Fundamentos de Combustão

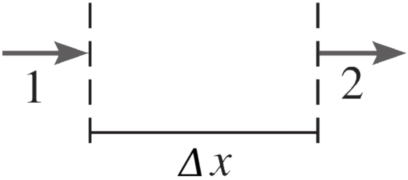
Aula X - Equação da Energia

Prof. Dr. Guenther Carlos Krieger Filho

Escola Politécnica da USP - LETE

14 de maio de 2017

Fluxo mássico da espécie i



Regime Permanente

$$\frac{\partial}{\partial t}() = 0 \qquad (1)$$

- Fluxo mássico da espécie i:

$$\dot{m}_i'' = Y_i \rho (u + V_i) \qquad (2)$$

$$\left[\frac{kg_i}{m^2 s}\right] = [\,] \left[\frac{kg_i}{m^3}\right] \left[\frac{m}{s}\right]$$

Obs* A velocidade absoluta da espécié *i* é dividida em duas parcelas

1ª: V_i —> velocidade de difusão relativa à mistura

2ª: u —> velocidade da mistura (Bulk)

Balanço de massa p/ espécie i

- Balanço de massa p/ espécie i:

$$\underbrace{Y_i\rho(u+V_i)\big|_{x+\Delta x} - Y_i\rho(u+V_i)\big|_{x}}_{\left[\frac{kg_i}{m^2 s}\right]} = \underbrace{\dot{\omega}_i \Delta x}_{\left[\frac{kg_i}{m^3 s}\right][m]} \tag{3}$$

fazendo $\lim\limits_{\Delta x \to 0}$, (**??**) torna-se

$$\frac{d}{dx}\left[Y_i\rho(u+V_i)\right] = \dot{\omega}_i \tag{4}$$

A velocidade da espécie se relaciona com a velocidade da mistura por:

$$\sum_i Y_i\rho(u+V_i) = \rho u \tag{5}$$

Balanço de massa p/ espécie i

mas $\sum_i Y_i = 1$ (por definição de Y_i), então

$$\sum_i Y_i \rho u + \sum_i Y_i \rho V_i = \rho u$$

$$\rho u + \rho \sum_i Y_i V_i = \rho u \therefore \boxed{\sum_i Y_i V_i = 0} \tag{6}$$

— para regime permanente, a continuidade é $\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0 \\ \rho u = cte \end{cases}$ (7)

Balanço de massa p/ espécie i

Voltando à equação (**??**)

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[Y_i \rho u\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[Y_i \rho V_i\right] = \dot{\omega}_i \tag{8}$$

usando a Lei de Fick para a velocidade de difusão, V_i,

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[Y_i \rho u\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[-\rho D \frac{dY_i}{dx}\right] = \dot{\omega}_i \tag{9}$$

ou

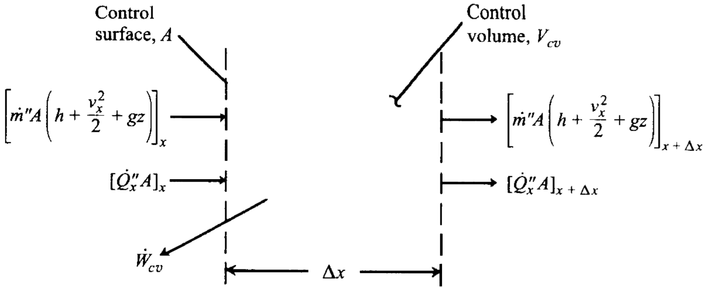
$$\frac{\partial}{\partial x}\left[Y_i \rho u - \rho D \frac{dY_i}{dx}\right] = \dot{\omega}_i \tag{10}$$

usando (**??**) em (**??**):

$$\rho u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left[-\rho D \frac{dY_i}{dx}\right]}_{\substack{\text{Transporte devido} \\ \text{à difusão de "i"}}} = \dot{\omega}_i \tag{11}$$

Balanço de energia

- Balanço de energia



para um volume de controle com *única* espécie, desprezando energias potencial gz e cinética $v^2/2$ e sem transferência de calor por radiação (sem perda de generalidade para a dedução multicomponente discutida neste capítulo), o balanço de energia no volume de controle é:

$$\frac{dE}{dt} = \left[\left(\dot{m}''h + \dot{Q}''\right)A\right]_{in} - \left[\left(\dot{m}''h + \dot{Q}''\right)A\right]_{out} - \dot{W} \qquad (12)$$

Usando a Lei de Fourier para o fluxo de calor por condução, $\dot{Q}''$,

$$\frac{dE}{dt} = \left[\left(\dot{m}''h + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right)A\right]_{in} - \left[\left(\dot{m}''h + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right)A\right]_{out} - \dot{W} \quad (13)$$

Regime permanente, $\frac{dE}{dt} = 0$, a equação da energia torna-se:

$$-\left[\left(\dot{m}''h + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right)A\right]_{in} + \left[\left(\dot{m}''h + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right)A\right]_{out} = -\dot{W} \quad (14)$$

Dividindo toda equação pela área A:

$$-\left[\dot{m}''h + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right]_{in} + \left[\dot{m}''h + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right]_{out} = -\dot{W}'''\Delta x \quad (15)$$

em que $\dot{W}'''$ é a taxa volumétrica de trabalho técnico (ou útil) no volume de controle.

O fluxo de entalpia da mistura pode ser expresso em função da soma dos fluxos de entalpia das espécies:

$$\dot{m}''h = \sum_i \dot{m}_i''h_i \rightarrow \sum_i \underbrace{Y_i\rho(u+V_i)}_{Eq.(\textbf{??})} h_i \tag{16}$$

$$= \underbrace{\sum_i Y_i\rho u h_i}_{\text{Fluxo de entalpia absoluta devido ao fluxo da mistura}} + \underbrace{\sum_i Y_i\rho V_i h_i}_{\text{Fluxo de entalpia absoluta devido à difusão das espécies}} \tag{17}$$

Substituindo (**??**) em (**??**)

$$-\left[\left(\rho u \underbrace{\sum_i Y_i h_i}_{h} + \sum_i Y_i \rho V_i h_i\right) + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right]_x$$

$$+\left[\left(\rho u \underbrace{\sum_i Y_i h_i}_{h} + \sum_i Y_i \rho V_i h_i\right) + \left(-k\frac{dT}{dx}\right)\right]_{x+\Delta x} = -\dot{W}'''\Delta x \quad (18)$$

dividindo toda a equação por Δx e fazendo $\lim\limits_{\Delta x \to 0}$:

$$\frac{d}{dx}(\rho u h) + \frac{d}{dx}\left(\sum_i Y_i \rho V_i h_i\right) - \underbrace{\frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right)}_{\text{Fluxo de energia p/ condução}} = -\dot{W}''' \quad (19)$$

ou ainda

$$\frac{d}{dx}\rho u h + \frac{d}{dx}\left(\sum_i Y_i \rho V_i h_i\right) = \frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right) - \dot{W}''' \tag{20}$$

novamente usando a Lei de Fick para a velocidade de difusão:

$$\frac{d}{dx}\rho u h + \frac{d}{dx}\left(-\rho D \sum_i \frac{dY_i}{dx} h_i\right) = \frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right) - \dot{W}''' \tag{21}$$

mas

$$\frac{d\sum_i h_i Y_i}{dx} = \sum_i h_i \frac{dY_i}{dx} + \sum_i Y_i \frac{dh_i}{dx} \tag{22}$$

$$\frac{d}{dx}\rho u h + \frac{d}{dx}\left(-\rho D \frac{d\sum_i h_i Y_i}{dx} + \rho D \sum_i Y_i \frac{dh_i}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right) - \dot{W}''' \tag{23}$$

Balanço de energia

ou ainda

$$\frac{d}{dx}\rho u h + \frac{d}{dx}\left(-\rho D\frac{dh}{dx} + \rho D\sum_i Y_i\frac{dh_i}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left(k\frac{dT}{dx}\right) - \dot{W}''' \quad (24)$$

A equação da energia pode ser simplificada no assim chamado *Formalismo de Shvab-Zeldovich*. As principais aproximações desta forma da equação da energia são:

1. Calor específico a pressão constante da espécie, $c_{p,i}$, não é função da temperatura e tem o mesmo valor para todas as espécies;
2. Calor específico da mistura, $\overline{c_p}$:

$$\overline{c_p} = \sum_i Y_i c_{p,i} \tag{25}$$

3. Difusividade de massa igual para todas as espécies, ou seja, uma mistura binária;
4. Difusividade térmica α igual à difusividade de espécies, D, ou seja, Número de Lewis unitário: $Le \equiv \frac{\alpha}{D} = 1$

Uma consequência importante das simplificações 1 e 2 é que a entalpia de formação das espécies, não é função da temperatura, $h^o_{f,i} \neq h^o_{f,i}(T)$, (ver livro do Kenneth Kuo, pg 50).

Assim, a entalpia absoluta da espécie i pode ser expressa por:

$$h_i = h^o_{f,i} + c_{p,i} \int_{Tref}^{T} dT \tag{26}$$

e a entalpia absoluta da mistura:

$$h = \sum_i Y_i h_i = \sum_i Y_i h^o_{f,i} + \overline{c_{p,i}} \int_{Tref}^{T} dT \tag{27}$$

em que a eq.(**??**) foi usada para o calor específico a pressão constante da mistura.

O termo $\sum_i Y_i \frac{dh_i}{dx}$ da eq.(**??**) pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned}\sum_i Y_i \frac{dh_i}{dx} = \sum_i Y_i \frac{d}{dx}\left(h^o_{f,i} + c_{p,i}\int_{Tref}^{T} dT \right) &= \sum_i Y_i \frac{d}{dx}\left(c_{p,i}\int_{Tref}^{T} dT \right) \\ &= \sum_i Y_i c_{p,i} \frac{d}{dx}\left(\int_{Tref}^{T} dT \right) \\ &= \overline{c_p}\frac{d}{dx}\left(\int_{Tref}^{T} dT \right) \\ &= \overline{c_p}\frac{dT}{dx} \quad (28)\end{aligned}$$

assim, a eq.(**??**) pode ser reescrita:

$$\frac{d}{dx}\rho u h + \frac{d}{dx}\left(-\rho D \frac{dh}{dx} + \rho D \overline{c_p}\frac{dT}{dx} \right) = \frac{d}{dx}\left(k \frac{dT}{dx} \right) - \dot{W}''' \qquad (29)$$

Balanço de energia - Formalismo de Shvab Zeldovich

$$\frac{d}{dx}\rho u h = \frac{d}{dx}\left(\underbrace{\rho D \frac{dh}{dx}}_{absoluta} - \underbrace{\rho D \overline{c_p} \frac{dT}{dx}}_{sensivel} + \underbrace{k \frac{dT}{dx}}_{sensivel}\right) - \dot{W}''' \qquad (30)$$

$$\frac{d}{dx}\rho u h = \frac{d}{dx}\left(\underbrace{\rho D \frac{dh}{dx}}_{absoluta} - \underbrace{\rho D \overline{c_p} \frac{dT}{dx}}_{sensivel} + \underbrace{\rho \alpha \overline{c_p} \frac{dT}{dx}}_{sensivel}\right) - \dot{W}''' \qquad (31)$$

com a simplificação 4 do formalismo de Shvab-Zeldovich, $Le \equiv \frac{\alpha}{D} = 1$,

$$\frac{d}{dx}\rho uh = \frac{d}{dx}\left(\underbrace{\rho D\frac{dh}{dx}}_{absoluta} - \underbrace{\rho Dc_p\frac{dT}{dx}}_{sensivel} + \underbrace{\rho Dc_p\frac{dT}{dx}}_{sensivel}\right) - \dot{W}''' \qquad (32)$$

assim:

$$\underbrace{\frac{d}{dx}(\rho uh)}_{\text{A}} = \underbrace{\frac{d}{dx}\left(\rho D\frac{dh}{dx}\right)}_{\text{B}} - \dot{W}''' \qquad (33)$$

Balanço de energia - Formalismo de Shvab Zeldovich

$$
\text{A}: \frac{d}{dx}(\rho u h) = \rho u \frac{dh}{dx} = \rho u \frac{d}{dx}\left(\sum_i Y_i h_i\right) = \rho u \frac{d}{dx}\left[\sum_i Y_i(h^o_{f,i} + \int_{T_{ref}}^{T} c_{p,i} dT)\right]
$$

$$
= \rho u \frac{d}{dx}\left[\sum_i (Y_i h^o_{f,i} + Y_i \int_{T_{ref}}^{T} c_{p,i} dT)\right] = \rho u \frac{d}{dx}\left[\sum_i Y_i h^o_{f,i} + \overline{c_p} \int_{T_{ref}}^{T} dT\right]
$$

$$
= \rho u \sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx} + \rho u \overline{c_p} \frac{dT}{dx} \quad (34
$$

