

Reações químicas e combustão

Parte1

Introdução

- Reações químicas:
 - Relacionam componentes antes e depois da reação
 - Diversas aplicações termodinâmicas
 - Aplicação de princípios termod. => considerar mudanças composição
- Combustão:
 - Reação química combustível + oxigênio (ou ar)
 - Rápida liberação de energia
 - Comum em diversas aplicações
 - Motores ICE, ICO, turbinas a gás, etc.

Estequiometria

- Reação química
 - Moléculas são “quebradas” e átomos e elétrons reagem
- Equação da reação química
 - Relaciona componentes antes e depois do processo
 - Reagentes -> produtos
 - No. de átomos de cada elemento deve se conservar
 - Massa total deve se conservar
 - No. de moles das moléculas não se conserva
- Ex.: $C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$

Estequiometria

- $m_{reag} = m_{prod} = \sum_{i=1}^j coef_i M_i$
 - $coef_i$ = coef. Eq. Reação da molécula i
 - M_i = peso molecular da molécula (tabelado)
- Coeficiente estequiométrico $coef_i$
 - Coef. que precede cada molécula na eq. esteq.
 - Deve balancear corretamente o no. de átomos de cada elemento

Eq. Esteq. para a combustão

- Rápida oxidação dos elementos dos combustíveis
 - Combustível reage com oxigênio puro ou comburente
 - Comburente: substância contendo oxigênio
 - Combustível: Hidrogênio, Oxigênio e Enxofre são os elementos mais comuns
 - Ex: C_8H_{18} , CH_4 , $C_{12}H_{26}$, C_3H_8 , C_2H_6O , C_4H_{10} (gasolina, metano, diesel, propano, etanol e butano)
 - OBS: enxofre não contribui para lib. energia
 - Forma produtos
 - Libera energia
 - Combustão completa
 - Produtos dão H_2O , CO_2 , SO_2 (se for o caso)
 - Não inclui H_2 , CO , C , ou OH

Eq. Esteq. para a combustão

- Em geral:
 - Combustão não ocorre com oxigênio puro
 - Ar é comburente
 - Para este curso: ar = 21% O_2 e 79% N_2
 - $\frac{n_{N_2}}{n_{O_2}} = \frac{79}{21} = 3,76$
 - $M_{ar} = \frac{M_{O_2} + 3,76M_{N_2}}{4,76} = 28,97 \frac{kg}{kmol}$
 - EX.: $C_3H_8 + 5(O_2 + 3,76N_2) \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 18,8N_2$
 - OBS: na eq. acima são utilizados 23,8 moles de ar

Eq. Esteq. para a combustão

- Ar teórico ou estequiométrico:
 - Quantidade mínima para combustão completa
- Na prática, se fornece mais ar que o teórico
 - Para ter combustão completa
 - Devido à inércia química
 - Moléculas do combust. têm que se quebrar
 - Nitrogênio do ar atrapalha

- AC (razão ar-combustível)

$$AC = \frac{m_{ar}}{m_{comb}}$$

- \overline{AC} (razão ar-combustível base molar)

$$\overline{AC} = \frac{n_{ar}}{n_{comb}}$$

Eq. Esteq. para a combustão

- Relação entre \overline{AC} e AC

$$AC = \frac{M_{ar}}{M_{comb}} \overline{AC}$$

- Relação de ar teórico

$$\lambda = \frac{(AC)}{(AC)_{est}}$$

- balanço de massa na combustão (estequiometria)

Outras simbologias comumente utilizadas

$$\frac{F}{A} = \frac{m_{fuel}}{m_{ar}}$$

$$\frac{A}{F} = \frac{m_{ar}}{m_{fuel}}$$

$$\alpha = \frac{n_{ar}}{n_{fuel}}$$

$$\phi = \frac{(F/A)}{(F/A)_{est}}$$

$$\lambda = \frac{(A/F)}{(A/F)_{est}}$$

est = estequiométrico

Misturas pobres em combustível e ricas em ar

$$\phi < 1 \quad \lambda > 1$$

misturas estequiométricas

$$\phi = 1 \quad \lambda = 1$$

misturas ricas em combustível e pobres em ar

$$\phi > 1 \quad \lambda < 1$$

Equação básica de balanço estequiométrico
para uma reação de combustão, com um único combustível:



*Resolvendo a equação de balanço, para cada espécie química,
para combustão com excesso de ar, resulta:*

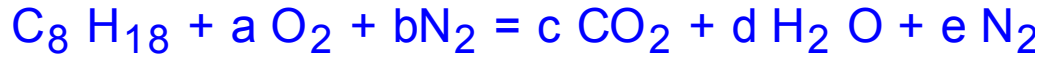
Produtos	$\lambda \geq 1$ $\phi \leq 1$
$\mathbf{CO_2}$	$a = x$
$\mathbf{H_2O}$	$b = y/2$
$\mathbf{O_2}$	$c = -x - y/4 + z/2 + 0,21\alpha$
$\mathbf{N_2}$	$d = w/2 + 0,79\alpha$

$$\frac{\mathbf{A}}{\mathbf{F}} = \frac{m_{\text{ar}}}{m_{\text{comb}}}$$

$$\alpha = \frac{n_{\text{ar}}}{n_{\text{comb}}} = \frac{\mathbf{A}}{\mathbf{F}} \frac{M_{\text{comb}}}{M_{\text{ar}}}$$

