



16. COMBUSTION PROCESSES: MODELLING

- 16.1. En un combustor se inyecta a razón de un mol de CO y un mol de O₂, a presión y temperatura ambiente, y se provoca la reacción isobárica. Se pide:
- Determinar la constante de equilibrio en función de la temperatura.
 - Calcular la composición y temperatura de salida y el calor transferido, suponiendo que se ha producido 0,1 mol de CO₂.
 - Calcular la composición y temperatura de salida y el calor transferido, suponiendo que se ha producido 0,9 mol de CO₂.
 - Calcular la composición y temperatura de salida en condiciones adiabáticas.
 - Calcular la temperatura adiabática correspondiente a la combustión completa.
- 16.2. Se hace pasar 10⁻⁴ kg/s de vapor por un lecho de carbón a presión ambiente, produciéndose CO y H₂. Se pide:
- Composición de salida a 100 °C y a 1000 °C.
 - Calor intercambiado en ambos casos.
 - Consumo de carbón en ambos casos.
- 16.3. En una cámara cerrada y rígida hay inicialmente 1 mol de CO y 2 mol de O₂ a 25 °C y 200 kPa., y se inicia la reacción. Se pide:
- Calcular la presión y temperatura de combustión adiabática y la composición de equilibrio.
 - Sabiendo que al cabo de cierto tiempo la temperatura es de 1200 K, calcular la presión, la composición de equilibrio y el calor intercambiado.
- 16.4. Calcular la concentración de equilibrio de NO en el aire a presión ambiente y a 300 K, 1000 K y 3000 K suponiendo que sólo hay N₂, O₂ y NO.
- 16.5. Dentro de un recipiente esférico de acero, de 0,5 m de diámetro, sumergido en un baño a 500 K, existe un gas, inicialmente a 150 kPa, cuya velocidad de reacción se modeliza por la ley de Arrhenius con las constantes $T_a=10^4$ K y $B_a=10^6$ m³.mol⁻¹.s⁻¹. El coeficiente global de transmisión de calor a través de la pared es 5 W.m⁻².K⁻¹, la entalpía de reacción $h_r=-10^5$ J.mol⁻¹ y capacidad térmica $c_v=25$ J/(mol.K). Se pide:
- Presión y temperatura del estado crítico de combustión (máxima temperatura de oxidación lenta).
 - Tiempo crítico adiabático y variación de la composición desde el estado inicial al crítico.
 - Variación de la velocidad de reacción desde el estado inicial al crítico.
 - Estimar el número de Rayleigh para ver si es importante la convección interior (a partir de $Ra=600$ ya empieza a serlo).
 - Variación de la temperatura y la composición con el tiempo, e influencia de la transmitancia térmica.
- 16.6. En una atmósfera inerte a 100 kPa y 25 °C, se tiene inicialmente una burbuja de jabón de 1 cm de radio llena de una mezcla combustible de metano y aire en proporción estequiométrica. En un cierto instante se provoca la reacción con una chispa central. Se pide:
- Esquema de la configuración en tres instantes del proceso (inicial, intermedio y final), indicando la nomenclatura que se va a usar para la geometría y las variables

- b) Explicar por qué es de esperar que el radio de la llama varíe linealmente con el tiempo, y hacer un esquema conjunto de la variación del radio de la llama y del radio de la burbuja en función del tiempo, deduciendo una expresión analítica para esta
- c) Calcular la temperatura de la llama suponiendo combustión
- d) Calcular el radio
- e) Calcular la velocidad observable de la llama y el tiempo que tarda en arder la burbuja, suponiendo que la velocidad de deflagración es de 0,45

16.7. En un reactor a presión constante se quema metano con oxígeno puro. Se pide:

- a) Suponiendo combustión estequiométrica y completa, determinar la composición a la salida, el poder calorífico y la temperatura de salida
- b) Sabiendo que en realidad se quema a razón de 2 moles de metano por cada 3 moles de oxígeno, y suponiendo que todo el hidrógeno se oxida completamente (y el carbono parcialmente), determinar la nueva estequiometría, la composición a la salida, el poder calorífico y la temperatura de salida
- c) Sabiendo que en los productos aparecen CO_2 , CO , H_2O y H_2 , y suponiendo que están en equilibrio, determinar el número de reacciones independientes necesarias para modelizar el proceso real, e indicarlas
- d) Determinar las constantes de equilibrio de las reacciones anteriores en función de la temperatura, aproximándolas por $\ln K = A - B/T$.
- e) Plantear el sistema de ecuaciones que permiten determinar la composición, el poder calorífico y la temperatura de equilibrio adiabática en el proceso último, indicando las incógnitas y los datos.

