# OBJETIVO

O **Lorem Ipsum** é um texto modelo da indústria tipográfica e de impressão. O Lorem Ipsum tem vindo a ser o texto padrão usado por estas indústrias desde o ano de 1500, quando uma misturou os caracteres de um texto para criar um espécime de livro. Este texto não só sobreviveu 5 séculos, mas também o salto para a tipografia electrónica, mantendo-se essencialmente inalterada. Foi popularizada nos anos 60 com a disponibilização das folhas de Letraset, que continham passagens com Lorem Ipsum, e mais recentemente com os programas de publicação como o Aldus PageMaker que incluem versões do Lorem Ipsum.

# APLICAÇÃO

O **Lorem Ipsum** é um texto modelo da indústria tipográfica e de impressão. O Lorem Ipsum tem vindo a ser o texto padrão usado por estas indústrias desde o ano de 1500, quando uma misturou os caracteres de um texto para criar um espécime de livro. Este texto não só sobreviveu 5 séculos, mas também o salto para a tipografia electrónica, mantendo-se essencialmente inalterada. Foi popularizada nos anos 60 com a disponibilização das folhas de Letraset, que continham passagens com Lorem Ipsum, e mais recentemente com os programas de publicação como o Aldus PageMaker que incluem versões do Lorem Ipsum.

Sumário

[OBJETIVO 1](#_Toc146001816)

[APLICAÇÃO 1](#_Toc146001817)

[1. REAÇÃO ESTEQUIOMÉTRICA 3](#_Toc146001818)

[1.1. COMPOSIÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO 3](#_Toc146001819)

[1.2. DEFINIÇÃO DO NÚMERO DE MOLS da reação 3](#_Toc146001820)

[1.3. TEMPERATURA ADIABÁTICA DE CHAMA 5](#_Toc146001821)

[2. razão de mistura e razão de equivalência 6](#_Toc146001822)

[3. REAÇÃO COM DISSOCIAÇÃO 7](#_Toc146001823)

[3.1. COMPOSIÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO 7](#_Toc146001824)

[3.2. NÚMERO DE MOLS DOS REAGENTES E PRODUTOS 7](#_Toc146001825)

[3.3. REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO 8](#_Toc146001826)

[3.4. REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO CONSIDERADAS 9](#_Toc146001827)

[3.5. PROCESSO DE RESOLUÇÃO DA REAÇÃO DE DISSOCIAÇÃO 10](#_Toc146001828)

# REAÇÃO ESTEQUIOMÉTRICA

## COMPOSIÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO

Os produtos da Reação Estequiométrica são definidos com base na quantidade de mols de cada elemento nos propelentes:

## DEFINIÇÃO DO NÚMERO DE MOLS da reação

O número de mol de todos os componentes da reação pode ser obtido através de um sistema composto pelo balanço de C, H, O e N:

Simplificando, temos o seguinte sistema:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |
|  | -1 | -2 | 0 |  |
|  | -2 | 0 | 0 |  |
|  | 0 | -1 | 0 |  |
|  | 0 | 0 | -2 |  |

Para a reação estequiométrica será considerado sempre .

Esse sistema deve ser resolvido pelo método de Eliminação de Gauss, que ao final nos trará os resultados desejados de ,,  e . O resultado é obtido zerando os valores acima e abaixo da diagonal, com a diagonal tendo todos os seus valores iguais a 1, e os resultados serão exibidos na última coluna da matriz:

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  | -1 | -2 | 0 |  |  | 1 | 0 | 0 | 0 |  |
|  | -2 | 0 | 0 |  |  | 0 | 1 | 0 | 0 |  |
|  | 0 | -1 | 0 |  |  | 0 | 0 | 1 | 0 |  |
|  | 0 | 0 | -2 |  |  | 0 | 0 | 0 | 1 |  |

O processo para zerar os valores ocorre da seguinte forma:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Col0 | Col1 | Col2 | Col3 | Col4 |
| Linha 0 |  | -1 | -2 | 0 |  |
| Linha 1 |  | -2 | 0 | 0 |  |
| Linha 2 |  | 0 | -1 | 0 |  |
| Linha 3 |  | 0 | 0 | -2 |  |

* As células em azul correspondem a diagonal principal
* Cada célula em azul servirá como pivô e será utilizado no cálculo para zerar os valores das células que estão na mesma coluna, o solução é obtida através das equações:
  + Definição do pivô:
  + Define o múltiplicador da linha y abaixo ou acima do pivô:
  + Execute o cálculo em cada coluna x da linha y em questão:

## TEMPERATURA ADIABÁTICA DE CHAMA

A temperatura adiabática de chama obtida com um processo de combustão em regime permanente é determinada pela seguinte equação:

Segundo Gordon; McBride e Reno (1993), a entalpia pode ser descrita pela equação:

E também por:

Onde:

* e é o número de mols em [mol]
* é a temperatura em [K]
* é a constante universal dos gases 8,314510 J/(mol-K)
* Os coeficientes a e b são obtidos das tabelas contidas em Gordon; McBride e Reno (1993)

Para obter a temperatura adiabática de chama deverá ser efetuadas iterações variando a temperatura até que a igualdade seja atingida.

# razão de mistura e razão de equivalência

A Razão de Mistura é obtida pela razão da massa de oxidante pela massa de combustível:

Já a massa é obtido entre a multiplicação do número de mols e a massa molar:

Sendo:

* a massa em [kg]
* é o número de mols em [kmol]
* é a massa molar em [kg/kmol]

Além da razão de mistura é muito utilizado a Razão de Equivalência, sendo definida como a razão entre a Razão de Mistura Estequiométrica pela Razão de Mistura Real:

A Razão de Equivalência auxilia para determinar se uma reação é rica ou pobre em combustível,:

* mistura rica em combustível
* mistura pobre em combustível
* mistura estequiométrica

# REAÇÃO COM DISSOCIAÇÃO

## COMPOSIÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO

Os produtos da Reação Estequiométrica são definidos com base na quantidade de mols de cada elemento nos propelentes:

## NÚMERO DE MOLS DOS REAGENTES E PRODUTOS

O número de mols de oxidante é igual ao número de mols de oxidante da reação estequiométrica:

O número de mols de combustível é obtido por meio da Razão de Equivalência:

O número total de mols dos produtos é dado por:

O balanço do númer de mols de C, H, O e N em frações molares é dado por:



## REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO

Em uma reação de combustão não estequiométrica deve ser considerado a dissociação dos componentes principais em outros elementos. Para determinar se uma reação irá ocorrer ou não em determinada temperatura, deve ser utilizado a constante de equilíbrio que é obtido através de uma dada reação.

Considerando uma reação entre dois reagentes A e B, obtendo dois produtos C e D, obtemos a seguinte reação:

E a equação de Kp desta reação é descrita como:

Sendo:

Onde:

* A, B, C, e D são os componentes químicos da reação
* Y são os coeficientes estequiométricos
* é a pressão em [Pa]
* a razão entre a pressão e

A constante de equilíbrio também pode ser escrita com base na variação da função de Gibbs:

Sendo que é a variação da função de Gibbs, definida como:

* e são os produtos e reagentes da reação com dissociação
* é a função de Gibbs de determinado componente a pressão de uma atmosfera e temperatura T:

A entropia é definida por Gordon, McBride e Zehe (2002) como:

Segundo Boles e Çengel (2006):

* Quando a reação tende a conclusão
* Quando a reação não irá ocorrer

## REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO CONSIDERADAS

No Rocketgine são consideradas as seguintes reações de dissociação:



Isolando da equação 23:

Substituindo a equação 8 na 19, e isolando obtemos:

Isolando da equação 22:

Isolando da equação 21:

Isolando da equação 20:

Substituindo a equação 28 e 29 na 10 obtemos:

Isolando da equação 24:

Substituindo a equação 31 na 11, obtemos

## RESOLUÇÃO DA REAÇÃO DE DISSOCIAÇÃO

* Dados de entrada: e
* Calcular Reação Estequiométrica
* Calcular e
* Calcular , ,
* Calcular todas as constantes de dissociação utilizando a equação 15
* Toda a resoluação será considerada em frações molares
* Estipular valor de
* **Estipular valor de**
* Calcular pela equação 25
* Calcular pela equação 26
* Calcular pela equação 8
* Calcular pela equação 30
* Calcular pela equação 27
* Calcular pela equalção 28
* Calcular pela equação 29
* Calcular pela equação 32
* Calcular pela equação 31
* Calcular a pressão pela equação 14
* Se a pressão não for igual a pressão desejada, retorne para **Estipular valor de**
* Calcular a entalpia dos produtos
* Calcular a entalpia dos reagentes
* Se as entalpias não forem iguais, retorne para **Estipular valor de**