Estequiometria :exemplos

Combustão de Octano



$$\text{C} \quad 8 = c$$

$$\text{O}_2 \quad a = c + \frac{d}{2}$$

$$\text{N}_2 \quad b = e$$

$$\text{ar} \quad b = 3,76 \cdot a$$

$$\text{H}_2 \quad \frac{18}{2} = d$$

Relação ar - combustível

$$\text{AC}_{\text{moles}} = \frac{a + b}{1}$$

$$\text{M}_{\text{ar}} = \text{MolarMass}(\text{Air})$$

$$\text{AC}_{\text{massa}} = \text{AC}_{\text{moles}} \cdot \frac{\text{M}_{\text{ar}}}{\text{M}_{\text{octano}}}$$

Solução:

$$a=12,5$$

$$b=47$$

$$c=8$$

$$d=9$$

$$e=47$$

$$\text{M}_{\text{ar}}=28,97$$

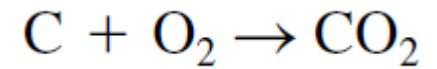
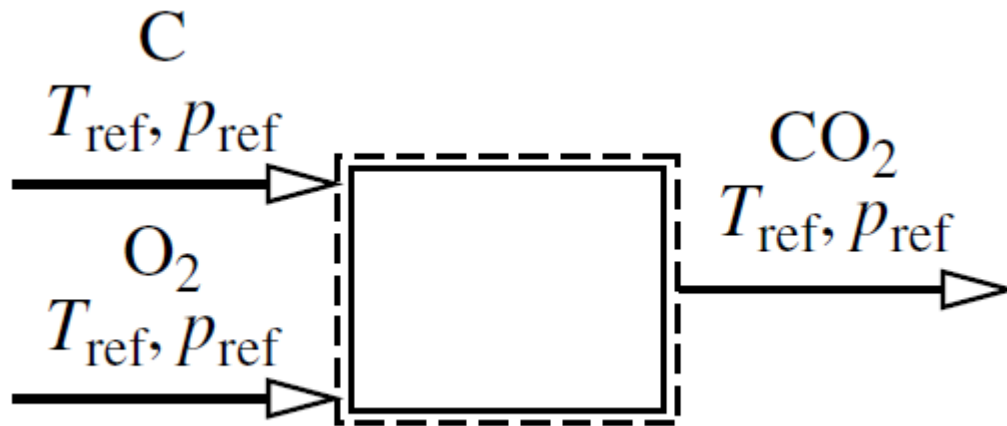
$$\text{M}_{\text{octano}}=114$$

$$\text{AC}_{\text{massa}}=15,12$$

$$\text{AC}_{\text{moles}}=59,5$$

Entalpia de formação

- Combustão
 - Variação compos. Química
 - VC => mistura sai diferente mistura entra
 - SF => mistura início diferente mistura fim
- É necessário padrão de referência
 - $T_{\text{ref}} = 25^{\circ}\text{C}$ e $P_{\text{ref}} = 1\text{atm}$
 - Neste estado, $h=0$ para moléculas estáveis
- Entalpia de formação:
 - Energia liberada ou absorvida quando uma molécula é formada no estado de ref. padrão



$$0 = \dot{Q}_{\text{cv}} + \dot{m}_{\text{C}}h_{\text{C}} + \dot{m}_{\text{O}_2}h_{\text{O}_2} - \dot{m}_{\text{CO}_2}h_{\text{CO}_2}$$

$$0 = \dot{Q}_{\text{cv}} + \dot{n}_{\text{C}}\bar{h}_{\text{C}} + \dot{n}_{\text{O}_2}\bar{h}_{\text{O}_2} - \dot{n}_{\text{CO}_2}\bar{h}_{\text{CO}_2}$$

$$\bar{h}_{\text{CO}_2} = \frac{\dot{Q}_{\text{cv}}}{\dot{n}_{\text{CO}_2}} + \frac{\dot{n}_{\text{C}}}{\dot{n}_{\text{CO}_2}}\bar{h}_{\text{C}} + \frac{\dot{n}_{\text{O}_2}}{\dot{n}_{\text{CO}_2}}\bar{h}_{\text{O}_2} = \frac{\dot{Q}_{\text{cv}}}{\dot{n}_{\text{CO}_2}} + \bar{h}_{\text{C}} + \bar{h}_{\text{O}_2}$$

Onde nas cond. de ref. entalpias molares de moléculas de um único elemento são nulas (padrão)

$$\bar{h}_{\text{CO}_2} = \frac{\dot{Q}_{\text{cv}}}{\dot{n}_{\text{CO}_2}} = \bar{h}_{\text{f}}^{\circ} = -393,52\text{kJ/kmol}$$

Entalpia a T e P QQ.

$$\bar{h}(T, p) = \bar{h}_f^\circ + [\bar{h}(T, p) - \bar{h}(T_{\text{ref}}, p_{\text{ref}})] = \bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}$$