Com manipulação do termo $\frac{dh}{dx}$ como feito na eq. (**??**), tem-se

$$\text{B} : \frac{d}{dx}\left(\rho D \frac{dh}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left[\rho D \left(\sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx} + \overline{c_p}\frac{dT}{dx}\right)\right] \tag{35}$$

Substituindo as equações (**??**) e (**??**) na eq.(**??**), tem-se:

$$\underbrace{\rho u \sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx}}_{\text{C}} + \rho u \overline{c_p}\frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx}\left[\rho D \left(\sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx} + \overline{c_p}\frac{dT}{dx}\right)\right] - \dot{W}''' \tag{36}$$

novamente usando a simplificação de que a entalpia de formação da espécie seja um valor constante, o termo C pode ser reescrito na forma:

$$\text{C} : \rho u \sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx} = \rho u \frac{d}{dx} \sum_i h^o_{f,i} Y_i \tag{37}$$

usando a equação da continuidade, eq.(**??**), torna-se:

$$\text{C} : \rho u \frac{d}{dx} \sum_i h^o_{f,i} Y_i = \frac{d}{dx} \left(\rho u \sum_i h^o_{f,i} Y_i \right) \tag{38}$$

então a eq.(**??**) torna-se:

$$\frac{d}{dx} \left(\rho u \sum_i h^o_{f,i} Y_i \right) + \rho u \overline{c_p} \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left[\rho D \left(\sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx} + \overline{c_p} \frac{dT}{dx} \right) \right] - \dot{W}''' \tag{39}$$

reagrupando-se os termos:

$$\rho u \overline{c_p} \frac{dT}{dx} - \frac{d}{dx}\left(\rho D \overline{c_p} \frac{dT}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left(\rho D \sum_i h^o_{f,i} \frac{dY_i}{dx} - \rho u \sum_i h^o_{f,i} Y_i\right) - \dot{W}''' \quad (40)$$

ou

$$\rho u \overline{c_p} \frac{dT}{dx} - \frac{d}{dx}\left(\rho D \overline{c_p} \frac{dT}{dx}\right) = \frac{d}{dx}\left[\sum_i h^o_{f,i}\left(\rho D \frac{dY_i}{dx} - \rho u Y_i\right)\right] - \dot{W}''' \quad (41)$$

ou ainda

$$\rho u \overline{c_p} \frac{dT}{dx} - \frac{d}{dx}\left(\rho D \overline{c_p} \frac{dT}{dx}\right) = \sum_i h^o_{f,i} \frac{d}{dx} \underbrace{\left(\rho D \frac{dY_i}{dx} - \rho u Y_i\right)}_{= -\dot{\omega}_i, eq.(\mathbf{??})} - \dot{W}''' \quad (42)$$

então:

$$\underbrace{\rho u \overline{c_p} \frac{dT}{dx}}_{1} - \underbrace{\frac{d}{dx}\left(\rho D \overline{c_p} \frac{dT}{dx}\right)}_{2} = \underbrace{-\sum_i h^o_{f,i} \dot{\omega}_i}_{3} - \underbrace{\dot{W}'''}_{4} \qquad (43)$$

1. Taxa de transporte de entalpia sensível devido à advecção $[W/m^3]$
2. Taxa de transporte de entalpia sensível devido à difusão $[W/m^3]$
3. Taxa de produção de entalpia sensível devido às reações químicas da combustão $[W/m^3]$
4. Taxa de produção/consumo de entalpia sensível por potência mecânica $[W/m^3]$

A equação da energia de Shvab-Zeldovich na forma simbólica é:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \overline{c_p} T - \rho D \overline{c_p} \nabla T) = -\sum_i h^o_{f,i} \dot{\omega}_i - \dot{W}''' \tag{44}$$

Em coordenadas cilíndricas, desprezando-se os efeitos de difusão na direção axial, a equação da energia de Shvab-Zeldovich torna-se:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial x}(r\rho v_x \overline{c_p} T) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho v_r \overline{c_p} T) - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\rho D \overline{c_p}\frac{\partial T}{\partial r}\right) = -\sum_i h^o_{f,i}\dot{\omega}_i - \dot{W}''' \tag{45}$$