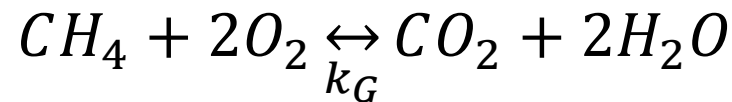


Modelo de Mecanismo Global de Queima de Hidrocarbonetos



$$\frac{d[CH_4]}{dt} = -A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T}\right) [CH_4]^m [O_2]^n$$

$$[CH_4] + [O_2] + [CO_2] + [H_2O] = 1$$

$$[O_2] = 1 - [CH_4] - [CO_2] - [H_2O]$$

$$[O_2] = 1 - (1 - X_B)[CH_4]_0 - X_B[CH_4]_0 - 2X_B[CH_4]_0$$

$$A = 1,3e8 \left[\frac{1}{s} \left(\frac{gmol}{cm^3} \right)^{1-m-n} \right]$$

$$E_a/R_u = 24358 K$$

$$m = -0,3$$

$$n = 1,3$$

$$[CH_4]_0 = 1/3 \quad \text{para mistura estequiométrica}$$

Ver TURNS, p156-157

Modelo de Mecanismo Global de Queima de Hidrocarbonetos

Grau de Conversão (fração de mistura queimada)

$$X_b = \frac{C_{\text{CH}_4}^0 - C_{\text{CH}_4}}{C_{\text{CH}_4}^0} = 1 - \frac{C_{\text{CH}_4}}{C_{\text{CH}_4}^0} \quad [\text{p/p}]$$

$$\left. \frac{dX_b}{dt} \right|_{\text{químico}} = - \frac{d}{dt} \left(\frac{C_{\text{CH}_4}}{C_{\text{CH}_4}^0} \right) = - \frac{d}{dt} \left(\frac{[\text{CH}_4]}{[\text{CH}_4]^0} \right) = R_f$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

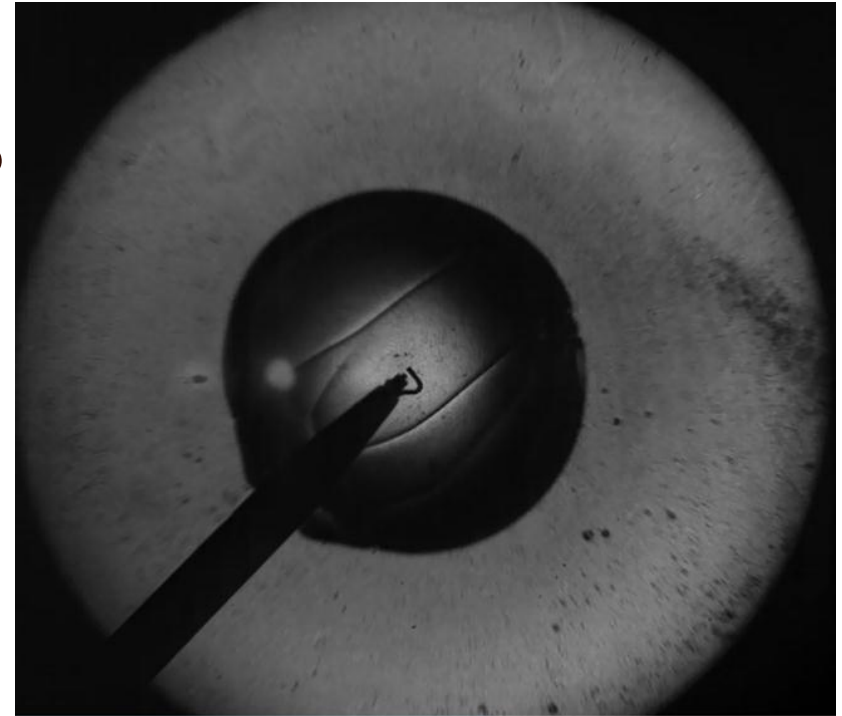
- Escoamento Invíscido

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x}$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho e u)}{\partial x} = -P \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\left. \frac{\partial(\rho X_b)}{\partial t} \right|_{\text{total}} + \left. \frac{\partial(\rho X_b u)}{\partial x} \right|_{\text{convectivo}} = \rho \left. \frac{\partial(X_b)}{\partial t} \right|_{\text{químico}} = \rho R_f$$



Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Equação de estado (gás ideal, composição média)

$$e = c_v T + X_b \Delta U^0 + \frac{1}{2} u^2$$

$$c_v = \frac{R}{(\gamma - 1)}$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}$$

$$c_p = 1510 \text{ [J/(kg K)]}$$

$$\Delta U^0 = 34 \times 10^6 \text{ [J/m}^3\text{]}$$

$$P = (\gamma - 1) \left[\rho e - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} \right]$$

$$T = \left(e - X_b \Delta U^0 - \frac{u^2}{2} \right) \frac{1}{c_v} = \left[\rho e - \rho X_b \Delta U^0 - \frac{(\rho u)^2}{2\rho} \right] \frac{1}{\rho c_v}$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Critérios de combustão

Ignição

$$T > T_{\text{ignição}} = 1020 \text{ K}$$

$$\text{e } [\text{CH}_4]_{\text{min}} \leq [\text{CH}_4] \leq [\text{CH}_4]_{\text{max}}$$

Extinção

$$X_b = 1$$

$$\text{ou } [\text{CH}_4] < [\text{CH}_4]_{\text{min}} \quad \text{ou} \quad [\text{CH}_4] > [\text{CH}_4]_{\text{max}}$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Equações diferenciais parcial (PDE) auxiliares

$$P = \rho RT$$

$$\ln(P) = \ln(\rho RT)$$

$$\partial P = \frac{P}{\rho} \partial \rho + \frac{P}{T} \partial T$$

$$\partial e = c_v \partial T + \Delta u^0 \partial X_b + u \partial u$$

$$\partial T = \frac{1}{c_v} (\partial e - \Delta u^0 \partial X_b - u \partial u)$$

$$\partial(\rho y) = \rho \partial y + y \partial \rho \qquad \partial y = \frac{1}{\rho} [\partial(\rho y) - y \partial \rho]$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Condição inicial

$$0 < x < 0,45 \quad \phi = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \\ \rho X_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_0 \\ 0 \\ (\rho e)_0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$0,45 < x < 0,55 \quad \phi = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho u \\ (\rho e)_1 \\ (\rho X_b)_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ 0 \\ (\rho e)_1 \\ \rho_1 \end{bmatrix}$$

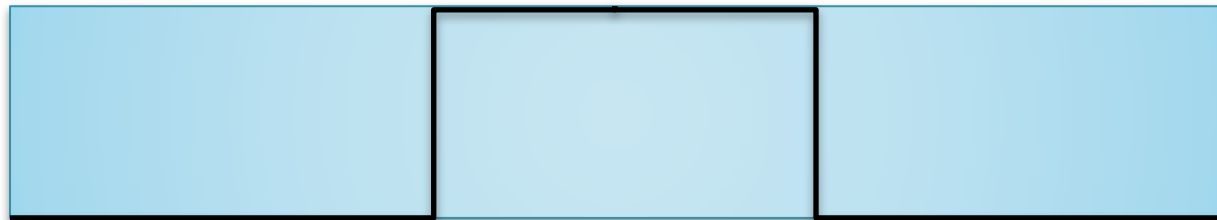
$$0,55 < x < 1 \quad \phi = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \\ \rho X_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_0 \\ 0 \\ (\rho e)_0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Condições de Contorno, câmara aberta na extremidade

$$\text{para } x = 0 \rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$$

$$\text{para } x = 1 \rightarrow \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$$



Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Formato de equação diferencial parcial (PDE) do MathLab

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \\ \rho X_b \end{bmatrix} = \mathbf{x}^0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \begin{bmatrix} \mathbf{x}^0 & -\rho u \\ & -\rho u^2 \\ & -\rho e u \\ & -\rho X_b u \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} \\ -P \frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} \\ \rho R_f \end{bmatrix}$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Formato de condições de contorno para equação diferencial parcial (PDE) do MathLab

$$x = 0 \text{ e } x = 1$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \\ \rho X_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Aplicação a Bomba de Volume Constante

- Rotinas MathLab

ConstVolBomb

[c,f,s] = ConstVolBombDeriv(x,t,phi,dphidt)

[dPdx] = GetdPdx(x,t,phi,dphidt)

[dudx] = Getdudx(x,t,phi,dphidt)

[dXbdt] = GetdXbdt(x,t,phi,dphidt)

[u0] = ConstVolBombIC(x)

[p1,q1,pr,qr] = ConstVolBombBC(x1,phi1,xr,phir,t)

[T] = GetT(e,Xb,u)

[P] = GetP(rho,T)

[rho] = GetRho(P,T)

[e] = GetE(T,Xb,u)