- Ou seja: formação a T_{ref} e P_{ref} + desvio do estado de ref. Padrão
 - \bar{h}_f° é tabelado
 - Na tabela para $\Delta\bar{h}$, T_{ref} pode ser diferente daquela em \bar{h}_f° pois se trata de uma **diferença**
 - A **maioria** das tabelas apresenta \bar{h}_f° a 25°C, mas \bar{h} é tabelado com referência a 0K
 - Se em uma tabela \bar{h}_f° e \bar{h} tiverem a mesma T_{ref} , então basta utilizar \bar{h} diretamente.
- $\Delta\bar{h}$ pode ser avaliado de tabelas de vapor, tabelas de gases ideais ou $\bar{C}_p\Delta T$ (no caso de gases ideais)

T	Carbon Dioxide, CO ₂ ($\bar{h}_f^\circ = -393,520$ kJ/kmol)			Carbon Monoxide, CO ($\bar{h}_f^\circ = -110,530$ kJ/kmol)			Water Vapor, H ₂ O ($\bar{h}_f^\circ = -241,820$ kJ/kmol)		
	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
220	6,601	4,772	202.966	6,391	4,562	188.683	7,295	5,466	178.576
230	6,938	5,026	204.464	6,683	4,771	189.980	7,628	5,715	180.054
240	7,280	5,285	205.920	6,975	4,979	191.221	7,961	5,965	181.471
250	7,627	5,548	207.337	7,266	5,188	192.411	8,294	6,215	182.831
260	7,979	5,817	208.717	7,558	5,396	193.554	8,627	6,466	184.139
270	8,335	6,091	210.062	7,849	5,604	194.654	8,961	6,716	185.399
280	8,697	6,369	211.376	8,140	5,812	195.173	9,296	6,968	186.616
290	9,063	6,651	212.660	8,432	6,020	196.735	9,631	7,219	187.791
298	9,364	6,885	213.685	8,669	6,190	197.543	9,904	7,425	188.720
300	9,431	6,939	213.915	8,723	6,229	197.723	9,966	7,472	188.928
310	9,807	7,230	215.146	9,014	6,437	198.678	10,302	7,725	190.030
320	10,186	7,526	216.351	9,306	6,645	199.603	10,639	7,978	191.098
330	10,570	7,826	217.534	9,597	6,854	200.500	10,976	8,232	192.136
340	10,959	8,131	218.694	9,889	7,062	201.371	11,314	8,487	193.144
350	11,351	8,439	219.831	10,181	7,271	202.217	11,652	8,742	194.125
360	11,748	8,752	220.948	10,473	7,480	203.040	11,992	8,998	195.081
370	12,148	9,068	222.044	10,765	7,689	203.842	12,331	9,255	196.012
380	12,552	9,392	223.122	11,058	7,899	204.622	12,672	9,513	196.920
390	12,960	9,718	224.182	11,351	8,108	205.383	13,014	9,771	197.807
400	13,372	10,046	225.225	11,644	8,319	206.125	13,356	10,030	198.673

1ª lei para sistemas reagentes

- Sistemas Abertos (VC)
- Considere um VC onde:
 - R.P
 - P.U.F.
 - $\Delta KE = \Delta PE = 0$
 - Há combustão

$$\frac{\dot{Q}_{cv}}{\dot{n}_F} - \frac{\dot{W}_{cv}}{\dot{n}_F} = \sum_P n_e (\bar{h}_f^\circ + \Delta \bar{h})_e - \sum_R n_i (\bar{h}_f^\circ + \Delta \bar{h})_i$$

Vazão molar do
combustível

Coeficientes
estequiométricos

1ª lei para sistemas reagentes

- Sistemas Fechados (SF)

$$\sum_{\text{P}} n\bar{u} - \sum_{\text{R}} n\bar{u} = Q - W$$

Número de moles

E, para gases ideais:

$$Q - W = \sum_{\text{P}} n(\bar{h} - \bar{R}T_{\text{P}}) - \sum_{\text{R}} n(\bar{h} - \bar{R}T_{\text{R}})$$

$$\begin{aligned} Q - W &= \sum_{\text{P}} n(\bar{h}_{\text{f}}^{\circ} + \Delta\bar{h} - \bar{R}T_{\text{P}}) - \sum_{\text{R}} n(\bar{h}_{\text{f}}^{\circ} + \Delta\bar{h} - \bar{R}T_{\text{R}}) \\ &= \sum_{\text{P}} n(\bar{h}_{\text{f}}^{\circ} + \Delta\bar{h}) - \sum_{\text{R}} n(\bar{h}_{\text{f}}^{\circ} + \Delta\bar{h}) - \bar{R}T_{\text{P}} \sum_{\text{P}} n + \bar{R}T_{\text{R}} \sum_{\text{R}} n \end{aligned}$$

Entalpia de combustão

- A entalpia de formação é um conceito muito importante, porém nem sempre útil para combustíveis
 - Tabelas disponíveis para subst. químicas individuais
 - Combustíveis são compostos de diversas substâncias químicas
- Entalpia combustão: é a variação de entalpia quando um componente sofre combustão completa a T e P constantes

$$\bar{h}_{\text{RP}} = \sum_{\text{P}} n_e \bar{h}_e - \sum_{\text{R}} n_i \bar{h}_i$$