16.8. A una cámara adiabática de combustión llega una corriente estacionaria de 0,5 kg/min de octano a 25 °C que se quema con 100% de exceso de aire proveniente de un compresor de relación de presiones 8. En los productos se detecta la presencia de CO_2 , O_2 , N_2 , NO y H_2O . A continuación, los productos pasan por una turbina de la que salen a 950 K. Se pide

- a) Condiciones de entrada a la cámara de combustión.
- b) Temperatura y composición de equilibrio de los gases a la salida de la cámara.
- c) Potencia extraída de la turbina y del conjunto.
- d) Capacidad máxima de trabajo del octano, si la composición del ambiente es: $x_{\text{CO}_2} = 0,0003$, $x_{\text{O}_2} = 0,2068$, $x_{\text{N}_2} = 0,7802$ y $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,0127$.

16.9. Determinar la composición de equilibrio y la temperatura alcanzada en la combustión estequiométrica, adiabática e isobárica de propano en aire y en oxígeno puro, en los siguientes supuestos:

- a) Suponiendo que sólo aparece CO_2 y H_2O .
- b) Suponiendo que además aparece CO , H_2 y O_2 .

16.10. De medidas de la velocidad de reacción para $2\text{NO}_2 \rightarrow 2\text{NO} + \text{O}_2$ se ha obtenido la constante de reacción, resultando ser $k = 0,498 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ a 592 K y $k = 4,743 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ a 656 K. Se pide:

- a) Calcular la velocidad de reacción para $c_{\text{NO}_2} = 3 \text{ mol/m}^3$.
- b) Calcular las constantes E_a , T_a y B_a de la ley de Arrhenius.
- c) Representar la composición en función del tiempo, sabiendo que inicialmente $c_{\text{NO}_2} = 3 \text{ mol/m}^3$, $c_{\text{NO}} = c_{\text{O}_2} = 0$ y que la reacción se hace a $T = 656 \text{ K}$.

- 16.11. Se pretende estudiar la evolución temporal en el proceso de combustión esférica descrito en el problema P-15.27 ($R = 0,4$ m, $p_1 = 100$ kPa, $T_1 = 293$ K, $x_1 = 0,033$). Se pide:
- Indicar qué relación habrá entre la velocidad de deflagración laminar, V_q , y la velocidad aparente de la llama al comienzo y al final de la combustión.
 - Relacionar V_q con la velocidad aparente de la llama y el perfil temporal de presiones.
 - Relacionar la presión con la posición del frente de llama.
 - Variación de la presión con el tiempo cuando $t \rightarrow 0$.
 - Despreciando el efecto de la temperatura en V_q y suponiendo $V_q = 0,5$ m/s representar la evolución en función del tiempo y en función de la presión.
- 16.12. Estimar el tamaño crítico de un depósito de fertilizante de nitrato amónico para que se autoinflame en un ambiente a 50 °C, sabiendo que se descompone según una ley de Arrhenius de constantes $T_a = 1,6 \cdot 10^4$ K y $B_a = 6 \cdot 10^{13}$ s⁻¹. El coeficiente global de transmisión de calor a la atmósfera es 10 W.m⁻².K⁻¹, la entalpía de reacción -380 kJ.mol⁻¹ y la densidad 1750 kg/m³. Calcular también el incremento de temperatura antes de la combustión.
- 16.13. Considérese la combustión cuasi-estacionaria y esférica de una gota de benceno 3 mm de diámetro en aire. Se pide:
- Poder calorífico y temperatura adiabática.
 - Constante de quemado, $\beta \equiv (r^2 - r_{inicial}^2)/t$ (compárese con el valor experimental $(d^2 - d_{inicial}^2)/t = 0,96$ mm²/s).
 - Posición relativa de la llama.
 - Fracción másica de combustible en el gas cerca de la gota.
- 16.14. Se dispone de un tubo de 25 mm de diámetro y 5 m de largo lleno de una mezcla metano/aire con una riqueza del 80% de la estequiométrica, en condiciones de temperatura y presión ambientes. En un instante dado se abren ambas bocas del tubo y se enciende con una chispa en un punto a 1 m de un extremo. Se pide:
- Cantidad de sustancia en la mezcla.
 - Poder calorífico de la mezcla.
 - Temperatura adiabática de los productos.
 - Velocidad de salida de los gases, suponiendo movimiento unidimensional y un valor de $0,4$ m/s para la velocidad de deflagración.
- 16.15. Se quema propano con un 50% de exceso de aire en la boca de un mechero cilíndrico horizontal de 25 mm de diámetro, observándose que la longitud de la llama es igual al diámetro del tubo. Se ha medido la velocidad media de los gases en el tubo, que tiene 10 m de longitud, y resulta ser de $1,3$ m/s. Se pide:
- Calcular el aire teórico (en base molar y en base másica) y los gastos másicos de propano y de aire realmente usados.
 - Calcular la composición esperada de los gases de escape.
 - Calcular el poder calorífico y la temperatura de combustión adiabática, indicando la influencia de la relación aire/combustible.
 - Calcular la velocidad de deflagración laminar.
 - Si se produjese una ignición corriente arriba del tubo, calcular la velocidad relativa de la llama.
 - Supóngase que se llena el tubo de mezcla combustible en reposo y en un instante dado se produce la ignición en un extremo del tubo. Indicar cómo se calcularía la velocidad de la llama

respecto al tubo en los cuatro casos posibles de condiciones de confinamiento: tubo cerrado por ambos extremos, abierto por uno de ellos o abierto por ambos extremos.

- g) Calcular la velocidad aparente de la llama en el caso de ambos extremos cerrados.

16.16. Por la boca de un tubo vertical de 8 mm de diámetro sale hacia arriba aire propanado al 50% (50% de aire y 50% de propano) a 0,5 m/s. Coaxialmente se insufla aire puro a la misma velocidad por un conducto anular de 20 mm de diámetro (los espesores de los tubos son muy pequeños. Se pide:

- a) Hacer un esquema y razonar en qué regiones sería inflamable la mezcla, el tipo de llama que se desarrollaría, su movimiento, geometría, color, etc.
- a) Plantear el problema de difusión (sin reacción) que determinaría la distribución radial y estacionaria de propano a $z=1$ cm de altura de la boca del tubo interior, relacionando el coeficiente de difusión con la conductividad térmica según la teoría cinética de gases.
- b) Suponiendo que para esa distancia los efectos axilimétricos y de contorno todavía no son importantes, ensayar una solución de semejanza, del tipo:

$$y_F(r,z) = y_F\left(\frac{r}{\sqrt{z}}\right)$$

- d) Plantear la resolución numérica del problema difusivo axilimétrico mediante diferencias finitas, eligiendo adecuadamente la discretización.

16.17. A un combustor adiabático en régimen a 10 MPa entran 0,001 kg/s de hidrógeno y 0,02 kg/s de aire, todo ello a 300 K. Se pide:

- a) Suponiendo que sólo se forma H_2O , determinar la potencia calorífica, la composición, temperatura a la salida y la temperatura de rocío.
- b) Evaluar la influencia de los posibles radicales formados, en el resultado anterior.

16.18. Se ha introducido 3 moles de NO_2 en un tanque de $0,5 \text{ m}^3$ y se ha medido la velocidad de descomposición en NO y O_2 , resultando unos tiempos característicos (tiempo de desaparición de la cantidad inicial a la velocidad inicial) de 4 s a 600 K y de 0,3 s a 700 K. Se pide:

- a) Presión inicial en función de la temperatura.
- b) Relación entre la composición de equilibrio y la temperatura y la presión.
- c) Cantidad de NO_2 en el equilibrio a 500 K, 600 K, 700 K, 800 K y 900 K.
- d) Indicar la reacción que se va a considerar para el estudio de la cinética de la descomposición para tiempos cortos.
- e) Determinar los valores de la constante de reacción para los datos del problema.
- f) Determinar la energía y temperatura de activación y el factor pre-exponencial.
- g) Graficar la evolución de la cantidad de NO_2 con el tiempo para las temperaturas antedichas.

16.19. Una manera novedosa de aprovechar el calor de los gases de escape de una turbina de gas, consiste en usarlo para aumentar el poder calorífico del combustible mediante una rectificación termoquímica que aquí se va a modelizar del modo siguiente. Se considera la mezcla reactante de metano y vapor de agua a presión y temperatura constantes (100 kPa y 1000 K), para la producción de hidrógeno y monóxido de carbono. Se pide:

- a) Establecer las ecuaciones de estequiometría y de mezcla en función de las cantidades de reactivos usadas, por unidad de cantidad de sustancia de gases de salida..
- b) Establecer las ecuaciones de equilibrio químico y evaluarlas.
- c) Determinar la composición de salida en función de la de entrada, particularizando para el caso de entrada equimolar.

