)<=>C2H6(+M)                               6.770E+16   -1.180     654.00
      LOW   /   3.400E+41    -7.030    2762.00/
      TROE/    .6190   73.20   1180.00   9999.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
2CH3<=>H+C2H5                                     6.840E+12     .100   10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO                                  2.648E+13     .000        .00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4                                3.320E+03    2.810    5860.00
CH3+CH3OH<=>CH2OH+CH4                             3.000E+07    1.500    9940.00
CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4                              1.000E+07    1.500    9940.00
CH3+C2H4<=>C2H3+CH4                               2.270E+05    2.000    9200.00
CH3+C2H6<=>C2H5+CH4                               6.140E+06    1.740   10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O                                1.500E+18   -1.000   17000.00
HCO+M<=>H+CO+M                                    1.870E+17   -1.000   17000.00
H2/2.00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
HCO+O2<=>HO2+CO                                   13.45E+12     .000     400.00
CH2OH+O2<=>HO2+CH2O                               1.800E+13     .000     900.00
CH3O+O2<=>HO2+CH2O                                4.280E-13    7.600   -3530.00
C2H+O2<=>HCO+CO                                   1.000E+13     .000    -755.00
C2H+H2<=>H+C2H2                                   5.680E+10    0.900    1993.00
C2H3+O2<=>HCO+CH2O                                4.580E+16   -1.390    1015.00
C2H4(+M)<=>H2+C2H2(+M)                            8.000E+12     .440   86770.00
      LOW   /   1.580E+51    -9.300   97800.00/
      TROE/    .7345   180.00   1035.00   5417.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
C2H5+O2<=>HO2+C2H4                                8.400E+11     .000    3875.00
HCCO+O2<=>OH+2CO                                  3.200E+12     .000     854.00
2HCCO<=>2CO+C2H2                                  1.000E+13     .000        .00
N+NO<=>N2+O                                       2.700E+13     .000     355.00
N+O2<=>NO+O                                       9.000E+09    1.000    6500.00
N+OH<=>NO+H                                       3.360E+13     .000     385.00
N2O+O<=>N2+O2                                     1.400E+12     .000   10810.00
N2O+O<=>2NO                                       2.900E+13     .000   23150.00
N2O+H<=>N2+OH                                     3.870E+14     .000   18880.00
```

```
N2O+OH<=>N2+HO2                          2.000E+12     .000    21060.00
N2O(+M)<=>N2+O(+M)                       7.910E+10     .000    56020.00
     LOW   /   6.370E+14      .000   56640.00/
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .625/
HO2+NO<=>NO2+OH                          2.110E+12     .000     -480.00
NO+O+M<=>NO2+M                           1.060E+20   -1.410        .00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
NO2+O<=>NO+O2                            3.900E+12     .000     -240.00
NO2+H<=>NO+OH                            1.320E+14     .000      360.00
NH+O<=>NO+H                              4.000E+13     .000        .00
NH+H<=>N+H2                              3.200E+13     .000      330.00
NH+OH<=>HNO+H                            2.000E+13     .000        .00
NH+OH<=>N+H2O                            2.000E+09    1.200        .00
NH+O2<=>HNO+O                            4.610E+05    2.000     6500.00
NH+O2<=>NO+OH                            1.280E+06    1.500      100.00
NH+N<=>N2+H                              1.500E+13     .000        .00
NH+H2O<=>HNO+H2                          2.000E+13     .000    13850.00
NH+NO<=>N2+OH                            2.160E+13    -.230        .00
NH+NO<=>N2O+H                            3.650E+14    -.450        .00
NH2+O<=>OH+NH                            3.000E+12     .000        .00
NH2+O<=>H+HNO                            3.900E+13     .000        .00
NH2+H<=>NH+H2                            4.000E+13     .000     3650.00
NH2+OH<=>NH+H2O                          9.000E+07    1.500     -460.00
NNH<=>N2+H                               3.300E+08     .000        .00
NNH+M<=>N2+H+M                           1.300E+14    -.110     4980.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
NNH+O2<=>HO2+N2                          5.000E+12     .000        .00
NNH+O<=>OH+N2                            2.500E+13     .000        .00
NNH+O<=>NH+NO                            7.000E+13     .000        .00
NNH+H<=>H2+N2                            5.000E+13     .000        .00
NNH+OH<=>H2O+N2                          2.000E+13     .000        .00
NNH+CH3<=>CH4+N2                         2.500E+13     .000        .00
H+NO+M<=>HNO+M                           4.480E+19   -1.320      740.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
HNO+O<=>NO+OH                            2.500E+13     .000        .00
HNO+H<=>H2+NO                            9.000E+11     .720      660.00
HNO+OH<=>NO+H2O                          1.300E+07    1.900     -950.00
HNO+O2<=>HO2+NO                          1.000E+13     .000    13000.00
CN+O<=>CO+N                              7.700E+13     .000        .00
CN+OH<=>NCO+H                            4.000E+13     .000        .00
CN+H2O<=>HCN+OH                          8.000E+12     .000     7460.00
CN+O2<=>NCO+O                            6.140E+12     .000     -440.00
CN+H2<=>HCN+H                            2.950E+05    2.450     2240.00
NCO+O<=>NO+CO                            2.350E+13     .000        .00
NCO+H<=>NH+CO                            5.400E+13     .000        .00
NCO+OH<=>NO+H+CO                         0.250E+13     .000        .00
NCO+N<=>N2+CO                            2.000E+13     .000        .00
NCO+O2<=>NO+CO2                          2.000E+12     .000    20000.00
NCO+M<=>N+CO+M                           3.100E+14     .000    54050.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
NCO+NO<=>N2O+CO                          1.900E+17   -1.520      740.00
NCO+NO<=>N2+CO2                          3.800E+18   -2.000      800.00
HCN+M<=>H+CN+M                           1.040E+29   -3.300   126600.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
HCN+O<=>NCO+H                            2.030E+04    2.640     4980.00
HCN+O<=>NH+CO                            5.070E+03    2.640     4980.00
HCN+O<=>CN+OH                            3.910E+09    1.580    26600.00
HCN+OH<=>HOCN+H                          1.100E+06    2.030    13370.00
HCN+OH<=>HNCO+H                          4.400E+03    2.260     6400.00
HCN+OH<=>NH2+CO                          1.600E+02    2.560     9000.00
H+HCN(+M)<=>H2CN(+M)                     3.300E+13     .000        .00
      LOW /   1.400E+26   -3.400     1900.00/
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H2CN+N<=>N2+CH2                          6.000E+13     .000      400.00
C+N2<=>CN+N                              6.300E+13     .000    46020.00
CH+N2<=>HCN+N                            3.120E+09    0.880    20130.00
CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)                     3.100E+12     .150        .00
      LOW /   1.300E+25   -3.160     740.00/
      TROE/    .6670   235.00   2117.00   4536.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ 1.0/
CH2+N2<=>HCN+NH                          1.000E+13     .000    74000.00
CH2(S)+N2<=>NH+HCN                       1.000E+11     .000    65000.00
C+NO<=>CN+O                              1.900E+13     .000        .00
C+NO<=>CO+N                              2.900E+13     .000        .00
CH+NO<=>HCN+O                            4.100E+13     .000        .00
CH+NO<=>H+NCO                            1.620E+13     .000        .00
CH+NO<=>N+HCO                            2.460E+13     .000        .00
CH2+NO<=>H+HNCO                          3.100E+17   -1.380     1270.00
CH2+NO<=>OH+HCN                          2.900E+14    -.690      760.00
CH2+NO<=>H+HCNO                          3.800E+13    -.360      580.00
CH2(S)+NO<=>H+HNCO                       3.100E+17   -1.380     1270.00
```