- h_{rp} pode ser determinada:
 - Pela eq. Acima
 - Por calorímetros ($= \dot{Q} / \dot{n}$)

Poder Calorífico

- PCS = entalpia de combustão se produtos contêm água na fase líquida
- PCI = entalpia de combustão se produtos contêm água na fase gasosa
- $PCS - PCI = h_{lg}$ = energia necessária para vaporizar a água nas condições padrão
- Valores de PCI e PCS são tabelados para combustíveis

Substance	Formula	Molar Mass, M (kg/kmol)	Enthalpy of Formation, \bar{h}_f° (kJ/kmol)	Heating Values	
				Higher, HHV (kJ/kg)	Lower, LHV (kJ/kg)
Ethylene	$C_2H_2(g)$	28.05	52,280	50,300	47,160
Ethane	$C_2H_6(g)$	30.07	-84,680	51,870	47,480
Propylene	$C_3H_6(g)$	42.08	20,410	48,920	45,780
Propane	$C_3H_8(g)$	44.09	-103,850	50,350	46,360
Butane	$C_4H_{10}(g)$	58.12	-126,150	49,500	45,720
Pentane	$C_5H_{12}(g)$	72.15	-146,440	49,010	45,350
Octane	$C_8H_{18}(g)$	114.22	-208,450	48,260	44,790
Octane	$C_8H_{18}(l)$	114.22	-249,910	47,900	44,430
Benzene	$C_6H_6(g)$	78.11	82,930	42,270	40,580
Methyl alcohol	$CH_3OH(g)$	32.04	-200,890	23,850	21,110
Methyl alcohol	$CH_3OH(l)$	32.04	-238,810	22,670	19,920
Ethyl alcohol	$C_2H_5OH(g)$	46.07	-235,310	30,590	27,720
Ethyl alcohol	$C_2H_5OH(l)$	46.07	-277,690	29,670	26,800

Temperatura adiabática da chama

- T_{ad} : Máxima temperatura
 - Processo de comb. Adiabático com $W=0$ e $\Delta KE=\Delta PE=0$
 - Maior energia liberada
 - Máx T_{ad} ocorre com AC estequiométrico
 - QQ. Efeito que ocorra diminuirá T produtos
 - T_{ad} é obtida da primeira lei:

$$\sum_P n_e \bar{h}_e = \sum_R n_i \bar{h}_i \longrightarrow \sum_P n_e (\bar{h}_f^\circ + \Delta \bar{h})_e = \sum_R n_i (\bar{h}_f^\circ + \Delta \bar{h})_i$$

$$\sum_P n_e (\Delta \bar{h})_e = \sum_R n_i (\Delta \bar{h})_i + \sum_R n_i \bar{h}_{fi}^\circ - \sum_P n_e \bar{h}_{fe}^\circ$$

Variação de entropia em sistemas reagentes

- Reação química => implicações na 2ª Lei
- Uma referência comum deve ser utilizada
 - Entropia absoluta: relativa a uma referência
 - Tabelas fornecem valor de \bar{s} a $T_{\text{ref}} = 298,15\text{K}$ e $P_{\text{ref}} = 1\text{atm}$
 - Tabelas dão valor de $\bar{s}(T, P_{\text{ref}}) = \bar{s}^{\circ}(T)$
 - OBS: se $P \neq P_{\text{ref}}$

$$\bar{s}(T, p) = \bar{s}(T, p_{\text{ref}}) + [\bar{s}(T, p) - \bar{s}(T, p_{\text{ref}})]$$

- E, se for gás ideal

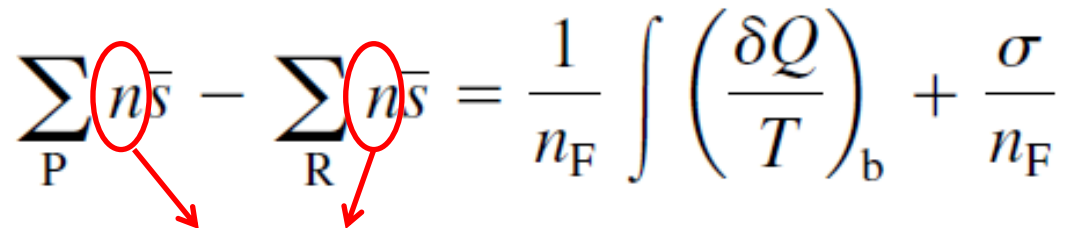
$$\bar{s}(T, p) = \bar{s}^{\circ}(T) - \bar{R} \ln \frac{p}{p_{\text{ref}}}$$

2ª Lei para sistemas reagentes

- Para VC

$$\sum \left(coef_i \bar{s}(T, P) \right)_P - \sum \left(coef_i \bar{s}(T, P) \right)_R = \sum_{C.S.} \frac{\dot{Q}}{\dot{n}_c T} + \frac{\dot{S}_{gen}}{\dot{n}_c}$$

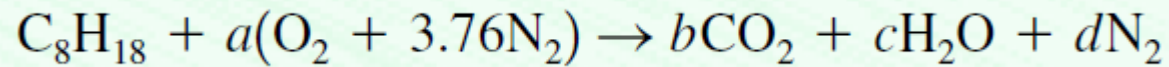
- Para SF

$$\sum_P n \bar{s} - \sum_R n \bar{s} = \frac{1}{n_F} \int \left(\frac{\delta Q}{T} \right)_b + \frac{\sigma}{n_F}$$


Coeficiente estequiométrico

Determine the air–fuel ratio on both a molar and mass basis for the complete combustion of octane, C_8H_{18} , with (a) the theoretical amount of air, (b) 150% theoretical air (50% excess air).