- d) Calcular el incremento de poder calorífico de los gases de salida respecto a los de entrada para el caso anterior.

16.20. Por la boca de un tubo vertical de 4 mm de diámetro sale hacia arriba un flujo de gas natural a 0,1 m/s. Coaxialmente se insufla aire puro a la misma velocidad por un conducto anular de 16 mm de diámetro exterior (los espesores de los tubos son muy pequeños. Se pide:

- a) Hacer un esquema y razonar en qué regiones sería inflamable la mezcla, el tipo de llama que se desarrollaría, su movimiento, geometría, color, etc.
b) Plantear el problema de difusión (sin reacción) que determinaría la distribución radial y estacionaria de gas a $z=1$ cm de altura de la boca del tubo interior.
c) Suponiendo que para esa distancia los efectos axilimétricos y de contorno todavía no son importantes, ensayar una solución de semejanza, del tipo:

$$y_F(r,z) = y_F\left(\frac{r}{\sqrt{z}}\right)$$

- d) Plantear la resolución numérica del problema difusivo axilimétrico mediante diferencias finitas, eligiendo adecuadamente la discretización.

16.21. Representar gráficamente la entalpía de formación (h_f^\oplus), la función de Gibbs de formación (g_f^\oplus) y la entalpía de reacción (h_r^\oplus), de los hidrocarburos saturados en función del número de carbonos, comentando la tendencia.

16.22. Se dispone un tubo troncocónico horizontal de 20 cm de longitud, de cuarzo, de 1 cm de diámetro pequeño y 2,5 cm de diámetro mayor, abierto al aire por el lado ancho. Por el otro extremo se introduce 10^{-5} m³/s de propano, que se enciende en el lado ancho. Se pide:

- a) Hacer un esquema de la instalación y del tipo de llama esperada, determinando la velocidad media de salida.
b) Determinar la cantidad de aire que habría que introducir por el lado estrecho para conseguir mezcla estequiométrica (manteniendo el gasto de combustible), calculando la velocidad de salida de la mezcla y haciendo un esquema de la llama esperada.
c) Indicar qué ocurriría al ir aumentando gradualmente el gasto de aire mencionado desde cero al estequiométrico, y luego al ir disminuyéndolo.
d) Potencia térmica y temperatura máxima de llama.

16.23. En un combustor adiabático se quema metano con un 110% de aire. Se pide:

- a) Composición y temperatura de salida suponiendo combustión completa.
b) Estimar la fracción de monóxido de carbono y de monóxido de nitrógeno a la salida suponiendo que se alcanza el equilibrio químico.
c) Hacer sendos esquemas del combustor, incluyendo un perfil típico de llama, suponiendo que la alimentación fuese premezclada o separada.

16.24. Una caldera de gas natural opera con un 1,5% de oxígeno a la salida. Se pide:

- a) Composición esperada a la salida y temperatura adiabática.
b) Concentración de óxido de nitrógeno a la salida suponiendo equilibrio a la temperatura adiabática.
c) Variación de los resultados anteriores al añadir una recirculación de gases de escape del 15% a 600 K.

