

C.02.01.A2 – Combustão e Equilíbrio Químico

Aplicação em FTAF – Finite Time Air-Fuel Otto Engine Model

Prof. C. Naaktgeboren, PhD



<https://github.com/CNThermSci/ApplThermSci>

Compiled on 2020-09-13 07h57m57s UTC

Modelo de Ar

- Ar é modelado **apenas** como uma mistura de Oxigênio, O_2 , e Nitrogênio, N_2 ;

Modelo de Ar

- Ar é modelado **apenas** como uma mistura de Oxigênio, O_2 , e Nitrogênio, N_2 ;
- A proporção é de ψ kmol de N_2 para cada 1 kmol de O_2 ;
- Nitrogênio será considerado **gás inerte**;
- Todos os demais gases inertes são modelados como sendo N_2 ;

Modelo de Ar

- Ar é modelado **apenas** como uma mistura de Oxigênio, O_2 , e Nitrogênio, N_2 ;
- A proporção é de ψ kmol de N_2 para cada 1 kmol de O_2 ;
- Nitrogênio será considerado **gás inerte**;
- Todos os demais gases inertes são modelados como sendo N_2 ;
- Valor típico para ψ é de $79/21 \approx 3,76$.

Modelo de Combustível

- Molécula de combustível **modelada** como $C_n C H_n H O_n O N_n N$;

Modelo de Combustível

- Molécula de combustível **modelada** como $Cn_C Hn_H On_O Nn_N$;
- Valores n_C , n_H , n_O , e n_N são **parâmetros** ajustáveis;

Modelo de Combustível

- Molécula de combustível **modelada** como $Cn_C Hn_H On_O Nn_N$;
- Valores n_C , n_H , n_O , e n_N são **parâmetros** ajustáveis;
- Seja ϵ a quantidade de **combustível** por **kmol de O_2** estequiometricamente oxidada;

Modelo de Combustível

- Molécula de combustível **modelada** como $Cn_C Hn_H On_O Nn_N$;
- Valores n_C , n_H , n_O , e n_N são **parâmetros** ajustáveis;
- Seja ϵ a quantidade de **combustível** por kmol de O_2 estequiometricamente oxidada;

$$\epsilon^{-1} \equiv n_C + \frac{n_H}{4} - \frac{n_O}{2}.$$

Modelo de Combustível

- Molécula de combustível **modelada** como $Cn_C Hn_H On_O Nn_N$;
- Valores n_C , n_H , n_O , e n_N são **parâmetros** ajustáveis;
- Seja ϵ a quantidade de **combustível** por kmol de O_2 estequiometricamente oxidada;

$$\epsilon^{-1} \equiv n_C + \frac{n_H}{4} - \frac{n_O}{2}.$$

- $\epsilon/(1 + \psi)$ é a razão **combustível-ar** estequiométrica.

Razão de Equivalência:

- Seja ϕ a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

Razão de Equivalência:

- Seja ϕ a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

$$\phi \equiv \frac{n_f/n_{\text{air}}}{\varepsilon/(1+\psi)}, \quad \text{assim,}$$

Razão de Equivalência:

- Seja ϕ a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

$$\phi \equiv \frac{n_f/n_{\text{air}}}{\epsilon/(1+\psi)}, \quad \text{assim,}$$

- $\phi < 1$ modela misturas combustível-ar com **excesso de ar** (pobre em combustível);

Razão de Equivalência:

- Seja ϕ a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

$$\phi \equiv \frac{n_f/n_{\text{air}}}{\epsilon/(1+\psi)}, \quad \text{assim,}$$

- $\phi < 1$ modela misturas combustível-ar com **excesso de ar** (pobre em combustível);
- $\phi > 1$ modela misturas combustível-ar com **excesso de combustível** (pobre em ar); e

Razão de Equivalência:

- Seja ϕ a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

$$\phi \equiv \frac{n_f/n_{\text{air}}}{\varepsilon/(1+\psi)}, \quad \text{assim,}$$

- $\phi < 1$ modela misturas combustível-ar com **excesso de ar** (pobre em combustível);
- $\phi > 1$ modela misturas combustível-ar com **excesso de combustível** (pobre em ar); e
- $\phi = 1$ modela misturas combustível-ar **estequiométricas**.

Mistura Ar-Combustível:

- Quantidades químicas **reais** de ar e combustível são n_{air} e n_f ...

Mistura Ar-Combustível:

- Quantidades químicas **reais** de ar e combustível são n_{air} e n_f ...
- ... na câmara de combustão fechada ao final da admissão, assumindo (P_0, V_0, T_0)

Mistura Ar-Combustível:

- Quantidades químicas **reais** de ar e combustível são n_{air} e n_f ...
- ... na câmara de combustão fechada ao final da admissão, assumindo (P_0, V_0, T_0)
- com $P_0 \leq P_{\text{atm}}$, $T_0 \approx T_{\text{atm}}$, para motores aspirados e $V_0 \approx V_{\text{PMI}}$. Assim:

Mistura Ar-Combustível:

- Quantidades químicas **reais** de ar e combustível são n_{air} e n_f ...
- ... na câmara de combustão fechada ao final da admissão, assumindo (P_0, V_0, T_0)
- com $P_0 \leq P_{\text{atm}}$, $T_0 \approx T_{\text{atm}}$, para motores aspirados e $V_0 \approx V_{\text{PMI}}$. Assim:

$$n_f = \frac{P_0 V_0}{\bar{R} T_0} \cdot \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi + \phi \epsilon},$$

Mistura Ar-Combustível:

- Quantidades químicas **reais** de ar e combustível são n_{air} e n_f ...
- ... na câmara de combustão fechada ao final da admissão, assumindo (P_0, V_0, T_0)
- com $P_0 \leq P_{\text{atm}}$, $T_0 \approx T_{\text{atm}}$, para motores aspirados e $V_0 \approx V_{\text{PMI}}$. Assim:

$$n_f = \frac{P_0 V_0}{\bar{R} T_0} \cdot \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi + \phi \epsilon},$$

$$n_{\text{air}} = \frac{P_0 V_0}{\bar{R} T_0} \cdot \frac{1 + \psi}{1 + \psi + \phi \epsilon}.$$

Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:

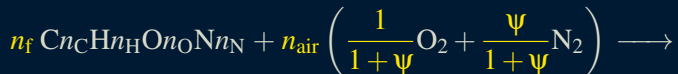
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



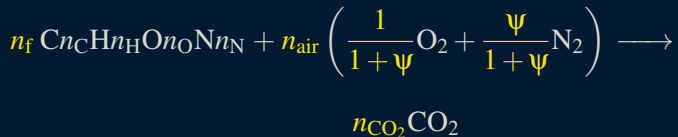
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



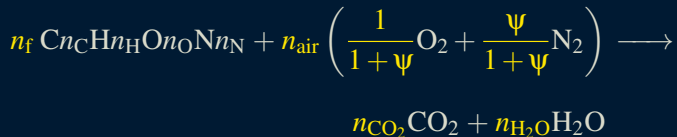
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



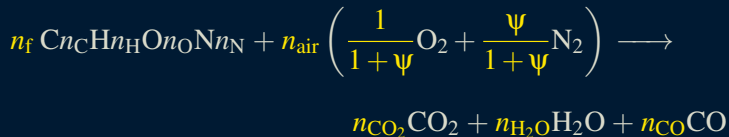
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



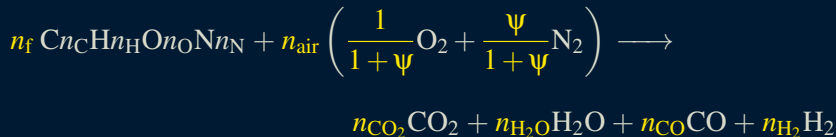
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