```
CH2(S)+NO<=>OH+HCN                          2.900E+14    -.690     760.00
CH2(S)+NO<=>H+HCNO                          3.800E+13    -.360     580.00
CH3+NO<=>HCN+H2O                            9.600E+13     .000   28800.00
CH3+NO<=>H2CN+OH                            1.000E+12     .000   21750.00
HCNN+O<=>CO+H+N2                            2.200E+13     .000       .00
HCNN+O<=>HCN+NO                             2.000E+12     .000       .00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2                          1.200E+13     .000       .00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2                          1.200E+13     .000       .00
HCNN+H<=>CH2+N2                             1.000E+14     .000       .00
HNCO+O<=>NH+CO2                             9.800E+07    1.410    8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO                             1.500E+08    1.570   44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH                             2.200E+06    2.110   11400.00
HNCO+H<=>NH2+CO                             2.250E+07    1.700    3800.00
HNCO+H<=>H2+NCO                             1.050E+05    2.500   13300.00
HNCO+OH<=>NCO+H2O                           3.300E+07    1.500    3600.00
HNCO+OH<=>NH2+CO2                           3.300E+06    1.500    3600.00
HNCO+M<=>NH+CO+M                            1.180E+16     .000   84720.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
HCNO+H<=>H+HNCO                             2.100E+15    -.690    2850.00
HCNO+H<=>OH+HCN                             2.700E+11     .180    2120.00
HCNO+H<=>NH2+CO                             1.700E+14    -.750    2890.00
HOCN+H<=>H+HNCO                             2.000E+07    2.000    2000.00
HCCO+NO<=>HCNO+CO                           0.900E+13     .000       .00
CH3+N<=>H2CN+H                              6.100E+14    -.310     290.00
CH3+N<=>HCN+H2                              3.700E+12     .150     -90.00
NH3+H<=>NH2+H2                              5.400E+05    2.400    9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O                            5.000E+07    1.600     955.00
NH3+O<=>NH2+OH                              9.400E+06    1.940    6460.00
NH+CO2<=>HNO+CO                             1.000E+13     .000   14350.00
CN+NO2<=>NCO+NO                             6.160E+15   -0.752     345.00
NCO+NO2<=>N2O+CO2                           3.250E+12     .000    -705.00
N+CO2<=>NO+CO                               3.000E+12     .000   11300.00
O+CH3=>H+H2+CO                              3.370E+13     .000       .00
O+C2H4<=>H+CH2CHO                           6.700E+06    1.830     220.00
O+C2H5<=>H+CH3CHO                           1.096E+14     .000       .00
OH+HO2<=>O2+H2O                             0.500E+16     .000   17330.00
  DUPLICATE
OH+CH3=>H2+CH2O                             8.000E+09     .500   -1755.00
CH+H2(+M)<=>CH3(+M)                         1.970E+12     .430    -370.00
   LOW/ 4.820E+25  -2.80  590.0 /
   TROE/ .578  122.0  2535.0  9365.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
CH2+O2=>2H+CO2                              5.800E+12     .000    1500.00
CH2+O2<=>O+CH2O                             2.400E+12     .000    1500.00
CH2+CH2=>2H+C2H2                            2.000E+14     .000   10989.00
CH2(S)+H2O=>H2+CH2O                         6.820E+10     .250    -935.00
C2H3+O2<=>O+CH2CHO                          3.030E+11     .290      11.00
C2H3+O2<=>HO2+C2H2                          1.337E+06    1.610    -384.00
O+CH3CHO<=>OH+CH2CHO                        2.920E+12     .000    1808.00
O+CH3CHO=>OH+CH3+CO                         2.920E+12     .000    1808.00
O2+CH3CHO=>HO2+CH3+CO                       3.010E+13     .000   39150.00
H+CH3CHO<=>CH2CHO+H2                        2.050E+09    1.160    2405.00
H+CH3CHO=>CH3+H2+CO                         2.050E+09    1.160    2405.00
OH+CH3CHO=>CH3+H2O+CO                       2.343E+10    0.730   -1113.00
HO2+CH3CHO=>CH3+H2O2+CO                     3.010E+12     .000   11923.00
CH3+CH3CHO=>CH3+CH4+CO                      2.720E+06    1.770    5920.00
H+CH2CO(+M)<=>CH2CHO(+M)                    4.865E+11    0.422   -1755.00
    LOW/ 1.012E+42  -7.63  3854.0/
    TROE/ 0.465  201.0  1773.0  5333.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+CH2CHO=>H+CH2+CO2                         1.500E+14     .000       .00
O2+CH2CHO=>OH+CO+CH2O                       1.810E+10     .000       .00
O2+CH2CHO=>OH+2HCO                          2.350E+10     .000       .00
H+CH2CHO<=>CH3+HCO                          2.200E+13     .000       .00
H+CH2CHO<=>CH2CO+H2                         1.100E+13     .000       .00
OH+CH2CHO<=>H2O+CH2CO                       1.200E+13     .000       .00
OH+CH2CHO<=>HCO+CH2OH                       3.010E+13     .000       .00
CH3+C2H5(+M)<=>C3H8(+M)                     .9430E+13     .000       .00
     LOW/ 2.710E+74  -16.82  13065.0 /
     TROE/ .1527  291.0  2742.0  7748.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+C3H8<=>OH+C3H7                            1.930E+05    2.680    3716.00
H+C3H8<=>C3H7+H2                            1.320E+06    2.540    6756.00
OH+C3H8<=>C3H7+H2O                          3.160E+07    1.800     934.00
C3H7+H2O2<=>HO2+C3H8                        3.780E+02    2.720    1500.00
CH3+C3H8<=>C3H7+CH4                         0.903E+00    3.650    7154.00
CH3+C2H4(+M)<=>C3H7(+M)                     2.550E+06    1.600    5700.00
      LOW/ 3.00E+63  -14.6  18170./
      TROE/ .1894  277.0  8748.0  7891.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+C3H7<=>C2H5+CH2O                          9.640E+13     .000       .00
```

```
H+C3H7(+M)<=>C3H8(+M)                          3.613E+13     .000        .00
      LOW/ 4.420E+61   -13.545   11357.0/
      TROE/ .315   369.0   3285.0   6667.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C3H7<=>CH3+C2H5                              4.060E+06     2.190     890.00
OH+C3H7<=>C2H5+CH2OH                           2.410E+13     .000        .00
HO2+C3H7<=>O2+C3H8                             2.550E+10     0.255    -943.00
HO2+C3H7=>OH+C2H5+CH2O                         2.410E+13     .000        .00
CH3+C3H7<=>2C2H5                               1.927E+13    -0.320       .00
END
```

A.2.2
Mecanismo Wisconsin

O mecanismo de Wisconsisn foi o único capaz de gerar a biblioteca de elementos de chama que necessita o Fluent^{TM} para a simulação da combustão turbulenta do n-heptano (surrogate do querosene) com o oxigênio. Isto foi possível, devido ao baixo número de reações e espécies químicas deste mecanismo "esqueleto".

```
elements
 h   c    o   n
end

species
nc7h16    o2    n2    co2    h2o  co   h2 oh  h2o2  ho2     h      o
ch3o    ch2o   hco  ch2  ch3   ch4 c2h3 c2h4  c2h5 c3h4 c3h5 c3h6 c3h7
c7h15-2   c7h15o2    c7ket12  c5h11co
end

reactions
 nc7h16 + h            = c7h15-2 + h2          4.380e+07  2.0    4760.0
 nc7h16 + oh           = c7h15-2 + h2o         9.700e+09  1.3    1690.0
 nc7h16 + ho2          = c7h15-2 + h2o2        1.650e+13  0.0   16950.0
 nc7h16 + o2           = c7h15-2 + ho2         2.000e+15  0.0   47380.0
 c7h15-2 + o2          = c7h15o2               1.560e+12  0.0       0.0
 c7h15o2 + o2          = c7ket12 + oh          4.500E+14  0.0 18232.712
 c7ket12               = c5h11co + ch2o + oh   9.530e+14  0.0  4.110e+4
 c5h11co               = c2h4  + c3h7 + co     9.84E+15 0.0 4.02E+04
 c7h15-2               = c2h5 + c2h4  + c3h6   7.045E+14  0.0   3.46E+04
 c3h7                  = c2h4 + ch3            9.600e+13  0.0   30950.0
 c3h7                  = c3h6 + h              1.250e+14  0.0   36900.0
 c3h6 + ch3            = c3h5 + ch4            9.000e+12  0.0    8480.0
 c3h5 + o2             = c3h4 + ho2            6.000e+11  0.0   10000.0
 c3h4 + oh             = c2h3 + ch2o           1.000e+12  0.0       0.0
 c3h4 + oh             = c2h4 + hco            1.000e+12  0.0       0.0
 ch3   + ho2           = ch3o  + oh            5.000e+13  0.00      0.
 ch3   + oh            = ch2   + h2o           7.500e+06  2.00   5000.
 ch2   + oh            = ch2o  + h             2.500e+13  0.00      0.
 ch2   + o2            = hco   + oh            4.300e+10  0.00   -500.
 ch2   + o2            = co2   + h2            6.900e+11  0.00    500.
 ch2   + o2            = co    + h2o           2.000e+10  0.00  -1000.
 ch2   + o2            = ch2o  + o             5.000e+13  0.00   9000.
 ch2   + o2            = co2   + h     + h     1.600e+12  0.00   1000.
 ch2   + o2            = co    + oh    + h     8.600e+10  0.00   -500.
 ch3o  + co            = ch3   + co2           1.570e+14  0.00  11800.
 co    + oh            = co2   + h             8.987e+07  1.38  5232.877
 o     + oh            = o2    + h             4.000e+14 -0.50      0.
 h     + ho2           = oh    + oh            1.700e+14  0.0     875.
 oh    + oh            = o     + h2o           6.000e+08  1.30      0.
 h     + o2    + m     = ho2   + m             3.600e+17 -0.72      0.
       h2o/21./  co2/5.0/  h2/3.3/  co/2.0/
 h2o2  + m             = oh    + oh    + m     1.000e+16  0.00  45500.
       h2o/21./  co2/5.0/  h2/3.3/  co/2.0/
 h2    + oh            = h2o   + h             1.170e+09  1.30   3626.
 ho2   + ho2           = h2o2  + o2            3.000e+12  0.00      0.
 ch2o  + oh            = hco   + h2o           5.563e+10  1.095 -76.517
 ch2o  + ho2           = hco   + h2o2          3.000e+12  0.00   8000.
 hco   + o2            = ho2   + co            3.300e+13 -0.40      0.
 hco   + m             = h     + co    + m     1.591E+18  0.95  56712.329
 ch3   + ch3o          = ch4   + ch2o          4.300e+14  0.00      0.
 c2h4  + oh            = ch2o  + ch3           6.000e+13  0.0     960.
```

```
 c2h4  + oh          = c2h3  + h2o        8.020e+13  0.00    5955.
 c2h3  + o2          = ch2o  + hco        4.000e+12  0.00    -250.
 c2h3  + hco         = c2h4  + co         6.034e+13  0.0        0.
 c2h5  + o2          = c2h4  + ho2        2.000e+10  0.0    -2200.
 ch4   + o2          = ch3   + ho2        7.900e+13  0.00   56000.
 oh    + ho2         = h2o   + o2         7.50E+12   0.0        0.
 ch3   + o2          = ch2o  + oh         3.80E+11   0.0     9000.
 ch4   + h           = ch3   + h2         6.600e+08  1.60   10840.
 ch4   + oh          = ch3   + h2o        1.600e+06  2.10    2460.
 ch4   + o           = ch3   + oh         1.020e+09  1.50    8604.
 ch4   + ho2         = ch3   + h2o2       9.000e+11  0.00   18700.
 ch4   + ch2         = ch3   + ch3        4.000e+12  0.00    -570.
 c3h6                = c2h3 + ch3         3.150e+15  0.0    85500.0
end
```

B
Dados de Entrada e Saída do Programa Radcal e Interface em UDF para o Acoplamento Radcal/Fluent^{TM}

A seguir, será detalhada a especificação dos parâmetros de entrada no arquivo de entrada RC.dat, de forma que o Radcal calcule a intensidade da radiação espectral e as demais propriedades radiantes espectrais. Da mesma forma, serão descritos os parâmetros de saída e a maneira como o Radcal imprime no arquivo de saída RCOUT.dat, quando um processamento é bem sucedido.

B.1
Parâmetros de Entrada

Os dados de entrada são fornecidos no arquivo RC.dat, o qual possui formato livre. Nele, é permitido, na primeira linha, a entrada de um dado que representa o número de elementos, NPT, (cujo máximo 50), no qual o caminho óptico, s, é dividido.

A segunda linha lista o tamanho do primeiro elemento DD(1) em metros, seguido pela sua temperatura T(1) em Kelvin, e as pressões parciais (em kPa) do dióxido de carbono, PP(1,1), vapor de água, PP(1,2), metano, PP(1,3), monóxido de carbono, PP(1,4), oxigênio, PP(1,5) e nitrogênio, PP(1,6). A última entrada na segunda linha corresponde à fração volumétrica da fuligem no primeiro elemento, W(1). É importante ressaltar que o primeiro elemento é localizado no ponto do espaço em que a intensidade da radiação espectral é desejada, e não na vizinhança do volume computacional.

A terceira linha contém informações análogas à primeira, porém, para o segundo elemento, e assim por diante, para todos os NPT elementos. Finalmente, na linha NPT+2 são fornecidos a temperatura da parede, TWALL, e os números de onda mínimo e máximo (em cm^{-1}), OMMIN e OMMAX. Cabe ressaltar que as propriedades radiantes dos gases e a fuligem para números de onda, ω, menores que 50 cm^{-1} ou maiores que 10000 cm^{-1} são negligenciados.

A Figura B.1 mostra uma representação esquemática da maneira como o software Radcal discretiza o domínio espacial, e como os parâmetros de entrada são localizados, tanto para um sistema não homogêneno, como para o

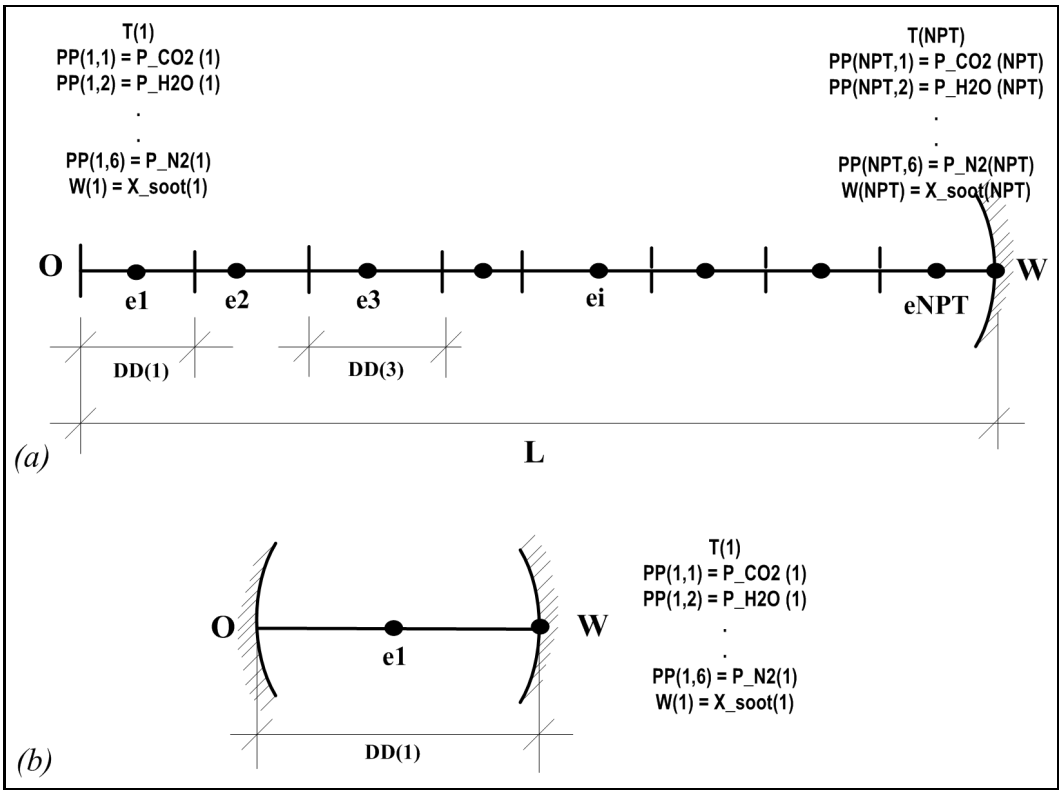

Figura B.1: Discretização considerada pelo programa Radcal para: (a) sistemas não homogêneos e (b) sistemas homogêneos e isotérmicos.

caso de um sistema homogêneo e isotérmico. Para fins de exemplo, apresentam-se dados que são fornecidos ao arquivo RC.dat como parâmetros de entrada necessários para cálculos relativos à radiação espectral, para ambos os tipos de sistemas, homogêneos e não homogêneos.

B.1.1
RC.dat – Arquivo de Entrada do Radcal

A seguir, mostram-se dois exemplos de dados de entrada, os quais descrevem as condições iniciais de problemas típicos que o Radcal é capaz de resolver. Estes dados de entrada foram retirados do relatório técnico 1042 da NIST (Grosshandler, 1993)

Como se pode perceber na Tabela B.1, a primeira linha indica o número de elementos. Neste exemplo, o valor de 1 denota um problema de radiação térmica de uma meio participante homogêneo e isotérmico. Na segunda linha, a primeira coluna é a espessura óptica do elemento, $L = 0,5$ m. Na terceira coluna é colocada a temperatura do meio, 320 K, As colunas seguintes correspondem aos dados de entrada das pressões parciais de dióxido de carbono, vapor de água, monóxido de carbono, oxigênio, nitrogênio iguais a $0,001$, $0,001$, $0,001$, $0,001$, $20,20$ e $80,80$ kPa, respectivamente, e à fração

Tabela B.1: Dados de entrada típicos do arquivo RC.dat para o caso de um sistema isotérmico e homogêneo (Grosshandler, 1993).

```
 1
0.5   320.0   0.001   0.001   0.001   0.001   20.20   80.80   1.0E-8
0.0   400.0   8000.0
 0
```

volumétrica da fuligem, que é de $1,0 \times 10^{-8}$. Na terceira linha, a primeira coluna é a temperatura da parede, 0 K, enquanto que nas segunda e a terceira colunas encontram-se os números de onda, $\omega = \lambda^{-1}$, mínimo e máximo, 400 e 8000 cm^{-1}, respectivamente. Finalmente na quarta linha o valor 0 indica o fim do arquivo.

Tabela B.2: Dados de entrada típicos do arquivo RC.dat para o caso de um sistema não-isotérmico (Grosshandler, 1993).

```
  5
0.30   1770.0   0.1667   0.1667   0.0   0.0   0.0   0.666   0.0
0.10   1637.0   0.1520   0.1520   0.0   0.0   0.0   0.696   0.0
0.10   1438.0   0.1300   0.1300   0.0   0.0   0.0   0.740   0.0
0.10   1158.0   0.0992   0.0992   0.0   0.0   0.0   0.802   0.0
0.05    899.0   0.0705   0.0705   0.0   0.0   0.0   0.857   0.0
 0.0     50.0   10000.0
  0
```

O arquivo de entrada mostrado na Tabela B.2 para o caso de um meio não homogêneo e não isotérmico é similar àquele da Tabela B.1 para um meio homogêneo e isotérmico. De forma geral, as linhas apresentadas nas Tabelas B.1 e B.2 correspondem a,

- Linha 1: número de elementos homogêneos.
- Linha 2: comprimento da célula (m), temperatura (K), pressões parciais de CO_2 (kPa), H_2O (kPa), CH_4 (kPa), CO (kPa), O_2 (kPa), N_2 (kPa) e fuligem (kPa).
- Linhas 3 até $n + 1$: similar à linha 2 para o resto dos elementos.
- Linha $n + 2$: temperatura da parede (K), comprimento de onda mínimo (cm^{-1}), comprimento de onda máximo (cm^{-1}).
- Linha $n+3$: critério de fim do arquivo (igual a 0), ou número de elementos homogêneos para o caso seguinte.

B.2
Parâmetros de Saída

Os resultados do cálculo realizado pelo Radcal podem ser encontrados no arquivo de saída RCOUT.DAT, onde as condições de entrada fornecidas no arquivo RC.dat, são resumidas em forma tabelada, seguido pelo fluxo total de energia radiante, com unidades de W/m^2 sr, que incide sobre o centro do elemento 1.

Assim, a intensidade de radiação espectral, (QW(K) para I_λ), e a transmitância (ou trasmissividade) espectral, (TTAU(K) para τ_λ) são listadas para cada comprimento de onda (LAMBDA(K) para λ). O número de comprimentos de onda calculados é limitado a 600, e os intervalos de comprimentos de onda variam entre 0,005 μm a 1 μm e 18,2 μm a 200 μm.

Para o caso especial de caminho óptico uniforme (avaliado sobre o comprimento médio do feixe, L_m), o Radcal, além de calcular a intensidade espectral e a trasmissividade espectral em todo o dominio de comprimento de onda prescrito, também calcula o coeficiente médio de absorção incidente, $a_I(L_m)$, o coeficiente médio de emissão de Planck, $a_P(L_m)$, e o coeficiente médio de absorção/emissão efetivo, $a_E(L_m)$. O Anexo B.2.1 mostra resultados típicos calculados pelo Radcal para os dados de entrada colocados no Anexo B.1.1

B.2.1
RCOUT.dat – Arquivo de Saída Criado pelo Radcal Apôs a Simulação

A Figura B.2 apresenta mediante o arquivo RCOUT.dat, os resultados típicos calculados pelo Radcal, das propriedades radiantes da mistura isotérmica e homogênea descrita pela Tabela B.1.

A transmitância espectral, função do comprimento de onda, é mostrada na Figura B.3, cujos dados foram obtidos daqueles apresentados no arquivo RCOUT.dat da Figura B.1.

Radial Profiles

Partial Pressures, kPa

J	dist,m	temp,K	CO2	H2O	CH4	CO	O2	N2	FV
1	.5000	320.	.001	.001	.001	.001	20.200	80.800	.1000E-07
wall		295.							

Total directional radiated energy flux = .136910E+03 Watts/m-2/strad

Spectral Intensity Distribution, Watts/m-2/μm/strad

wavelength	intensity	tau	wavelength	intensity	tau
3.125	.6838E-01	.9887	28.169	.1445E+01	.9984
3.175	.8059E-01	.9888	28.986	.1329E+01	.9984
3.200	.8745E-01	.9888	29.412	.1273E+01	.9984
3.252	.1029E+00	.9889	30.303	.1165E+01	.9983
3.361	.1417E+00	.9893	32.258	.9646E+00	.9981
3.419	.1660E+00	.9896	33.333	.8720E+00	.9980
3.448	.1795E+00	.9897	33.898	.8277E+00	.9979
3.509	.2098E+00	.9900	35.088	.7430E+00	.9978
3.540	.2266E+00	.9901	35.714	.7026E+00	.9977
3.636	.2852E+00	.9904	37.736	.5893E+00	.9974
3.704	.3318E+00	.9906	39.216	.5204E+00	.9972
3.738	.3577E+00	.9907	40.000	.4879E+00	.9970
3.846	.4468E+00	.9909	42.553	.3979E+00	.9967
3.922	.5170E+00	.9911	44.444	.3442E+00	.9964
3.960	.5558E+00	.9912	45.455	.3191E+00	.9964
4.040	.6413E+00	.9914	47.619	.2726E+00	.9962
4.082	.6884E+00	.9915	48.780	.2511E+00	.9961
4.167	.7919E+00	.9916	51.282	.2115E+00	.9960
4.211	.8621E+00	.9809	52.632	.1933E+00	.9960
4.301	.9969E+00	.9746	55.556	.1601E+00	.9960
4.348	.1043E+01	.9907	57.143	.1451E+00	.9960
4.444	.1190E+01	.9922	60.606	.1179E+00	.9961
4.494	.1271E+01	.9922	62.500	.1057E+00	.9961
4.598	.1449E+01	.9910	66.667	.8390E-01	.9963
4.651	.1543E+01	.9920	68.966	.7426E-01	.9964
4.819	.1861E+01	.9925	76.923	.4997E-01	.9969
4.878	.1977E+01	.9928	80.000	.4329E-01	.9970
5.000	.2229E+01	.9930	86.957	.3185E-01	.9975

The effective absorption coef. is .894161E-02/m
The Planck-mean absorption coef. is .673106E-02/m
The wall-incident mean is .632162E-02/m

Figura B.2: Dados de saída do RCOUT.dat fornecido pela simulação do Radcal para as condições iniciais descrito pela Tabela A.1 (Grosshandler, 1993).

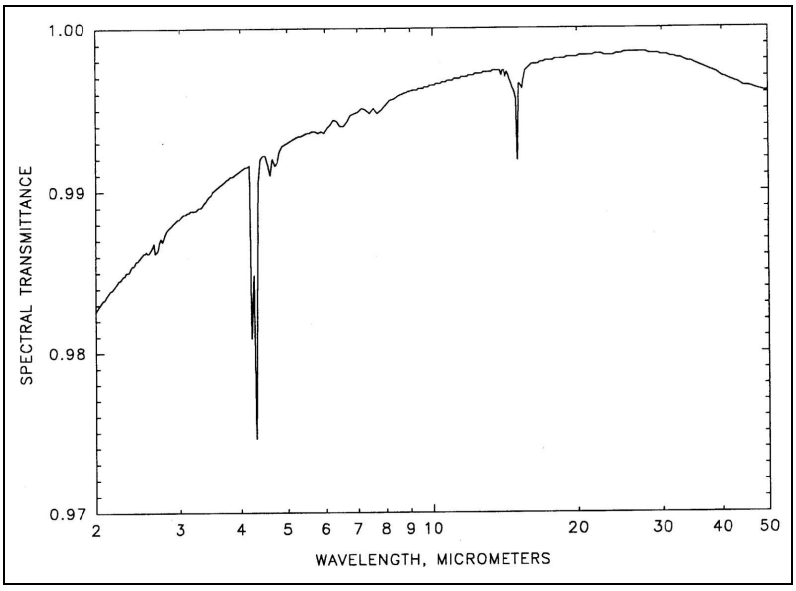

Figura B.3: Transmitância espectral de um sistema de $0,5$ m de diâmetro a 1 atm e 320 K, para uma mistura de gases composto por CO_2, H_2O, CH_4, CO, e fuligem (Grosshandler, 1993).

B.3
Implementação da Interface em UDF para o Acoplamento entre o Radcal e o Fluent^{TM}

A presente rotina corresponde à interface desenvolvida na UDF que permite acoplar o Radcal com o Fluent^{TM}.