(a)



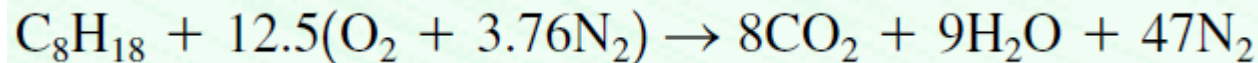
$$C: \quad b = 8$$

$$H: \quad 2c = 18$$

$$O: \quad 2b + c = 2a$$

$$N: \quad d = 3.76a$$

$$\Rightarrow a = 12.5, b = 8, c = 9, d = 47$$

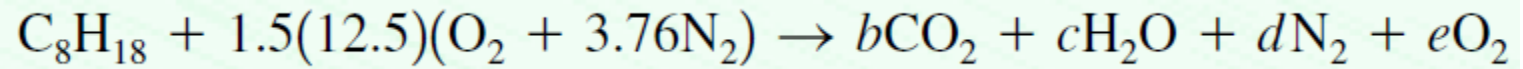


logo

$$\overline{AF} = \frac{12.5 + 12.5(3.76)}{1} = \frac{12.5(4.76)}{1} = 59.5 \frac{\text{kmol (air)}}{\text{kmol (fuel)}}$$

$$AF = \left[59.5 \frac{\text{kmol (air)}}{\text{kmol (fuel)}} \right] \left[\frac{28.97 \frac{\text{kg (air)}}{\text{kmol (air)}}}{114.22 \frac{\text{kg (fuel)}}{\text{kmol (fuel)}}} \right] = 15.1 \frac{\text{kg (air)}}{\text{kg (fuel)}}$$

(b)



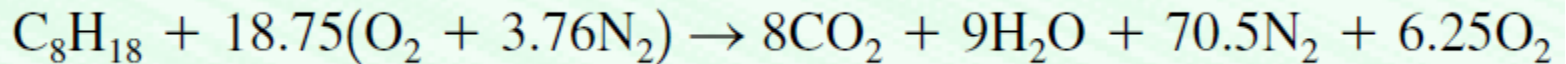
$$\text{C:} \quad b = 8$$

$$\text{H:} \quad 2c = 18$$

$$\text{O:} \quad 2b + c + 2e = (1.5)(12.5)(2)$$

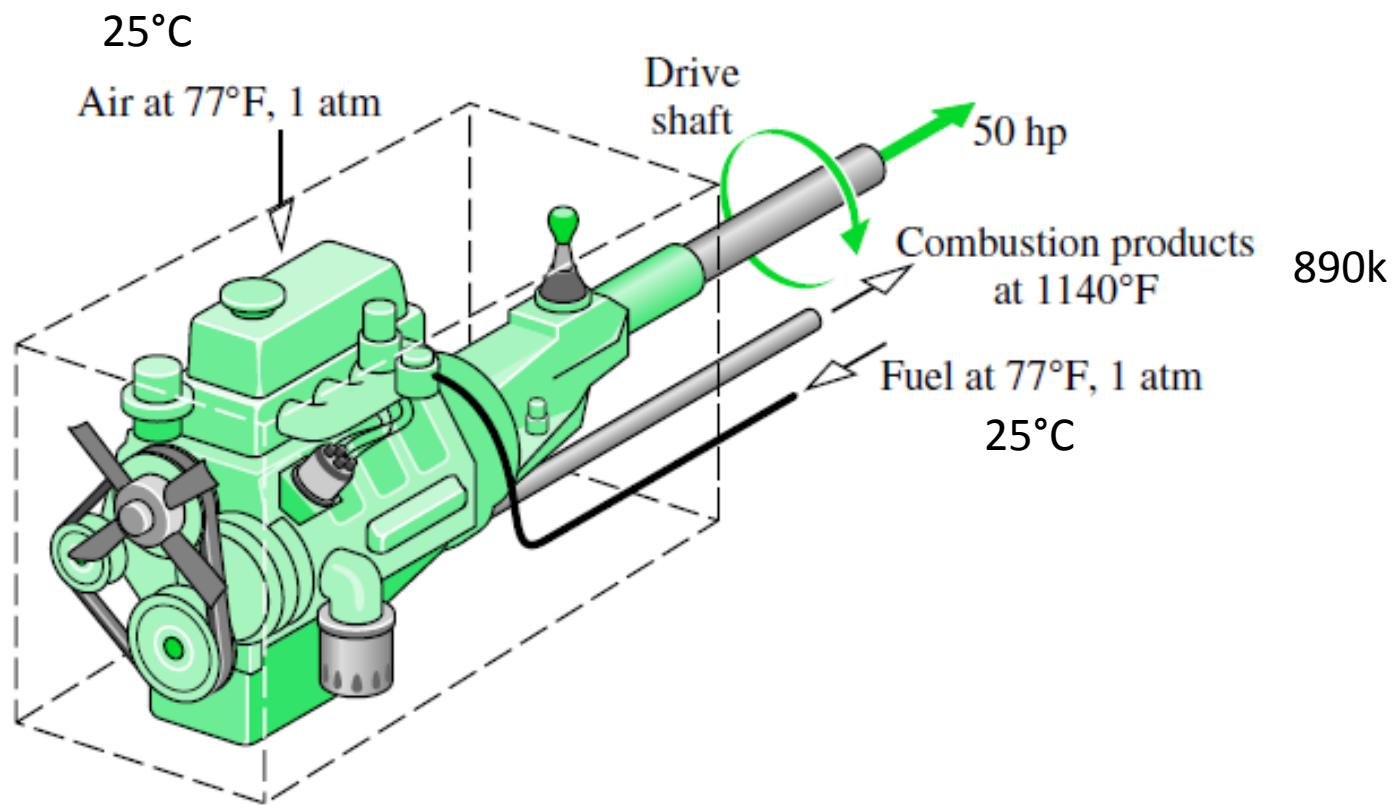
$$\text{N:} \quad d = (1.5)(12.5)(3.76)$$