- 16.25. Se ha llenado con metanol un pequeño matraz de cuello largo, de 1 cm de diámetro, quedando 5 cm libres a la atmósfera, que está a 25 °C, 93 kPa y 50% de humedad relativa. Se pide:
- Composición esperada de la fase gaseosa en las proximidades del líquido (molar y másica).
 - Velocidad media de escape en régimen casi-estacionario, suponiendo que la convección del aire exterior permite suponer que la concentración de alcohol en la boca es prácticamente nula, y aproximando la difusividad másica por el valor de la difusividad térmica.
 - Composición estequiométrica para la combustión y límites de ignición, en % de combustible en la mezcla..
 - Indicar qué ocurriría al acercar una llama a la boca del matraz. Y si se agitara antes (e.g. tapando la boca y dándole la vuelta un par de veces).
- 16.26. En un tubo de ensayo de 1 cm de diámetro y 10 cm de altura se echan 5 cm³ de etanol, quedando abierto a la atmósfera, que está a 20 °C, 94 kPa y 60% de humedad relativa. Se pide:
- Composición esperada de la fase gaseosa en las proximidades del líquido (molar y másica).
 - Velocidad media de escape en régimen casi-estacionario, suponiendo que la convección del aire exterior permite suponer que la concentración de alcohol en la boca es prácticamente nula, y aproximando la difusividad másica por el valor de la difusividad térmica calculada con las tablas.
 - Composición estequiométrica para la combustión y límites de ignición, en % de combustible en la mezcla..
 - Indicar qué ocurriría al acercar una llama a la boca del matraz. Y si se agitara antes (e.g. tapando la boca y dándole la vuelta un par de veces).
- 16.27. Para un estudio de tiempo de quemado de gotas en un motor de gasolina de inyección directa, se quiere analizar la combustión de una gota de 0,1 mm de diámetro, de n-octano en aire ambiente, considerando sólo el régimen casi-estacionario tras la ignición. Se pide:
- Determinar la temperatura máxima de la llama, y hacer un esquema del perfil radial de temperaturas esperado.
 - Hacer un diagrama $r-t$ de la variación esperada del radio de la gota con el tiempo.
 - Establecer el balance energético a través de una superficie de radio intermedio entre la gota y la llama.
 - Calcular el tiempo de quemado.
- 16.28. Se quiere analizar la combustión de una gota de 0,2 mm de diámetro, de n-heptano en aire ambiente, considerando sólo el régimen casi-estacionario tras la ignición. Se pide:
- Poder calorífico por unidad de masa de combustible.
 - Temperatura máxima de llama, y hacer un esquema del perfil de temperaturas esperado.
 - Establecer el balance energético a través de una superficie de radio intermedio entre la gota y la llama.
 - Calcular el tiempo de quemado.
- 16.29. Se trata de estudiar la composición de equilibrio de los gases de escape en la combustión de gas natural (supóngase metano puro) con aire, sabiendo que la alimentación es con una riqueza de 1,25, y que a la salida, que es a 1800 K, basta considerar las concentraciones de N₂, CO₂, H₂O, CO y H₂. En particular, se pide:
- Plantear el problema, estableciendo las ecuaciones e incógnitas.
 - Determinar el valor de la constante de equilibrio de la reacción del gas de agua.
 - Reducir el problema a una ecuación con una incógnita.

d) Resolver el problema.

16.30. Dentro de un tubo horizontal de 2 m de longitud y 2 cm de diámetro se ha preparado una mezcla de gas natural con aire estequiométrico, en equilibrio termomecánico con el ambiente. En un instante dado, se dejan abiertos los dos extremos del tubo y se provoca una chispa en el centro. Se pide:

- a) Indicar cómo se propagaría la llama.
- b) Determinar la composición de los gases frescos y de los quemados.
- c) Calcular la temperatura de combustión adiabática.
- d) Calcular la velocidad aparente de la llama.

16.31. Se va a hacer una simulación termodinámica del proceso de combustión en un motor alternativo mediante la función de Weibe, con parámetros típicos de un motor de encendido provocado ($a=5$, $m=3$, $\theta_{bs}=-10^\circ$, $\Delta\theta_{bs}=60^\circ$), aplicándolo a un motor de las siguientes características (Yamaha YZ250FN): un sólo cilindro ($Z=1$), de cuatro tiempos ($S=4$), 250 cm^3 ($V_d=249 \text{ cm}^3$ de desplazamiento), diámetro $D=0,0770 \text{ m}$, carrera $L=0,0526 \text{ m}$, y relación de compresión de $r=12,5$. Sólo se van a simular las carreras de compresión y expansión, con el ángulo de cigüeñal, θ , como variable independiente, y sólo en régimen estacionario a plena carga a $n=8500 \text{ rpm}$. Suponer que el cilindro se llena con una mezcla estequiométrica en condiciones ambiente, con rendimiento volumétrico unidad, y aproximar las propiedades de la gasolina por las del n-octano. En particular, se pide:

- a) Calcular el volumen muerto, las masas de aire y combustible atrapadas, y la energía química liberada por ciclo.
- b) Calcular la energía química liberada en función de θ , para el ciclo Otto ideal y en el modelo de Weibe.
- c) Establecer el balance energético para el gas, y obtener una ecuación diferencial para el perfil de presiones, $p(\theta)$.
- d) Resolver numéricamente lo anterior, y hallar $p(\theta)$, $T(\theta)$ y la contribución al trabajo al eje en cada etapa del ciclo.
- e) Calcular la presión media efectiva, la potencia al eje, y el rendimiento energético del motor.