

# 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/ApplThermSci>

Compiled on 2020-09-14 19h26m15s UTC

# Apresentação: Frações de Massa e Molares:

- Mistura  $m$  com  $p$  componentes indexados por  $k$ ;

# Apresentação: Frações de Massa e Molares:

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

## Apresentação: Frações de Massa e Molares:

- Mistura  $m$  com  $p$  componentes indexados por  $k$ ;
- Caracterizada pelas frações mássicas,  $\mathbf{mf}_k$ , e frações molares,  $y_k$ :

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

## Apresentação: Frações de Massa e Molares:

- Mistura  $m$  com  $p$  componentes indexados por  $k$ ;
- Caracterizada pelas frações mássicas,  $\mathbf{mf}_k$ , e frações molares,  $y_k$ :

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

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

# Apresentação: Frações de Massa e Molares:

- Mistura  $m$  com  $p$  componentes indexados por  $k$ ;
- Caracterizada pelas frações mássicas,  $\text{mf}_k$ , 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:

# Massa Molecular e Constante de Gás Aparentes:

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

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



# 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  $\bar{R}$ :

# 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:

# Equação de Estado e Calores Específicos Componentes:

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

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

# 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  $k$ :

# 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  $k$ :

$$\bar{c}_{p,k}(T) \stackrel{\text{mod}}{=} \sum_{i=-4}^4 a_{i,k} T^i$$

# 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  $k$ :

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

# 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,  $\bar{c}_{v,m}(T)$ :

# Calores Específicos da Mistura:

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

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

# 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,  $\bar{c}_{p,m}(T)$ :

# 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:

$$H_k(T) = n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow$$

# Entalpia de Componentes Reativos:

$$\begin{aligned} H_k(T) &= n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow \\ &= n_k [\bar{h}_{f,k}^0 + \bar{h}_k^0(T)], \quad \rightarrow \end{aligned}$$

# Entalpia de Componentes Reativos:

$$H_k(T) = n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow$$

$$= n_k [\bar{h}_{f,k}^0 + \bar{h}_k^0(T)], \quad \rightarrow$$

$$= n_k \left[ \bar{h}_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T \bar{c}_{p,k}(T) dT \right], \text{ onde}$$

# Entalpia de Componentes Reativos:

$$H_k(T) = n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow$$

$$= n_k [\bar{h}_{f,k}^0 + \bar{h}_k^0(T)], \quad \rightarrow$$

$$= n_k \left[ \bar{h}_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T \bar{c}_{p,k}(T) dT \right], \text{ onde}$$

- $\bar{h}_{f,k}^0$  é a entalpia específica molar **de formação** do componente  $k$ ...



# Entalpia de Componentes Reativos:

$$H_k(T) = n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow$$

$$= n_k [\bar{h}_{f,k}^0 + \bar{h}_k^0(T)], \quad \rightarrow$$

$$= n_k \left[ \bar{h}_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T \bar{c}_{p,k}(T) dT \right], \text{ onde}$$

- $\bar{h}_{f,k}^0$  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

# Entalpia de Componentes Reativos:

$$H_k(T) = n_k \bar{h}_k(T) = m_k h_k(T), \quad \rightarrow$$

$$= n_k [\bar{h}_{f,k}^0 + \bar{h}_k^0(T)], \quad \rightarrow$$

$$= n_k \left[ \bar{h}_{f,k}^0 + \int_{T_0}^T \bar{c}_{p,k}(T) dT \right], \text{ onde}$$

- $\bar{h}_{f,k}^0$  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:

$$U_k(T) = n_k \bar{u}_k(T) = m_k u_k(T), \quad \rightarrow$$

# Energia Interna de Componentes Reativos:

$$\begin{aligned}U_k(T) &= n_k \bar{u}_k(T) = m_k u_k(T), \quad \rightarrow \\&= n_k [\bar{u}_{f,k}^0 + \bar{u}_k^0(T)], \quad \rightarrow\end{aligned}$$

# Energia Interna de Componentes Reativos:

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

# Energia Interna de Componentes Reativos:

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

# 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:

$$U_m(T) = \sum_{k=1}^p U_k(T) \equiv U_{f,m}^0 + U_m^0(T), \text{ com}$$



# Energia Interna da Mistura Reativa:

$$U_m(T) = \sum_{k=1}^p U_k(T) \equiv U_{f,m}^0 + U_m^0(T), \text{ com}$$

$$U_{f,m}^0 = \sum_{k=1}^p n_k \bar{u}_{f,k}^0 = \sum_{k=1}^p n_k \bar{h}_f^0 - n_m \bar{R}T_0 = H_{f,m}^0 - n_m \bar{R}T_0, \text{ e}$$

# Energia Interna da Mistura Reativa:

$$U_m(T) = \sum_{k=1}^p U_k(T) \equiv U_{f,m}^0 + U_m^0(T), \text{ com}$$

$$U_{f,m}^0 = \sum_{k=1}^p n_k \bar{u}_{f,k}^0 = \sum_{k=1}^p n_k \bar{h}_f^0 - n_m \bar{R}T_0 = H_{f,m}^0 - n_m \bar{R}T_0, \text{ e}$$

$$U_m^0(T) = \sum_{k=1}^p n_k \bar{u}_k^0(T) = \sum_{k=1}^p n_k \int_{T_0}^T \bar{c}_{v,k}(T) dT.$$



Photo by eberhard grossgasteiger from Pexels