```
/* ********************************************************************** */
/*                              Arquivo radcal_fspecies.c                 */
/* Calcula o Coeficiente de Radiacao Espectral sobre varias faixas de     */
/* comprimento de onda, para isto, obtem-se a ajuda do software RADCAL    */
/* desenvolvido em FORTRAN                                                */
/* ********************************************************************** */


#include "udf.h"
#include "pdf_props.h"
#include "materials.h"
#include "sg_mem.h"
#include "mem.h"
#include <math.h>


/* SUBROTINA FORTRAN DO RADCAL */
/* --------------------------- */
extern real __radcalv_MOD_radcal(real *dd, real *rct, real *specie1,
 real *specie2, real *specie3, real *specie4, real *specie5, real *twall,
 real *ommin, real *ommax, real *nom2);


DEFINE_WSGGM_ABS_COEFF(radcalfortran2, c, t, xi, p_t, s, soot_conc, Tcell, nb,
 ab_wsggm, ab_soot)
{


/* IDENTIFICACAO DOS INDICES DAS ESPECIES */
/* -------------------------------------- */
Material *m = THREAD_MATERIAL(t);

int i_co2 = mixture_specie_index(m, "co2");
int i_h2o = mixture_specie_index(m, "h2o");
int i_n2 = mixture_specie_index(m, "n2");
int i_o2 = mixture_specie_index(m, "o2");
int i_co = mixture_specie_index(m, "co");
int i_c3h8 = mixture_specie_index(m, "c3h8");


/* frac.mass.ful.(Y_soot)=conc.mass.ful.(M ou soot_conc)/dens.gas(rho_gas) */
/* frac.vol.ful.(svf) = frac.mass.ful.(Y_soot)*dens.gas(rho_gas)/dens.ful.(rho_soot) */

/* POR TANTO */
/* frac.vol.ful.(svf) = conc.mass.ful.(M ou soot_conc)/dens.ful.(rho_soot) */

/* Convertir em fracao volumetrica */
real svf = soot_conc / (2000); /* Armazena a frac. vol. da ful. a ser usado como dado */



/* DECLARACAO E LEITURA DAS VARIAVEIS QUE PRECISA O RADCAL PARA GASES */
/* ------------------------------------------------------------------ */
real rct = C_T(c,t);  /*  Temperatura lido desde o fluent para assignar a variável T */
real y_co2 = Pdf_Yi(c,t,i_co2); /*  Fracao máss. dioxido de carbono lida desde fluent */
real y_h2o = Pdf_Yi(c,t,i_h2o); /*  Fracao mássica da agua lida desde o fluent  */
real y_n2 = Pdf_Yi(c,t,i_n2);   /*  Fracao mássica do nitrogenio lida pelo o fluent  */
real y_o2 = Pdf_Yi(c,t,i_o2);   /*  Fracao mássica do oxigenio lida desde o fluent  */
real y_c3h8 = Pdf_Yi(c,t,i_c3h8);  /*  Fracao mássica do oxigenio lida desde o fluent  */


/* CALCULO DO PESO MOLECULAR MEDIO */
/* ------------------------------- */
real PM_medio = pow(y_co2/44 + y_h2o/18 + y_n2/28 + y_o2/16 + y_c3h8/44, -1);


/* CONVERSAO DOS GASES A FRACAO MOLAR */
/* ---------------------------------- */
real specie1 = y_co2*PM_medio/44; /* Armaz. frac. molar CO2 do fluent e assigna ao radcal */
```

```
real specie2 = y_h2o*PM_medio/18; /* Armaz. frac. molar H2O do fluent e assigna ao radcal */
real specie3 = 0.0;  /* Armaz. frac. molar n-C7H14 do fluent e asigna para radcal */
real specie4 = 0.0; /* Armaz. frac. molar CO e assigna para o radcal */
real specie5 = svf; /* Armaz. frac. molar da FULIGEM do fluent e assigna Para o radcal */



/* DADOS DE ENTRADA DO NUMEROS DE ONDA E TEMPERATURA DA PAREDE */
/* ---------------------------------------------------------- */
real twall = 500.0;/* temperatura da parede em K*/
real dd = 0.1892;  /*  caminho optico lido pelo radcal. CONFIG. CIL. = 0.946x0.200  */
real ommin;        /* corresponde a um comprimento de onda maximo 5 microm */
real ommax;        /* corresponde a um comprimento de onda minimo 4 microm */
real nom2;


/* Assignacao das variaves lidos do FLUENT para executar o RADCAL */
/* ---------------------------------------------------------- */
/* [2, 2.62, 2.94, 3.57, 4.17, 4.70, 7.0, 8.62 10 20 40 80 100]  */
/* real OMEGAMIN [8] = {1000, 1160, 1420, 2130, 2400, 2800, 3400, 3820}; */
/* real OMEGAMAX[8] = {1160, 1420, 2130, 2400, 2800, 3400, 3820, 10000}; */
/* IMPORTANTE.- Condicionar o valor do coeficiente de absorção dos gases igual a ZERO */
/* isto, como resultado que "ab = ab_wsggm + ab_soot" e o RADCAL retorna o valor de ab */
/* o qual será assignado a variavel ab_soot, por tanto ab_swggm dev de ser zero. */
*ab_wsggm = 0.0;
/* ----------------------------------------------------------------------------------*/


switch (nb)
  {
    /* Utiliza o RADCAL e calcula em todo o espectro o coef de absorcao media */
    case 0: ommin = 50, ommax = 10000, nom2 = 466.0;
    *ab_soot = __radcalv_MOD_radcal(&dd, &rct, &specie1, &specie2, &specie3,
    &specie4, &specie5, &twall, &ommin, &ommax, &nom2);
  }


}
```

C
Coeficiente de Absorção Global Mediante o Modelo de Soma Ponderada de Gases Cinzas (WSGGM) – Programação em UDF do modelo WSGGM(Mossi)

C.1
Função Definida Pelo Usuário (UDF) para o modelo WSGGM(Mossi)

A presente rotina calcula o coeficiente de absorção global da fuligem seguindo o modelo de Soma Ponderada dos Gases Cinzas (WSGGM), levando em consideração os coeficientes polinomiais de Mossi (2011), os quais foram obtidos a partir do banco de dados HITEMP.

