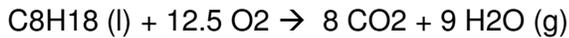


Ejercicio

Octano líquido entra a un reactor con un 40% de exceso de aire, con los alimentos a 298K y 1 atm. Determine la temperatura de flama adiabática en el caso de (a) un flujo de 1 mol/h de octano y (b) un recipiente rígido. También determine la presión final para el caso (b). Asuma comportamiento de gas ideal y densidad del octano de 703 kg/m³.

En este caso se asume combustión completa por la reacción:



El avance de la reacción entonces, se reduce al cálculo del consumo total del combustible. El oxígeno alimentado es del 40% adicional al estequiométrico, y como se alimenta aire, hay que tener en cuenta el nitrógeno alimentado:

$$\begin{bmatrix} F_{Oct}^{Ent} \\ F_{O_2}^{Ent} \\ F_{N_2}^{Ent} \\ F_{CO_2}^{Ent} \\ F_W^{Ent} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 12.5 * 1.4 \\ F_{O_2}^{Ent} * 0.79 / 0.21 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 17.5 \\ 65.8 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ mol/h}$$

El avance de la reacción es: $\epsilon_r = \frac{F_{Oct}^{Sal} - F_{Oct}^{Ent}}{v_{Oct}} = \frac{0 - 1}{-1} = 1$

$$\begin{bmatrix} F_{Oct}^{Sal} \\ F_{O_2}^{Sal} \\ F_{N_2}^{Sal} \\ F_{CO_2}^{Sal} \\ F_W^{Sal} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 17.5 \\ 65.8 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 \\ -12.5 \\ 0 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix} \epsilon_r = \begin{bmatrix} 0 \\ 5 \\ 65.8 \\ 8 \\ 8 \end{bmatrix} \text{ mol/h}$$

El balance de energía es:

$$Q = \sum_{s=1}^S F_s^{Sal} (\bar{H}_s^{Sal} - \bar{H}_s^{Rf}) - \sum_{s=1}^S F_s^{Ent} (\bar{H}_s^{Ent} - \bar{H}_s^{Rf}) + \epsilon_r \Delta H_R^{Rf}$$

Si se toma como estado de referencia 25°C y fase gaseosa, y como el reactor es adiabático, se tiene:

$$0 = \sum_{s=1}^S F_s^{Sal} (\bar{H}_s^{Sal} - \bar{H}_s^{Rf}) + \epsilon_r \Delta H_R^{Rf} \quad 0 = \sum_{s=1}^S F_s^{Sal} c_{p,s} (T - 25) + \epsilon_r \Delta H_R^{Rf}$$

Se puede despejar la temperatura:
$$T = 25 - \frac{\epsilon_r \Delta H_R^0}{\sum_{s=1}^S F_s^{Sal} c_{p,s}}$$

Los cálculos se presentan a continuación:

COMPO NENTE	v	ΔHf kJ/m		FLUJOS		cp kJ/mK	Fsal cp
				Entrada	Salida		
Octano	-1	-243.56	243.56	1	0		
O2 Teor				12.5			
Exceso				40%			
O2 Real	-12.5	0	0	17.5	5	0.03587	0.179
N2	0	0	0	65.8	65.8	0.03050	2.008
CO2	8	-393.79	-3150.3	0	8	0.05024	0.402
H2O	9	-242.01	-2178.1	0	9	0.03710	0.334
		ΔHR	-5084.8				2.923

Tsal	1764 C
------	--------

Esta es conocida como la temperatura de flama adiabática a presión constante.

Si el proceso se lleva a volumen constante, se consideran los estados inicial y final: Para el estado inicial, solo se consideran los reactivos, a 101300 Pa y 25 °C.

Dado que $\Delta U = Q - W$, a volumen constante $W=0$ y si el proceso es adiabático, $Q=0$, por lo tanto $U_1 = U_2$.

U_1 será la energía interna de los Reactivos, calculada mediante: $U = H - PV$, con las cantidades **molares**.

Para el octano líquido a 25 °C, la entalpía será la de formación menos la de vaporización:

$$\Delta H_f \text{ Oct} = -208.5963 \text{ kJ/mol} \quad \Delta H_v = 34.94 \text{ kJ/mol}$$

$$h \text{ Oct} = -243.56 \text{ kJ/mol.}$$

La energía interna será: $u = -243.56 - 101300 \cdot M_m / \rho$
 $u = -243.56 - 101300 \cdot 0.114 / 703 = -243.574 \text{ kJ/mol}$

Para el oxígeno y el nitrógeno a 298 K, sus entalpías de formación son cero, y si se consideran gases ideales, el producto $Pv = RT$

$$\text{Entonces: } u_{O_2} = u_{N_2} = 0 - 8.314 \cdot 298 = -2.478 \text{ kJ/mol}$$

La entalpía de los reactivos es:

$$u_R = 1 \cdot u_{\text{Oct}} + 17.5 \cdot u_{O_2} + 65.8 \cdot u_{N_2} = -450.0 \text{ kJ}$$

Esta debe conservarse siempre en el proceso, hasta el final.

Si se asume una temperatura final de 2400 K, se deben calcular las entalpías de los productos a esa temperatura:

$$h_{O_2} = \Delta H_{f,O_2}^0 + c_{p,O_2} (2400 - 298) = 0.03587(2102) = 75.4 \text{ kJ/mol}$$

$$h_{N_2} = \Delta H_{f,N_2}^0 + c_{p,N_2} (2400 - 298) = 0.03050(2102) = 64.11 \text{ kJ/mol}$$

$$h_{CO_2} = \Delta H_{f,CO_2}^0 + c_{p,CO_2} (2400 - 298) = -393.5 + 0.05024(2102) = -287.9 \text{ kJ/mol}$$

$$h_{H_2O} = \Delta H_{f,H_2O}^0 + c_{p,H_2O} (2400 - 298) = -241.8 + 0.0371(2102) = -163.8 \text{ kJ/mol}$$

Para la energía interna se resta RT al valor de la entalpía, es decir 19.95 kJ/mol.

$$u_{O_2} = 75.4 - 19.95 = 55.5 \text{ kJ/mol} \quad u_{N_2} = 64.11 - 19.95 = 44.16 \text{ kJ/mol}$$

$$u_{CO_2} = -287.9 - 19.95 = -307.9 \text{ kJ/mol} \quad u_w = -163.8 - 19.95 = -183.8 \text{ kJ/mol}$$

La energía interna de los productos es:

$$u_{\text{prod}} = 5 \cdot u_{O_2} + 65.8 \cdot u_{N_2} + 8 \cdot u_{CO_2} + 9 \cdot u_w$$

$$u_{\text{prod}} = 5 \cdot 55.5 + 65.8 \cdot 44.2 + 8 \cdot (-307.9) + 9 \cdot (-183.8) = -932.2 \text{ kJ}$$

La diferencia es: $u_{\text{prod}} - u_{\text{react}} = -932.2 - (-450.0) = -482.2 \text{ kJ}$

La temperatura es : 2620 K