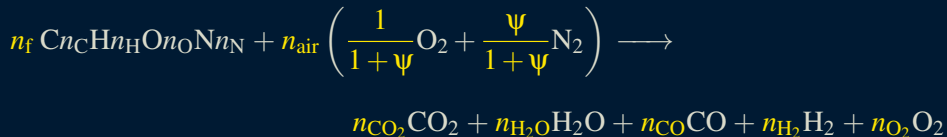
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



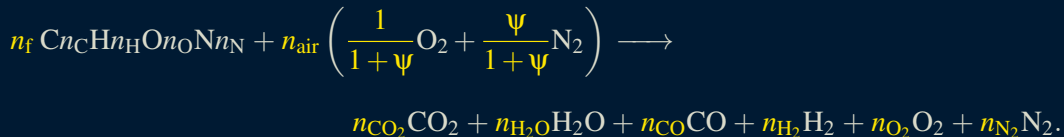
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



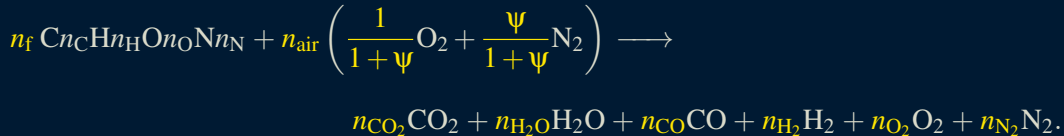
Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



Reação de Combustão Básica:

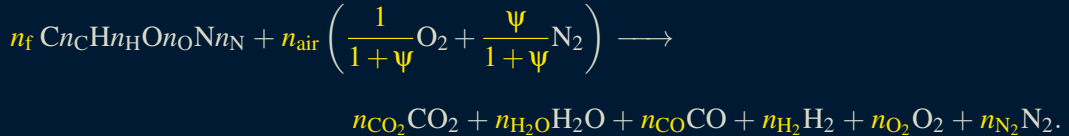
- A reação de combustão básica é:



- Hipótese: oxidação **mais completa** possível:

Reação de Combustão Básica:

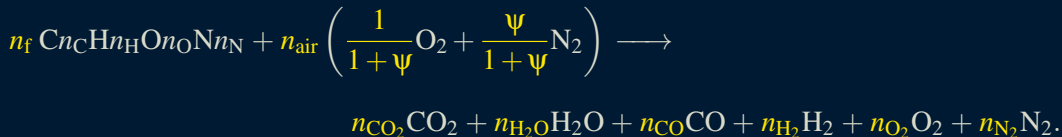
- A reação de combustão básica é:



- Hipótese: oxidação **mais completa** possível:
- $(\phi \leq 1)$: sem produção de **CO** e **H₂** $\longrightarrow n_{\text{CO}} = n_{\text{H}_2} = 0 \text{ kmol}$, e o sistema fecha;

Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



- Hipótese: oxidação **mais completa** possível:
- $(\phi \leq 1)$: sem produção de **CO** e **H₂** $\longrightarrow n_{\text{CO}} = n_{\text{H}_2} = 0 \text{ kmol}$, e o sistema fecha;
- $(\phi > 1)$: todo **O₂** é utilizado $\longrightarrow n_{\text{O}_2} = 0 \text{ kmol}$, e requer-se mais equações!

- Para $\phi > 1$ o fechamento é obtido por **equilíbrio químico**;

Equilíbrio Químico:

- Para $\phi > 1$ o fechamento é obtido por **equilíbrio químico**;
- Reação de “*water-gas shift reaction*”:

Equilíbrio Químico:

- Para $\phi > 1$ o fechamento é obtido por **equilíbrio químico**;
- Reação de “*water-gas shift reaction*”:



Equilíbrio Químico:

- Para $\phi > 1$ o fechamento é obtido por **equilíbrio químico**;
- Reação de “*water-gas shift reaction*”:



- **Constante de equilíbrio** da reação, $K(T)$, reduzido por hipótese a uma constante **K** :

