

TEMPERATURA ADIABÁTICA Y EQUILIBRIO QUÍMICO DE LA COMBUSTIÓN REAL. INFLUENCIA DEL HIDRÓGENO PRESENTE

Dr. David Castillo-Mejía, Dr. José Á. Dávila-Gómez 

jadg@correo.azc.uam.mx

Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Azcapotzalco. D.F., México

● Resumen

La temperatura adiabática es la máxima temperatura teórica que la flama de una combustión real de un combustible puede alcanzar en ausencia de transferencia de calor que, por razones termodinámicas, no es factible evitar, con lo que la temperatura efectiva observada siempre es menor. La estimación de la temperatura adiabática debe realizarse en función de la composición de las especies presentes en la flama (que a su vez dependen de la temperatura de la misma). El problema se define entonces como un algoritmo complejo que obliga iterar la temperatura adiabática buscada con la composición de las especies a esa misma temperatura adiabática, de acuerdo con un proceso específico de equilibrio químico presente, que en nuestro caso, es el representado por el mecanismo de reacción de gas húmedo, considerando la producción simultánea de contaminantes tipo NO_x y la existencia o no de hidrógeno en esa composición. En este trabajo se presenta una estimación comparativa de esa temperatura, a partir de la composición obtenida desde la combustión reductora hasta la combustión oxidante completa. