

C.02.01.A1 – Modelo de Mistura Reativa Ideal

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

Prof. C. Naaktgeboren, PhD



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

Compiled on 2020-09-14 19h26m14s UTC



Apresentação: Frações de Massa e Molares:

- Mistura m com p componentes indexados por k ;
- Caracterizada pelas frações mássicas, mf_k , e frações molares, y_k :

$$\text{mf}_k = \frac{m_k}{m_m}, \quad \text{e} \quad y_k = \frac{n_k}{n_m},$$

- Massa da mistura, m_m , e sua quantidade química, n_m :

$$m_m = \sum_{k=1}^p m_k, \quad \text{e} \quad n_m = \sum_{k=1}^p n_k.$$



Massa Molecular e Constante de Gás Aparentes:

- Massa molecular aparente, M_m : média ponderada pelas frações molares:

$$M_m = \frac{m_m}{n_m} = \sum_{k=1}^p y_k M_k,$$

- Define a constante de gás aparente, R_m , junto com \bar{R} :

$$R_m = \frac{\bar{R}}{M_m}.$$



Equação de Estado e Calores Específicos Componentes:

- Mistura de comportamento $P - T - v$ ideal:

$$P_m V_m = n_m \bar{R} T_m = m_m R_m T_m.$$

- Modelo de calor específico $\bar{c}_{p,k}(T) = \bar{c}_{v,k}(T) + \bar{R}$ para cada componente k :

$$\bar{c}_{p,k}(T) \stackrel{\text{mod}}{=} \sum_{i=-4}^4 a_{i,k} T^i \pm w_{cp}, \quad T_{\min} \leq T \leq T_{\max}.$$



Calores Específicos da Mistura:

- À volume constante, $\bar{c}_{v,m}(T)$:

$$\bar{c}_{v,m}(T) = \sum_{k=1}^p y_k \cdot \bar{c}_{v,k}(T).$$

- À pressão constante, $\bar{c}_{p,m}(T)$:

$$\bar{c}_{p,m}(T) = \sum_{k=1}^p y_k \cdot \bar{c}_{p,k}(T).$$

Entalpia de Componentes Reativos:

$$\begin{aligned} H_k(T) &= n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow \\ &= n_k [\bar{h}_{f,k}^0 + \bar{h}_k^0(T)], \quad \rightarrow \\ &= n_k \left[\bar{h}_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T \bar{c}_{p,k}(T) dT \right], \text{ onde} \end{aligned}$$

- $\bar{h}_{f,k}^0$ é a entalpia específica molar de formação do componente k ...
- ...no estado de referência $(P_0, T_0) \equiv (1 \text{ atm}, 298.15 \text{ K})$; e
- \bar{h}_k^0 é a entalpia específica molar do comp. k , em relação ao estado de ref. (P_0, T_0) .

Energia Interna de Componentes Reativos:

$$\begin{aligned} U_k(T) &= n_k \bar{u}_k(T) = m_k u_k(T), \quad \rightarrow \\ &= n_k [\bar{u}_{f,k}^0 + \bar{u}_k^0(T)], \quad \rightarrow \\ &= n_k \left[\bar{u}_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T \bar{c}_{v,k}(T) dT \right], \text{ onde} \\ \bar{u}_{f,k}^0 &\equiv \bar{h}_{f,k}^0 - P_0 \bar{v}_0 = \bar{h}_{f,k}^0 - \bar{R}T_0, \text{ e} \end{aligned}$$

- \bar{u}_k^0 é a energia interna específica molar do comp. k , em relação a (P_0, T_0) .

Energia Interna da Mistura Reativa:

$$\begin{aligned} U_m(T) &= \sum_{k=1}^p U_k(T) \equiv U_{f,m}^0 + U_m^0(T), \text{ com} \\ U_{f,m}^0 &= \sum_{k=1}^p n_k \bar{u}_{f,k}^0 = \sum_{k=1}^p n_k \bar{h}_f^0 - n_m \bar{R}T_0 = H_{f,m}^0 - n_m \bar{R}T_0, \text{ e} \\ U_m^0(T) &= \sum_{k=1}^p n_k \bar{u}_k^0(T) = \sum_{k=1}^p n_k \int_{T_0}^T \bar{c}_{v,k}(T) dT. \end{aligned}$$