$$\Rightarrow b = 8, c = 9, d = 70.5, e = 6.25$$



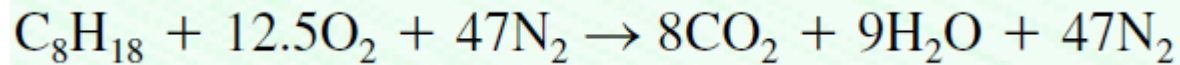
$$\overline{AF} = \frac{18.75(4.76)}{1} = 89.25 \frac{\text{kmol (air)}}{\text{kmol (fuel)}}$$

Liquid octane enters an internal combustion engine operating at steady state with a mass flow rate of 1.8×10^{-3} kg/s and is mixed with the theoretical amount of air. The fuel and air enter the engine at 25°C and 1 atm. The mixture burns completely and combustion products leave the engine at 890 K. The engine develops a power output of 37 kW. Determine the rate of heat transfer from the engine, in kW, neglecting kinetic and potential energy effects.



Queima estequiométrica

Para reação estequiométrica, a equação fica



A 1ª lei para nosso VC é

$$\frac{\dot{Q}_{cv}}{\dot{n}_F} = \frac{\dot{W}_{cv}}{\dot{n}_F} + \bar{h}_P - \bar{h}_R$$

E, observando que as entalpias de formação do O₂ e do N₂ são nulas, assim como os Δh dos reagentes (pois estão à 25°C):

$$\begin{aligned} \frac{\dot{Q}_{cv}}{\dot{n}_F} = & \frac{\dot{W}_{cv}}{\dot{n}_F} + \{8[\bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}]_{\text{CO}_2} + 9[\bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}]_{\text{H}_2\text{O(g)}} + 47[\bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}]_{\text{N}_2}\} \\ & - \{[\bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}]_{\text{C}_8\text{H}_{18(l)}} + 12.5[\bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}]_{\text{O}_2} + 47[\bar{h}_f^\circ + \Delta\bar{h}]_{\text{N}_2}\} \end{aligned}$$

T	Carbon Dioxide, CO ₂ ($\bar{h}_f^\circ = -393,520$ kJ/kmol)			Carbon Monoxide, CO ($\bar{h}_f^\circ = -110,530$ kJ/kmol)			Water Vapor, H ₂ O ($\bar{h}_f^\circ = -241,820$ kJ/kmol)		
	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
220	6,601	4,772	202.966	6,391	4,562	188.683	7,295	5,466	178.576
230	6,938	5,026	204.464	6,683	4,771	189.980	7,628	5,715	180.054
240	7,280	5,285	205.920	6,975	4,979	191.221	7,961	5,965	181.471
250	7,627	5,548	207.337	7,266	5,188	192.411	8,294	6,215	182.831
260	7,979	5,817	208.717	7,558	5,396	193.554	8,627	6,466	184.139
270	8,335	6,091	210.062	7,849	5,604	194.654	8,961	6,716	185.399
280	8,697	6,369	211.376	8,140	5,812	195.173	9,296	6,968	186.616
290	9,063	6,651	212.660	8,432	6,020	196.735	9,631	7,219	187.791
298	9,364	6,885	213.685	8,669	6,190	197.543	9,904	7,425	188.720
300	9,431	6,939	213.915	8,723	6,229	197.723	9,966	7,472	188.928
310	9,807	7,230	215.146	9,014	6,437	198.678	10,302	7,725	190.030
320	10,186	7,526	216.351	9,306	6,645	199.603	10,639	7,978	191.098
330	10,570	7,826	217.534	9,597	6,854	200.500	10,976	8,232	192.136
340	10,959	8,131	218.694	9,889	7,062	201.371	11,314	8,487	193.144
350	11,351	8,439	219.831	10,181	7,271	202.217	11,652	8,742	194.125
360	11,748	8,752	220.948	10,473	7,480	203.040	11,992	8,998	195.081
370	12,148	9,068	222.044	10,765	7,689	203.842	12,331	9,255	196.012
380	12,552	9,392	223.122	11,058	7,899	204.622	12,672	9,513	196.920
390	12,960	9,718	224.182	11,351	8,108	205.383	13,014	9,771	197.807
400	13,372	10,046	225.225	11,644	8,319	206.125	13,356	10,030	198.673

T	Carbon Dioxide, CO ₂ ($\bar{h}_f^\circ = -393,520$ kJ/kmol)			Carbon Monoxide, CO ($\bar{h}_f^\circ = -110,530$ kJ/kmol)			Water Vapor, H ₂ O ($\bar{h}_f^\circ = -241,820$ kJ/kmol)		
	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°	\bar{h}	\bar{u}	\bar{s}°
800	32,179	25,527	257.408	23,844	17,193	227.162	27,896	21,245	223.693
810	32,694	25,959	258.048	24,164	17,429	227.559	28,284	21,549	224.174
820	33,212	26,394	258.682	24,483	17,665	227.952	28,672	21,855	224.651
830	33,730	26,829	259.311	24,803	17,902	228.339	29,062	22,162	225.123
840	34,251	27,267	259.934	25,124	18,140	228.724	29,454	22,470	225.592
850	34,773	27,706	260.551	25,446	18,379	229.106	29,846	22,779	226.057
860	35,296	28,125	261.164	25,768	18,617	229.482	30,240	23,090	226.517
870	35,821	28,588	261.770	26,091	18,858	229.856	30,635	23,402	226.973
880	36,347	29,031	262.371	26,415	19,099	230.227	31,032	23,715	227.426
890	36,876	29,476	262.968	26,740	19,341	230.593	31,429	24,029	227.875
900	37,405	29,922	263.559	27,066	19,583	230.957	31,828	24,345	228.321
910	37,935	30,369	264.146	27,392	19,826	231.317	32,228	24,662	228.763
920	38,467	30,818	264.728	27,719	20,070	231.674	32,629	24,980	229.202
930	39,000	31,268	265.304	28,046	20,314	232.028	33,032	25,300	229.637
940	39,535	31,719	265.877	28,375	20,559	232.379	33,436	25,621	230.070

Das tabela A25, pegamos a entalpia de formação do C_8H_{18} (líq), e da tabela A23 as demais entalpias de formação e Δh 's

$$\begin{aligned}\bar{h}_P &= 8[-393,520 + (36,876 - 9364)] + 9[-241,820 + (31,429 - 9,904)] \\ &\quad + 47[26,568 - 8,669] \\ &= -4,069,466 \text{ kJ/kmol}\end{aligned}$$

$$\bar{h}_R = (\bar{h}_f^\circ)_{C_8H_{18}(l)} = -249,910 \text{ kJ/kmol (fuel)}$$

$$\dot{n}_F = \frac{\dot{m}_F}{M_F} \quad \dot{n}_F = \frac{1.8 \times 10^{-3} \text{ kg (fuel)/s}}{114.22 \text{ lb(fuel)/kmol(fuel)}} = 1.58 \times 10^{-5} \text{ kmol(fuel)/s}$$

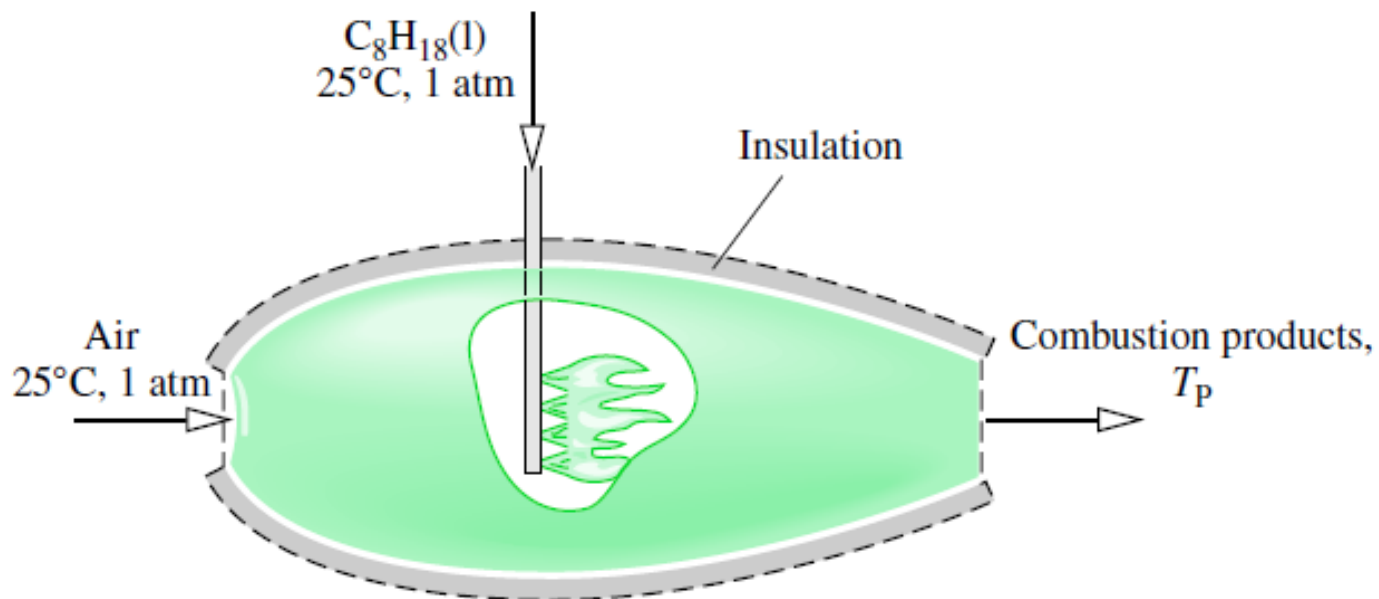
Finalmente:

$$\dot{Q}_{cv} = \dot{W}_{cv} + \dot{n}_F(\bar{h}_P - \bar{h}_R) = -23.3 \text{ kW}$$

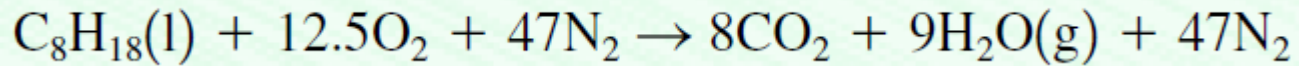
37kW



Liquid octane at 25°C , 1 atm enters a well-insulated reactor and reacts with air entering at the same temperature and pressure. For steady-state operation and negligible effects of kinetic and potential energy, determine the temperature of the combustion products for complete combustion with (a) the theoretical amount of air, (b) 400% theoretical air.



(a) Para reação estequiométrica, a equação fica



E a 1ª lei fornece

$$\sum_{\text{P}} n_e \bar{h}_e = \sum_{\text{R}} n_i \bar{h}_i \quad \Rightarrow \quad \sum_{\text{P}} n_e (\bar{h}_f^\circ + \Delta \bar{h})_e = \sum_{\text{R}} n_i (\bar{h}_f^\circ + \Delta \bar{h})_i$$

Rearranjando:

$$\sum_{\text{P}} n_e (\Delta \bar{h})_e = \sum_{\text{R}} n_i (\Delta \bar{h})_i + \sum_{\text{R}} n_i \bar{h}_{fi}^\circ - \sum_{\text{P}} n_e \bar{h}_{fe}^\circ$$

Onde os Δh 's dos reagentes são nulos pois estão à 25°C

$$\sum_{\text{P}} n_e (\Delta \bar{h})_e = \sum_{\text{R}} n_i \bar{h}_{fi}^\circ - \sum_{\text{P}} n_e \bar{h}_{fe}^\circ$$

Substituindo os coeficientes estequiométricos:

$$\begin{aligned} & 8(\Delta \bar{h})_{\text{CO}_2} + 9(\Delta \bar{h})_{\text{H}_2\text{O(g)}} + 47(\Delta \bar{h})_{\text{N}_2} \\ & = [(\bar{h}_f^\circ)_{\text{C}_8\text{H}_{18(l)}} + 12.5(\bar{h}_f^\circ)_{\text{O}_2} + 47(\bar{h}_f^\circ)_{\text{N}_2}] \\ & \quad - [8(\bar{h}_f^\circ)_{\text{CO}_2} + 9(\bar{h}_f^\circ)_{\text{H}_2\text{O(g)}} + 47(\bar{h}_f^\circ)_{\text{N}_2}] \end{aligned}$$

e, inserindo as entalpias de formação da Tabela A25:

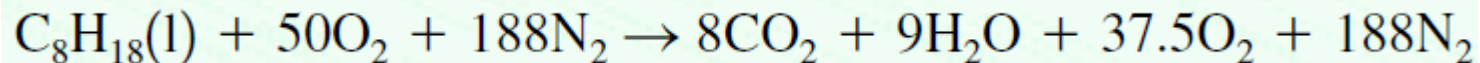
$$8(\Delta \bar{h})_{\text{CO}_2} + 9(\Delta \bar{h})_{\text{H}_2\text{O(g)}} + 47(\Delta \bar{h})_{\text{N}_2} = 5,074,630 \text{ kJ/kmol (fuel)}$$

Esta equação deve ser resolvida iterativamente:

	2500 K	2400 K	2350 K
$8(\Delta\bar{h})_{\text{CO}_2}$	975,408	926,304	901,816
$9(\Delta\bar{h})_{\text{H}_2\text{O(g)}}$	890,676	842,436	818,478
$47(\Delta\bar{h})_{\text{N}_2}$	3,492,664	3,320,597	3,234,869
$\sum_P n_e(\Delta\bar{h})_e$	5,358,748	5,089,337	4,955,163

Interpolando: $T_p = 2395 \text{ K}$

(b) Com 400% de ar teórico, a equação fica:



Procedendo da mesma forma:

$$8(\Delta\bar{h})_{\text{CO}_2} + 9(\Delta\bar{h})_{\text{H}_2\text{O(g)}} + 37.5(\Delta\bar{h})_{\text{O}_2} + 188(\Delta\bar{h})_{\text{N}_2} = 5,074,630 \text{ kJ/kmol (fuel)}$$

E, de forma iterativa: $T_p = 962 \text{ K}$