```
/* ********************************************************************** */
/*                          Arquivo MOSSI_WSGGM.c                         */
/*   Calcula o Coeficiente de Radiacao utilizado a Soma Ponderada dos     */
/*      Gases Cinzas segundo os dados desenvolvidos por MOSSI (2011)      */
/* ********************************************************************** */

#include "udf.h"
#include "pdf_props.h"
#include "materials.h"
#include "sg_mem.h"
#include "mem.h"
#include <math.h>

DEFINE_WSGGM_ABS_COEFF(ABS_WSGGM_MOSSI, c, t, xi, p_t, s, soot_conc, Tcell,
 nb, ab_wsggm, ab_soot)
{

/* IDENTIFICACAO DOS INDICES DAS ESPECIES */
/* -------------------------------------- */
Material *m = THREAD_MATERIAL(t);

int i_co2 = mixture_specie_index(m, "co2");
int i_h2o = mixture_specie_index(m, "h2o");
int i_n2 = mixture_specie_index(m, "n2");
int i_o2 = mixture_specie_index(m, "o2");
int i_co = mixture_specie_index(m, "co");
int i_c3h8 = mixture_specie_index(m, "c3h8");


/* DECLARACAO E LEITURA DAS VARIAVEIS QUE PRECISA O RADCAL PARA GASES */
/* ------------------------------------------------------------------ */
real p_sist = 1.0;                    /* Assumido para o problema de 1 atm */
real y_co2 = Pdf_Yi(c,t,i_co2);       /*  Frac. máss. dioxido de carbono lido desde o fluent
*/
real y_h2o = Pdf_Yi(c,t,i_h2o);       /*  Fracao mássica da agua lida desde o fluent  */
real y_n2 = Pdf_Yi(c,t,i_n2);        /*  Fracao mássica do nitrogenio lida desde o fluent
*/
real y_o2 = Pdf_Yi(c,t,i_o2);        /*  Fracao mássica do oxigenio lida desde o fluent  */
real y_c3h8 = Pdf_Yi(c,t,i_c3h8);       /*  Fracao mássica do oxigenio lida desde o fluent
*/


/* CALCULO DO PESO MOLECULAR MEDIO (MUITO APROXIMADO) */
/* -------------------------------------------------- */
real PM_medio = pow(y_co2/44 + y_h2o/18 + y_n2/28 + y_o2/16 + y_c3h8/44, -1);
```

```
/* CONVERSAO DOS GASES A PRESSÃO PARCIAL */
/* ------------------------------------ */
real x_co2 = y_co2*PM_medio/44;
real x_h2o = y_h2o*PM_medio/18;
real p_co2 = x_co2*p_sist;
real p_h2o = x_h2o*p_sist;
real p = p_co2 + p_h2o;


/*  CAMINHO OPTICO FORNECIDO (manualmente)  */
/* ---------------------------------------- */
real Lm = 0.1892;      /*    Config cilindrica igual a 0.946x0.200 metros */


int i,j;
double TT[4];
double Ae[3] = {0, 0, 0};
double Epsilon = 0;


/* ====================================== */
/* DECLARACAO DAS TABELAS WSGGM DE MOSSI */
/* ====================================== */

/* para p_h2o/p_co2 = 1 */
/* -------------------- */

double BB1[3][4]={4.0831e-1, 1.1982e-4, -7.3069e-10, -2.24117e-11, 2.7241e-1, -1.4359e-4,
                  6.4469e-8, -1.5907e-11, 0.8683e-1, 7.4289e-6, -5.3027e-8, 1.5944e-11};
double KAPPA1[3]={0.5023, 9.3261, 1.8109e2};

/* para p_h2o/p_co2 = 2 */
/* -------------------- */

double BB2[3][4]={3.6586e-1, 1.2215e-4, 0.3844e-7, -3.3917e-11, 2.5820e-1, -0.3474e-4,
                 -0.3223e-7, 0.6287e-11, 1.2252e-1, -0.5629e-4, -0.1780e-7, 0.9547e-11};
double KAPPA2[3]={0.5240, 9.0553, 1.4199e2};

/* ================================ */


/* ================ */
/* CALCULOS PREVIOS */
/* ================ */
p = p_h2o + p_co2;
TT[0] = 1; TT[1] = Tcell; TT[2]=Tcell*Tcell; TT[3]=Tcell*Tcell*Tcell;


/* ==================== */
/* CALCULOS DE ab_wsggm */
/* ==================== */

if (p_h2o/p_co2 < 1.5)         /* Utiliza os dados da primeira tabela */
{
        for(i=0; i<=2; i++)
        {
          for(j=0; j<=3; j++)
          {
                Ae[i] = Ae[i] + BB1[i][j]*TT[j];
          }
          Epsilon = Epsilon +  Ae[i]*(1 - exp(-KAPPA1[i]*p*Lm));
        }

}
else                           /* Utiliza os dados da segunda tabela */
{
        for(i=0; i<=2; i++)
        {
          for(j=0; j<=3; j++)
          {
                Ae[i] = Ae[i] + BB2[i][j]*TT[j];
          }
          Epsilon = Epsilon +  Ae[i]*(1 - exp(-KAPPA2[i]*p*Lm));
        }
}

*ab_wsggm = -(1/Lm)*log(1-Epsilon);  /* Retorna o valor do coeficiente de absorção */

}
```

D
Coeficiente de Absorção Espectral da Fuligem Segundo a Teoria de Rayleigh – Formulação e Programação em UDF

D.1
Teoria de Absorção/Espalhamento de Rayleigh para o Cálculo das Propriedades Radiantes da Fuligem

Tal como foi apresentado no Capítulo 3, o coeficiente de absorção espectral para a fuligem, segundo a teoria de espalhamento Mie na aproximação Rayleigh, é definido como,

$$a_{soot,\lambda} = \frac{36\pi nq}{\left(n^2 - q^2 + 2\right)^2 + 4n^2q^2}\frac{f_V}{\lambda} = C_\lambda \frac{f_V}{\lambda}, \tag{D-1}$$

sendo que,

$$C_\lambda = \frac{36\pi nq}{\left(n^2 - q^2 + 2\right)^2 + 4n^2q^2}. \tag{D-2}$$

Estas expressões são válidas quando $d_p << \lambda$, o que é o caso para partículas de fuligem. Segundo a Equação (D-2), C_λ representa uma expressão que depende da parte real e imaginária do índice de refração, $m = n + qi$, que por sua vez, depende do comprimento de onda. Chang e Charalampopoulos (1990) caracterizaram a dependência de n e q com o comprimento de onda. A relação funcional empírica de n e q com λ obtida por estes autores é,

$$n = 1,811 + 0,1263\ln\lambda + 0,270\ln^2\lambda + 0,0417\ln^3\lambda, \tag{D-3}$$

$$q = 0,5821 + 0,1213\ln\lambda + 0,2309\ln^2\lambda - 0,0100\ln^3\lambda, \tag{D-4}$$

cuja aplicação é indicada nas faixas de comprimentos de onda $\lambda \in [0, 4, 30]$ μm.

D.2
Cálculo do Coeficiente de Absorção Equivalente da Fuligem Através da Teoria de Rayleigh e Aplicando-se a Metodologia de Discretização Valor Médio

Uma vez que o Fluent aceita, para cada faixa de comprimento de onda, apenas um valor constante do coeficiente de absorção, $\overline{a}_{soot,j}$ ($j = 1, 2, \ldots N_b$),

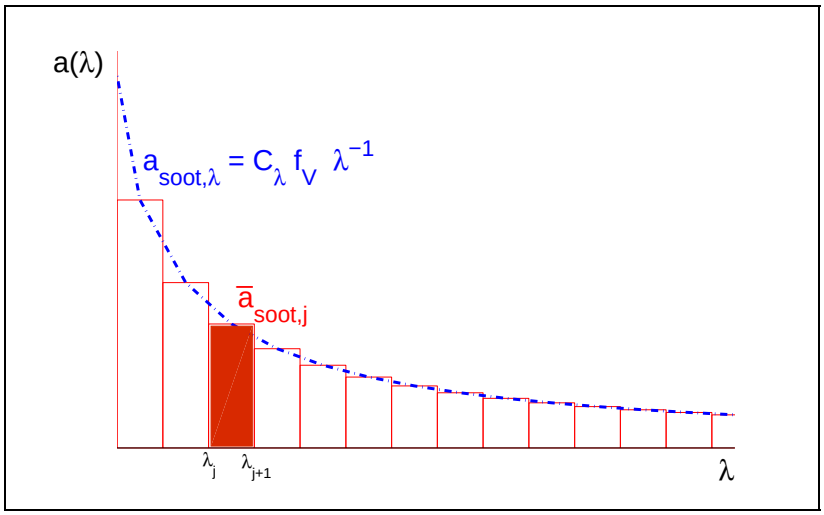

Figura D.1: Curva do coeficiente de absorção espectral da fuligem segundo a teoria de espalhamento Rayleigh e seu equivalente aplicando a abordagem de Modelo de Banda Larga-Cinza (GWB).

precisa-se implementar, via UDF, a conversão de $a_{soot,\lambda}$ [Equação (D-1)], em seu análogo discreto. Para isto é aplicada a abordagem de Modelo Banda Larga-Cinza (*Gray Wide Band Model*, GWB), que estabelece, para uma faixa de comprimento de onda delimitada por λ_j e λ_{j+1}, um coeficiente de absorção equivalente, $\overline{a}_{soot,j}$. Aplicando metodologia de discretização de "valor médio", obtem-se a seguinte expresão,

$$\overline{a}_{soot,j} = \frac{1}{\Delta\lambda_j}\int_{\lambda_j}^{\lambda_{j+1}} \frac{C_\lambda f_V}{\lambda^{-1}} d\lambda = \frac{C_{o,j} f_V}{\lambda_{j+1}-\lambda_j}\int_{\lambda_j}^{\lambda_{j+1}} \lambda^{-1} d\lambda, \qquad \text{(D-5)}$$

onde $\Delta\lambda_j = \lambda_{j+1} - \lambda_j$. Nota-se que f_V independe do comprimento de onda e que, por conveniência, o valor de C_λ é equivalente a $C_{o,j}$, o que será assumido por simplicidade, como sendo constante para cada faixa cinza. A Figura D.1 ilustra este procedimento de cálculo do coeficiente de absorção equivalente da fuligem, $\overline{a}_{soot,j}$, para cada j-ésima faixa de comprimento de onda.

A resolução da Equação (D-5) fornece o seguinte resultado para o coeficiente de absorção equivalente para a j-ésima faixa "cinza",

$$\overline{a}_{soot,j} = \frac{C_{o,j} f_V \ln\left(\frac{\lambda_{j+1}}{\lambda_j}\right)}{\lambda_{j+1}-\lambda_j}, \qquad \text{(D-6)}$$

sendo que,

$$C_{o,j} = C_\lambda(\lambda_j), \qquad \text{(D-7)}$$

que é resolvido com o emprego das Equações. (D-2), (D-3) e (D-4). Note-se que a Equação (D-6) pode ser reescrita, para cada j-ésima banda "cinza", como,

Tabela D.1: Discretização "valor médio". Valores de $C_{o,j}$ e K_j aplicados à UDF para cada faixa de comprimento de onda.

j	λ_j — λ_{j+1} (μm)	$C_{o,j}$	K_j
1	1,00 — 2,62	4.13	2456402.11
2	2,62 — 2,94	4.22	1519286.56
3	2,94 — 3.57	4.11	1267099.34
4	3,57 — 4,17	3.86	998742.34
5	4,17 — 4,70	3.60	812539.64
6	4,70 — 7,00	3.38	332004.76
7	7,00 — 8,62	2.58	235380.97
8	8,62 – 10,0	2.19	133574.46
9	10,0 — 20,0	1.93	117079.71
10	20,0 — 40,0	1.02	35189.94
11	40,0 — 70,0	0.52	9747.53
12	70,0 — 100	0.31	9747.53

$$\overline{a}_{soot,j} = K_j f_V, \tag{D-8}$$

onde

$$K_j = \frac{C_{o,j} \ln\left(\frac{\lambda_{j+1}}{\lambda_j}\right)}{\lambda_{j+1} - \lambda_j}, \tag{D-9}$$

é um valor que depende apenas da faixa de comprimento de onda. A Tabela D.1 mostra os valores de $C_{o,j}$ e K_j para 12 faixas de comprimento de onda, as quais foram empregados na implementação da UDF no cálculo do coeficiente de radiação espectral, e, a Figura D.2 mostra a dependência com o comprimento de onda de C_λ e K_j, os quais foram calculados mediante as respectivas Equações (D-2) e (D-9).

D.3
Funções Definidas Pelo Usuário (UDF)

A seguir, são escritas, em linguagem C das UDFs, as implementações realizadas para o cálculo do coeficiente de absorção da fuligem aplicando-se a teoria de absorção/espalhamento de Rayleigh, e empregando-se as discretização "valor médio".

D.3.1
Implementação do Modelo Raileigh

A seguinte rotina permite calcular o coeficiente de absorção da fuligem segundo a teoria de absorção/espalhamento Rayleigh, aplicando-se a metodolo-

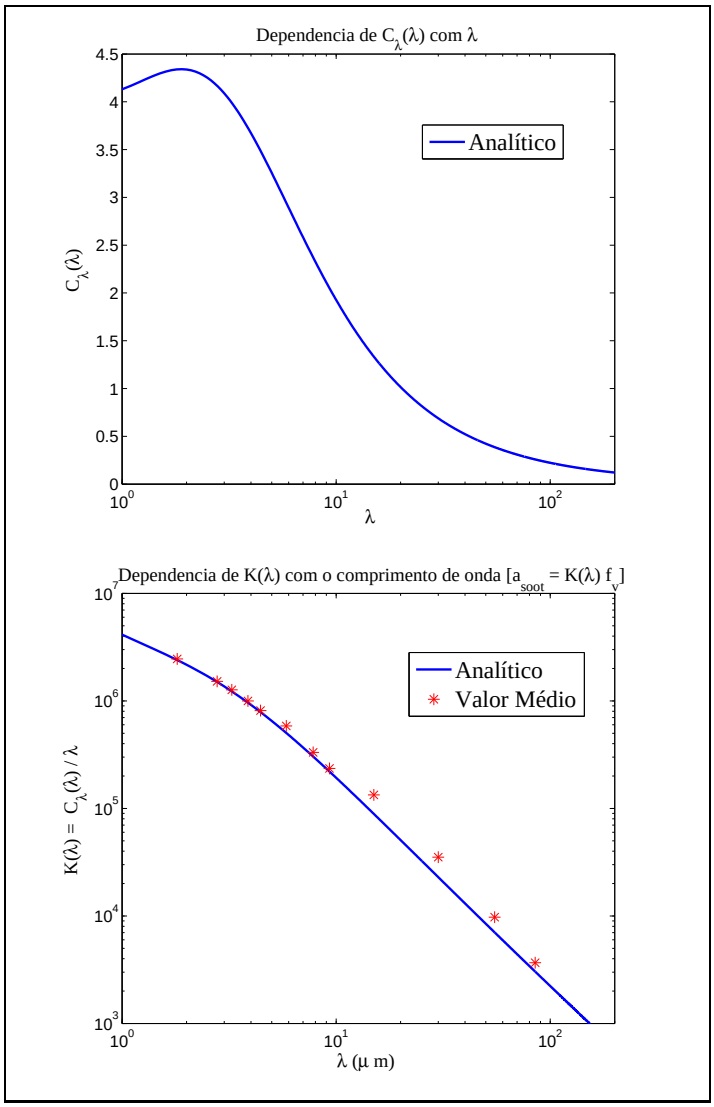

Figura D.2: Comparação entre os valores analíticos e de discretização de $C_\lambda(\lambda)$ e $K(\lambda) = C_\lambda(\lambda)/\lambda$ como função do comprimento de onda.

gia de discretização “Valor Médio”.

```
#include "udf.h"

DEFINE_WSGGM_ABS_COEFF(abs_rayleigh_DISCRETIZADO, c, t, xi, p_t, s, soot_conc, Tcell,
                       nb, ab_wsggm, ab_soot)
{

/* frac.mass.ful.(Y_soot) = conc.mass.ful.(M ou soot_conc) / dens.gas(rho_gas)  */
/* frac.vol.ful.(svf) = frac.mass.ful.(Y_soot) * dens.gas(rho_gas) / dens.ful.(rho_soot) */
/* POR TANTO */
/* frac.vol.ful.(svf) = conc.mass.ful.(M ou soot conc) / dens.ful.(rho_soot) */

/* Convertir em fracao volumetrica */
real svf = soot_conc / (2000);    /* Armazena a frac. vol. da ful. (svf) */

switch (nb)
        {

            case 0 :
                 {
                   *ab_soot = 2456402.11 * svf;
                 }
                 break;
```

```
            case 1 :
                 { *ab_soot = 1519286.56 * svf;
                 }
                 break;


            case 2 :
                 {
                   *ab_soot = 1267099.34 * svf;
                 }
                 break;


            case 3 :
                 {
                   *ab_soot = 998742.34 * svf;
                 }
                 break;


            case 4 :
                 {
                   *ab_soot = 812539.64 * svf;
                 }
                 break;

            case 5 :
                 {
                   *ab_soot = 584888.16 * svf;
                 }
                 break;


            case 6 :
                 {
                   *ab_soot = 332004.76 * svf;
                 }
                 break;


            case 7 :
                 {
                   *ab_soot = 235380.97 * svf;
                 }
                 break;


            case 8 :
                 {
                   *ab_soot = 133574.46 * svf;
                 }
                 break;


            case 9 :
                 {
                   *ab_soot = 35189.94 * svf;
                 }
                 break;


            case 10 :
                 {
                   *ab_soot = 9747.53 * svf;
                 }
                 break;


            case 11 :
                 {
                 *ab_soot = 3671.16 * svf;
                 }
                 break;
        }

}
```

E
Levantamento das Curvas de Vaporização para o n-heptano de n-dodecano(querosene)

A seguir apresentam-se as curvas de pressão de saturação do n-heptano e do n-dodecano, componentes representativos do querosene. Cabe ressaltar que o n-dodecano é o principal componente do querosene.

Estas curvas foram obtidos de equações semi-empíricas formuladas por Sazhin (2006) e das constantes fornecidas pelo NIST (*National Institute of Standards and Technology*) para a equação de Antoine,

$$\log_{10} p_s = A - \left(\frac{B}{T+C}\right), \tag{E-1}$$

onde p_s e T são a pressão de saturação (em bar) e a temperatura (em K) da substância, e onde A, B e C são parâmetros empíricos, específicos para cada substância. Assim, o NIST reporta das constantes A, B e C para o n-heptano e o n-dodecano, que foram obtidas do trabalho de Williamham *et al.* (1945), e que são apresentados na Tabela E.1.

Por outra parte, Sazhin (2006) compilou uma série de formulações semi-empríricas de propriedades termodinâmicas do n-Tetradecano, n-heptano, n-dodecano e Diesel, que descrevem a vaporização, ignição e quebra de gotículas destes combustíveis. Para o caso do n-heptano e do n-dodecano foram levantadas Sazhin (2006) as seguintes formulações semi-empíricas,

$$p_s = 10^{4,02677-1258,34/(T-53,85)}, \tag{E-2}$$

$$p_s = 6,894757 \times 10^{-5} \times e^{12,12767-3743,84/(T-93,022)}, \tag{E-3}$$

onde p_s e T são a pressão de saturação e a temperatura expressa em bar e K, respectivamente. Note-se que a Equação (E-2) apresenta, para o n-heptano, a

Tabela E.1: Parâmetros empíricos da Equação de Antoine para o n-heptano e o n-dodecano obtidos do trabalho de Williamham *et al.* (1945).

HIDROCARBONETO	A	B	C
n-heptano	4,02832	1268,636	-56,199
n-dodecano	4,10549	1625,928	-92,839

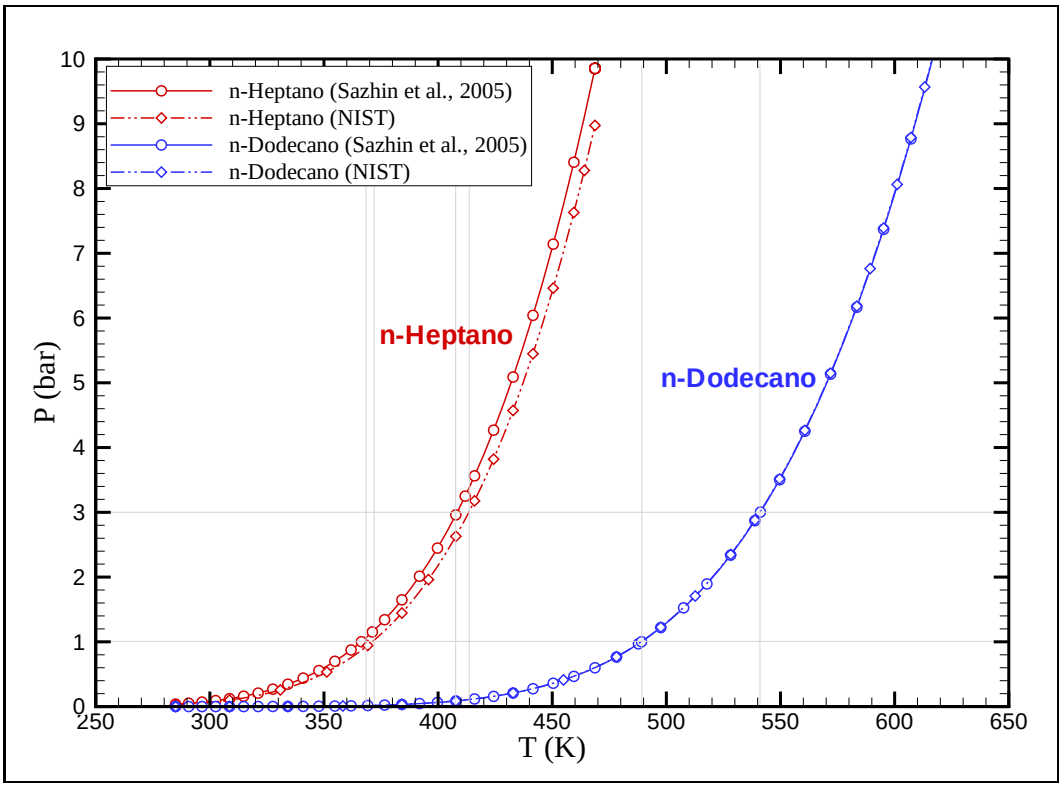

Figura E.1: Curvas de pressão de saturação do n-heptano e do n-dodecano.

solução da equação geral de Antoine [Equação (E-1)], e onde os coefcientes A, B e C, reportados por Sazhin (2006) são muito semelhantes àqueles apresentados por Williamham *et al.* (1945).

A Figura E.1 mostra as curvas de vaporização obtidas das formulações de Sazhin (2006) [Equações (E-2) e (E-3)] e com os dados de A, B e C do NIST (Williamham *et al.*, 1945) usados na Equação de Antoine [Equação (E-1)]. Nela mostra-se que, para o caso do n-dodecano, tanto a equação fornecida por Sazhin (2006) quanto os dados reportados pela NIST (Williamham *et al.*, 1945) levam a uma mesma curva de saturação. Contudo, para o caso do n-heptano, as curvas de saturação da equação de Antoine [Equação (E-1)] apresentam pequenas discrepâncias.

De posse das curvas de pressão de saturação para o n-heptano e o n-dodecano, é possível obter, para qualquer pressão, a temperaturas de ebulição. Além da curva de saturação do combustível empregado, é necessário fornecer ao Fluent^{TM} a temperatura de ebulição. Assim, a Tabela E.2 apresenta a temperatura de ebulição do n-heptano e do n-dodecano obtidas para $0,1$ e $0,3$ MPa.

Na simulação do queimador de Nakamura *et al.* (2011), o n-heptano é considerado como representativo das propriedades físicas do querosene. Desta forma, escolheu-se a formulação (E-3) para descrever a curva de saturação do

n-heptano, resultando nas temperaturas de ebulição de $366,4$ e $408,4$ K para pressões de operação do queimador de $0,1$ e $0,3$ MPa, respectivamente.

Tabela E.2: Temperaturas de ebulição do n-heptano e do n-dodecano para $0,1$ e $0,3$ MPa, obtidas das formulações de Sazhin (2006) e dos dados reportados pelo NIST [Williamham *et al.* (1945)].

Pressão	n-heptano		n-dodecano	
(MPa)	Sazhin (2006)	NIST	Sazhin (2006)	NIST
0,1	366,4 K	371,2 K	489,1 K	489,0 K
0,3	408,4 K	413,5 K	541,2 K	541,0 K

Cabe ressaltar que uma vez que não se dispõe de modelo de cinética química de combustão do n-dodecano, também é empregado o modelo cinético de Wisconsin (Patel *et al.*, 2004) para a combustão do n-heptano.