

# 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 07h19m31s 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  $\psi$  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  $\psi$  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  $\psi$  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  $\epsilon$  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  $\epsilon$  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  $\epsilon$  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  $\phi$  a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  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  $\phi$  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);

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  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

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  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  $n_{\text{air}}$  e  $n_f$  ...

## Mistura Ar-Combustível:

- Quantidades químicas **reais** de ar e combustível são  $n_{\text{air}}$  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  $n_{\text{air}}$  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  $n_{\text{air}}$  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  $n_{\text{air}}$  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:

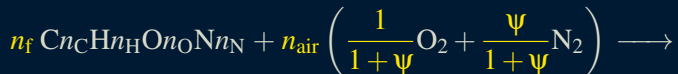
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



## Reação de Combustão Básica:

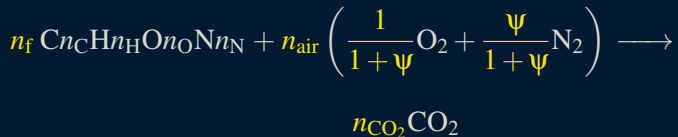
- A reação de combustão básica é:





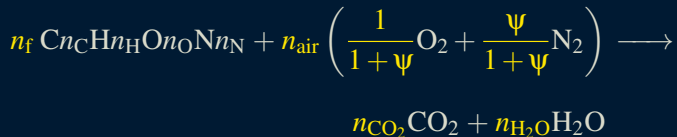
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



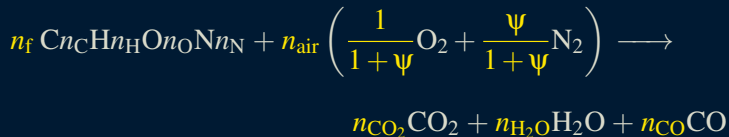
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



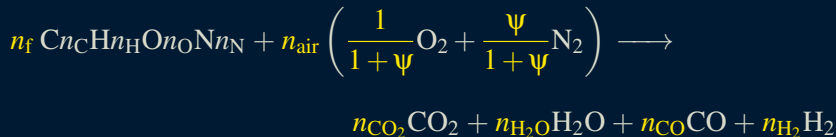
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



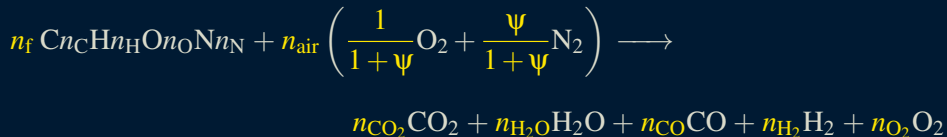
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



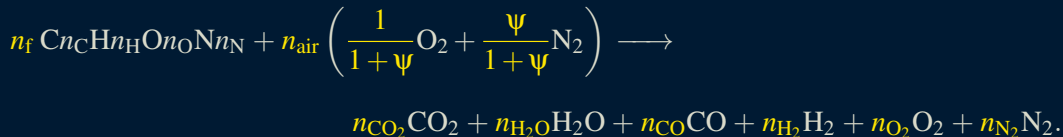
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



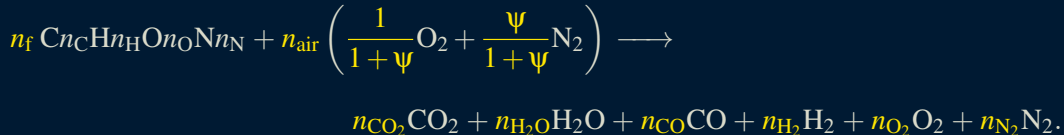
## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



## Reação de Combustão Básica:

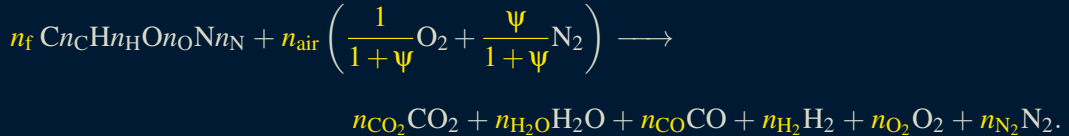
- A reação de combustão básica é:



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

# Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:

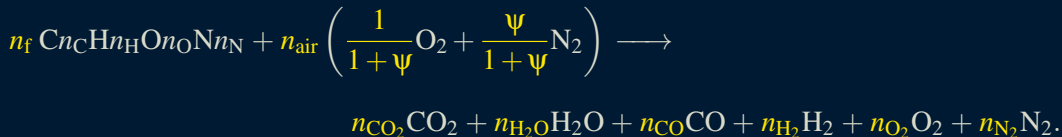


- Hipótese: oxidação **mais completa** possível:
- $(\phi \leq 1)$ : sem produção de **CO** e **H<sub>2</sub>**  $\longrightarrow n_{CO} = n_{H_2} = 0 \text{ kmol}$ , e o sistema fecha;



## Reação de Combustão Básica:

- A reação de combustão básica é:



- Hipótese: oxidação **mais completa** possível:
- $(\phi \leq 1)$ : sem produção de **CO** e **H<sub>2</sub>**  $\longrightarrow n_{\text{CO}} = n_{\text{H}_2} = 0 \text{ kmol}$ , e o sistema fecha;
- $(\phi > 1)$ : todo **O<sub>2</sub>** 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 $n_{\text{CO}}$ :

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

## Equilíbrio Químico: Solução em $n_{\text{CO}}$ :

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

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



## Equilíbrio Químico: Solução em $n_{\text{CO}}$ :

- Obtém-se uma **equação quadrática em  $n_{\text{CO}}$** , 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:

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

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

$$\beta = \frac{\phi \epsilon [(2 - K)n_C - n_O] + 2[K(\phi - 1) + 1]}{2(K - 1)\phi \epsilon}.$$

# Solução da Combustão:

$n_k$  air-rich,  $\phi \leq 1$

fuel-rich,  $\phi > 1$

$$n_{\text{CO}_2} \quad n_{\text{C}} n_{\text{f}} = n_{\text{C}} \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi} n_{\text{air}}$$

$$n_{\text{C}} n_{\text{f}} - c = n_{\text{C}} \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi} n_{\text{air}} - c$$

$$n_{\text{H}_2\text{O}} \quad \frac{n_{\text{H}}}{2} n_{\text{f}} = \frac{n_{\text{H}}}{2} \frac{\phi \epsilon}{1 + \psi} n_{\text{air}}$$

$$(n_{\text{O}} - 2n_{\text{C}}) n_{\text{f}} + \frac{2}{1 + \psi} n_{\text{air}} + c$$

$$n_{\text{CO}} \quad 0$$

$$c$$

$$n_{\text{H}_2} \quad 0$$

$$\frac{2(\phi - 1)}{\phi \epsilon} n_{\text{f}} - c = \frac{2(\phi - 1)}{1 + \psi} n_{\text{air}} - c$$

$$n_{\text{O}_2} \quad (1 - \phi) \frac{n_{\text{air}}}{1 + \psi} = (1 - \phi) \frac{n_{\text{f}}}{\phi \epsilon}$$

$$0$$

$$n_{\text{N}_2} \quad \frac{\psi}{1 + \psi} n_{\text{air}} + \frac{n_{\text{N}}}{2} n_{\text{f}}$$

$$\frac{\psi}{1 + \psi} n_{\text{air}} + \frac{n_{\text{N}}}{2} n_{\text{f}}$$

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  a razão de equivalência, ou a razão combustível-ar **real pela estequiométrica**:

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  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  $\phi$  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);

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  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

## Razão de Equivalência:

- Seja  $\phi$  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**.





Photo by eberhard grossgasteiger from Pexels