Equilíbrio Químico:

- Para $\phi > 1$ o fechamento é obtido por **equilíbrio químico**;
- Reação de “*water-gas shift reaction*”:



- **Constante de equilíbrio** da reação, $K(T)$, reduzido por hipótese a uma constante **K** :

$$K(T) = \frac{n_{\text{H}_2\text{O}} n_{\text{CO}}}{n_{\text{CO}_2} n_{\text{H}_2}} = K(1740 \text{ K}) = 3,5.$$

Equilíbrio Químico: Solução em n_{CO} :

- Obtém-se uma **equação quadrática em n_{CO}** , cuja solução é:

Equilíbrio Químico: Solução em n_{CO} :

- Obtém-se uma **equação quadrática em n_{CO}** , cuja solução é:

$$\frac{n_{\text{CO}}}{n_{\text{f}}} = -\beta \pm \sqrt{\beta^2 - \gamma}, \quad \text{com}$$

Equilíbrio Químico: Solução em n_{CO} :

- Obtém-se uma equação quadrática em n_{CO} , cuja solução é:

$$\frac{n_{\text{CO}}}{n_{\text{f}}} = -\beta \pm \sqrt{\beta^2 - \gamma}, \quad \text{com}$$

$$\gamma = \frac{2n_{\text{C}}(\phi - 1)}{\phi \epsilon (K - 1)} \quad \text{e}$$

Equilíbrio Químico: Solução em n_{CO} :

- Obtém-se uma equação quadrática em n_{CO} , cuja solução é:

$$\frac{n_{\text{CO}}}{n_{\text{f}}} = -\beta \pm \sqrt{\beta^2 - \gamma}, \quad \text{com}$$

$$\gamma = \frac{2n_{\text{C}}(\phi - 1)}{\phi \epsilon (K - 1)} \quad \text{e}$$

$$\beta = \frac{\phi \epsilon [(2 - K)n_{\text{C}} - n_{\text{O}}] + 2[K(\phi - 1) + 1]}{2(K - 1)\phi \epsilon}.$$

Solução da Combustão:

n_k	rico em ar, $\phi \leq 1$	pobre em ar, $\phi > 1$
n_{CO_2}	$n_C n_f = n_C \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi} n_{air}$	$n_C n_f - n_{CO} = n_C \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi} n_{air} - n_{CO}$
n_{H_2O}	$\frac{n_H}{2} n_f = \frac{n_H}{2} \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi} n_{air}$	$(n_O - 2n_C) n_f + \frac{2}{1 + \psi} n_{air} + n_{CO}$
n_{CO}	0	n_{CO}
n_{H_2}	0	$\frac{2(\phi - 1)}{\phi \epsilon} n_f - n_{CO} = \frac{2(\phi - 1)}{1 + \psi} n_{air} - n_{CO}$
n_{O_2}	$(1 - \phi) \frac{n_{air}}{1 + \psi} = (1 - \phi) \frac{n_f}{\phi \epsilon}$	0
n_{N_2}	$\frac{\psi}{1 + \psi} n_{air} + \frac{n_N}{2} n_f$	$\frac{\psi}{1 + \psi} n_{air} + \frac{n_N}{2} n_f$

- A fração residual, ζ , de gases do ciclo anterior fica no sistema, $V_{PMS} > 0$;

Fração Residual:

- A **fração residual**, ζ , de gases do ciclo anterior fica no sistema, $V_{PMS} > 0$;
- Silva, R. K. de O. modelou dados de Heywood, J. B., como $\zeta: \zeta(P, r)$:

Fração Residual:

- A **fração residual**, ζ , de gases do ciclo anterior fica no sistema, $V_{PMS} > 0$;
- Silva, R. K. de O. modelou dados de Heywood, J. B., como $\zeta: \zeta(P, r)$:

$$\begin{aligned}\zeta(P, r) = & 17.807 + 6.423g(r) \\ & - [0.029 + 0.013g(r)]P \\ & + [1.828 + 0.798g(v)] \times 10^{-5} \times P^2, \quad \text{com}\end{aligned}$$

Fração Residual:

- A **fração residual**, ζ , de gases do ciclo anterior fica no sistema, $V_{PMS} > 0$;
- Silva, R. K. de O. modelou dados de Heywood, J. B., como $\zeta: \zeta(P, r)$:

$$\begin{aligned}\zeta(P, r) = & 17.807 + 6.423g(r) \\ & - [0.029 + 0.013g(r)]P \\ & + [1.828 + 0.798g(v)] \times 10^{-5} \times P^2, \quad \text{com}\end{aligned}$$

$$g(v) = (5.25 - 0.5r)e^{(8.5-r)}.$$

Misturas de Entrada:

$$\mathbb{M}_a = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right), \quad (\text{ar})$$

Misturas de Entrada:

$$\mathbb{M}_a = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right), \quad (\text{ar})$$

$$\mathbb{M}_f = n_f C n_C H n_H O n_O N n_N, \quad (\text{comb.})$$

Misturas de Entrada:

$$\mathbb{M}_a = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right), \quad (\text{ar})$$

$$\mathbb{M}_f = n_f \text{C}n_{\text{C}}\text{H}n_{\text{H}}\text{O}n_{\text{O}}\text{N}n_{\text{N}}, \quad (\text{comb.})$$

$$\mathbb{M}_{af} = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right) + n_f \text{C}n_{\text{C}}\text{H}n_{\text{H}}\text{O}n_{\text{O}}\text{N}n_{\text{N}}, \quad (\text{ar-comb.})$$

Misturas de Entrada:

$$\mathbb{M}_a = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right), \quad (\text{ar})$$

$$\mathbb{M}_f = n_f \text{C}n_{\text{C}}\text{H}n_{\text{H}}\text{O}n_{\text{O}}\text{N}n_{\text{N}}, \quad (\text{comb.})$$

$$\mathbb{M}_{af} = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right) + n_f \text{C}n_{\text{C}}\text{H}n_{\text{H}}\text{O}n_{\text{O}}\text{N}n_{\text{N}}, \quad (\text{ar-comb.})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_{pr} = & n_{\text{CO}_2} \text{CO}_2 + n_{\text{H}_2\text{O}} \text{H}_2\text{O} + n_{\text{CO}} \text{CO} \\ & + n_{\text{H}_2} \text{H}_2 + n_{\text{O}_2} \text{O}_2 + n_{\text{N}_2} \text{N}_2, \end{aligned} \quad (\text{produtos})$$

Misturas de Entrada:

$$\mathbb{M}_a = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right), \quad (\text{ar})$$

$$\mathbb{M}_f = n_f \text{C} n_{\text{C}} \text{H} n_{\text{H}} \text{O} n_{\text{O}} \text{N} n_{\text{N}}, \quad (\text{comb.})$$

$$\mathbb{M}_{af} = n_{\text{air}} \left(\frac{1}{1 + \psi} \text{O}_2 + \frac{\psi}{1 + \psi} \text{N}_2 \right) + n_f \text{C} n_{\text{C}} \text{H} n_{\text{H}} \text{O} n_{\text{O}} \text{N} n_{\text{N}}, \quad (\text{ar-comb.})$$

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_{pr} = & n_{\text{CO}_2} \text{CO}_2 + n_{\text{H}_2\text{O}} \text{H}_2\text{O} + n_{\text{CO}} \text{CO} \\ & + n_{\text{H}_2} \text{H}_2 + n_{\text{O}_2} \text{O}_2 + n_{\text{N}_2} \text{N}_2, \end{aligned} \quad (\text{produtos})$$

$$\mathbb{M}_{re} = (1 - \zeta) \mathbb{M}_{af} + (\zeta) \mathbb{M}_{pr}, \quad (\text{reagentes})$$



Photo by eberhard grossgasteiger from Pexels