# 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](#_Toc146271893)

[APLICAÇÃO 1](#_Toc146271894)

[1. REAÇÃO ESTEQUIOMÉTRICA 3](#_Toc146271895)

[1.1. COMPOSIÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO 3](#_Toc146271896)

[1.2. DEFINIÇÃO DO NÚMERO DE MOLS da reação 3](#_Toc146271897)

[1.3. TEMPERATURA ADIABÁTICA DE CHAMA 5](#_Toc146271898)

[2. razão de mistura e razão de equivalência 6](#_Toc146271899)

[3. REAÇÃO COM DISSOCIAÇÃO 7](#_Toc146271900)

[3.1. COMPOSIÇÃO DOS PRODUTOS DA REAÇÃO 7](#_Toc146271901)

[3.2. NÚMERO DE MOLS DOS REAGENTES E PRODUTOS 7](#_Toc146271902)

[3.3. REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO 8](#_Toc146271903)

[3.4. FRAÇÕES MOLARES DOS REAGENTES E PRODUTOS 9](#_Toc146271904)

[3.5. REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO 10](#_Toc146271905)

[3.6. RESOLUÇÃO DA REAÇÃO DE DISSOCIAÇÃO 11](#_Toc146271906)

[3.7. ITERAÇÕES 12](#_Toc146271907)

# 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 reagentes é dado pela soma dos mesmos:

O número total de mols dos produtos é dado por:

O balanço do númer de mols de C, H, O e N 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 total em [atm]
* é a pressão parcial

A pressão parcial de um elemento pode ser expresso em função da fração molar , dada pela equação:

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

## FRAÇÕES MOLARES DOS REAGENTES E PRODUTOS

O número de mols dos reagentes e produtos, pode ser reescrito em termos de suas frações molares:

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

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



## REAÇÕES DE DISSOCIAÇÃO

No Rocketgine são consideradas as seguintes reações de dissociação:



Com isso, é possível obter as frações molares de todos os elementos conforme demonstrado a seguir.

Substituindo a equação 15 na 34 e isolando :

Substituindo a equação 15 e 26 na 30, e isolando obtemos:

Substituindo a equação 15 na 33 e isolando :

Substituindo a equaçlão 15 na 32 e isolando :

Substituindo a equação 15 na 31 e isolando :

Substituindo a equação 40 e 39 na 28 obtemos:

Substituindo a equação 15 na 35 e isolando :

Substituindo a equação 42 na 29, obtemos

Calculo da Pressão:

## RESOLUÇÃO DA REAÇÃO DE DISSOCIAÇÃO

A seguir são apresentados todos os passos para a resolução do problema da Dissociação e obtenção da Temperatura adiabática de chama, a forma com que as iterações são realizadas, é apresentado na próxima seção.

* Dados de entrada: e
* Calcular Reação Estequiométrica
* Calcular e
* Calcular , ,
* Calcular e
* Calcular , , e
* **Estipular valor inicial da**
* Calcular todas as constantes de dissociação utilizando a equação 16
* **Estipular valor inicial de**
* Calcular pela equação 36
* Calcular pela equação 37
* Calcular pela equação 26
* Calcular pela equação 41
* Calcular pela equação 38
* Calcular pela equalção 39
* Calcular pela equação 40
* Calcular pela equação 43
* Calcular pela equação 42
* Calcular pela equação 44
* Se , **estipular novo valor de** conforme seção 3.7
* Calcular a entalpia dos produtos conforme seção 1.3
* Calcular a entalpia dos reagentes conforme seção 1.3
* Se as entalpias não forem iguais, retorne para **estipular novo valor para a**

## ITERAÇÕES

Tanto para efetuar o cálculo da Temperatura Adiabática de Chama, como para obter todas as frações molares, são necessárias várias iterações, para isso será utilizado o método da bisseção.

Para isso deve ser considerado como partida um ponto máximo, mínimo, e o valor inicial da iteração:

Para determinar até que momento as iterações deverão ser realizadas, deverá ser calculado o erro:

De acordo com o erro, os valores de deverão ser atualizados:

|  |
| --- |
|  |

Para a situação da Temperatura adiabática de chama, é considerado:

As iterações são finalizadas e a Temperatura Adiabática de Chama é obtida quando:

Já para o caso das iterações de temos:

As iterações são finalizadas quando: