

Ejemplo de cálculo de flama adiabática

Un aceite combustible tiene una composición de 87.5% C y 12.5% H y produce 44100 kJ cuando un kilogramo del mismo se quema produciendo CO₂ (g) y H₂O (g). ¿Cuál es la temperatura de flama cuando el aceite es quemado con el doble de la cantidad estequiométrica de aire? Considere que 19.7 % del calor producto de la reacción se pierde en los alrededores. De la temperatura en K.

Datos:

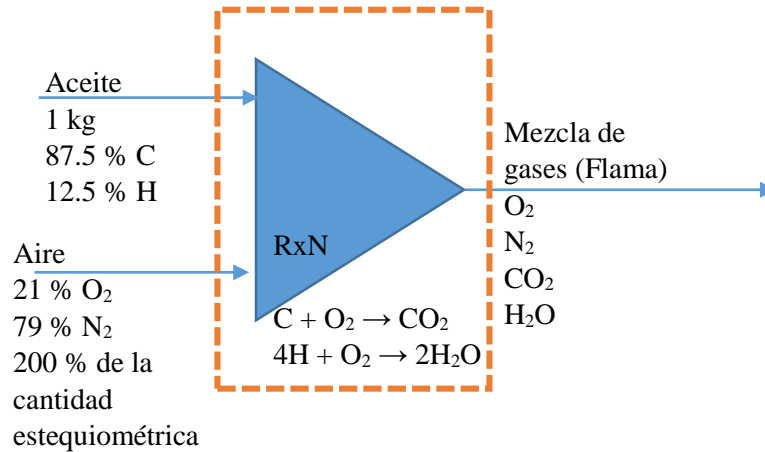
$$C_p(\text{O}_2) = 7.16 + 0.001 T - 40000 T^{-2} \text{ cal/molK}$$

$$C_p(\text{N}_2) = 6.66 + 0.00102 T \text{ cal/molK}$$

$$C_p(\text{CO}_2) = 10.55 + 0.00216 T - 204000 T^{-2} \text{ cal/molK}$$

$$C_p(\text{H}_2\text{O}) = 7.17 + 0.00256 T + 8000 T^{-2} \text{ cal/molK}$$

Balance de materia:



$$875 \text{ g C} \left(\frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} \right) = 72.9167 \text{ mol C}$$

$$125 \text{ g H} \left(\frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ g H}} \right) = 125 \text{ mol H}$$

Cálculo de los términos fuente:

$$-72.9167 \text{ mol C} \left(\frac{1 \text{ mol O}_2}{1 \text{ mol C}} \right) = -72.9167 \text{ mol O}_2$$

$$-125 \text{ mol H} \left(\frac{1 \text{ mol O}_2}{4 \text{ mol H}} \right) = -31.25 \text{ mol O}_2$$

$$72.9167 \text{ mol C} \left(\frac{1 \text{ mol CO}_2}{1 \text{ mol C}} \right) = 72.9167 \text{ mol CO}_2$$

$$125 \text{ mol H} \left(\frac{2 \text{ mol H}_2\text{O}}{4 \text{ mol H}} \right) = 62.5 \text{ mol H}_2\text{O}$$

El total de O₂ requerido es 104.1667 mol, por lo cual podemos calcular la entrada de aire a partir de este dato:

$$104.1667 \text{ mol O}_{2,REQ} \left(\frac{2 \text{ mol O}_{2,AIRE}}{1 \text{ mol O}_{2,REQ}} \right) = 208.3333 \text{ mol O}_{2,AIRE}$$

$$208.3333 \text{ mol O}_{2,AIRE} \left(\frac{0.79 \text{ mol N}_{2,AIRE}}{0.21 \text{ mol O}_{2,AIRE}} \right) = 783.7289 \text{ mol N}_{2,AIRE}$$

En este caso el balance es relativamente sencillo, por lo que se puede calcular la cantidad de cada gas a la salida del quemador directamente, obteniéndose:

$$104.1667 \text{ mol O}_2$$

$$783.7289 \text{ mol N}_2$$

$$72.9167 \text{ mol CO}_2$$

$$62.5 \text{ mol H}_2\text{O}$$

La temperatura de flama se obtiene igualando el calor de reacción con el calor sensible de los gases que componen la flama:

$$\Delta H_{RXN} = 44100 \text{ kJ} \left(\frac{1000 \text{ J}}{1 \text{ kJ}} \right) \left(\frac{1 \text{ cal}}{4.185 \text{ J}} \right) = 10537634.41 \text{ cal}$$

$$\Delta H_{Salida} = \int_{298.15 \text{ K}}^{T_f} C_{pSalida} dT$$

$$C_{pSalida} = \sum n_i C_{p_i}$$

$$\begin{aligned}
Cp_{Salida} &= 104.1667 \text{ mol } O_2 \left(7.16 + 0.001 T - 40000 T^{-2} \frac{\text{cal}}{\text{molK}} \right) \\
&+ 783.7289 \text{ mol } N_2 \left(6.66 + 0.00102 T \frac{\text{cal}}{\text{molK}} \right) \\
&+ 72.9167 \text{ mol } CO_2 \left(10.55 + 0.00216 T - 204000 T^{-2} \frac{\text{cal}}{\text{molK}} \right) \\
&+ 62.5 \text{ mol } H_2O \left(7.17 + 0.00256 T + 8000 T^{-2} \frac{\text{cal}}{\text{molK}} \right) \\
Cp_{Salida} &= 7182.8642 + 1.2211 T - 18541674.8 T^{-2} \frac{\text{cal}}{K}
\end{aligned}$$

$$\Delta H_{Salida} = \int_{298.15 K}^{T_f} \left(7182.8642 + 1.2211 T - 18541674.8 T^{-2} \frac{\text{cal}}{K} \right) dT$$

$$\Delta H_{Salida} = 7182.8642 T + 0.61055 T^2 + 18541674.8 T^{-1} \text{ cal} \Big|_{298.15 K}^{T_f}$$

$$\Delta H_{Salida} = 0.61055 T^2 + 7182.8642 T + 18541674.8 T^{-1} \text{ cal} \Big|_{298.15 K}^{T_f}$$

$$\Delta H_{Salida} = 0.61055 T_f^2 + 7182.8642 T_f + 18541674.8 T_f^{-1} - 0.61055 (298.15)^2 - 7182.8642 (298.15) - 18541674.8 (298.15)^{-1} \text{ cal}$$

$$\Delta H_{Salida} = 0.61055 T_f^2 + 7182.8642 T_f - 2258033.922 + 18541674.8 T_f^{-1} \text{ cal}$$

Para considerar las pérdidas de calor, se puede calcular la cantidad de las pérdidas y restarla al calor de reacción (ya que es la única entrada de calor) o bien multiplicar el calor de reacción por el porcentaje que corresponde a calor aprovechado.

Quedando el calor que se aprovecha en el proceso como:

$$\Delta H_{Pérdidas} = -10537634.41 \text{ cal}(0.197) = -2075913.979 \text{ cal}$$

$$\Delta H_{Rxn} = 10537634.41 \text{ cal} - 2075913.979 \text{ cal} = 8461720.431 \text{ cal}$$

O bien:

$$\Delta H_{Rxn} = 10537634.41 \text{ cal}(0.803) = 8461720.431 \text{ cal}$$

Para calcular la temperatura de flama igualamos el calor de reacción (aprovechado) con el calor sensible:

$$\Delta H_{Rxn} = \Delta H_{Salida}$$

$$8461720.431 \text{ cal} = 0.61055 T_f^2 + 7182.8642 T_f - 2258033.922 + 18541674.8 T_f^{-1} \text{ cal}$$

Quedándonos una ecuación con una incógnita:

$$0.61055 T_f^2 + 7182.8642 T_f - 10719754.35 + 18541674.8 T_f^{-1} \text{ cal} = 0$$

La forma más sencilla de resolver un polinomio de este estilo es multiplicar ambos lados de la igualdad por T_f obteniéndose un polinomio de tercer grado:

$$0.61055 T_f^3 + 7182.8642 T_f^2 - 10719754.35 T_f + 18541674.8 = 0$$

Esto no modifica el resultado de la ecuación, pero hay que considerar que si quisiéramos conocer el calor sensible, debemos sustituir el valor de T_f obtenido en la ecuación original. En este caso solo nos interesa conocer la T_f , pero en un balance de energía térmica si es necesario tener eso en consideración.

$$T_f = 1338.2488 \text{ K}$$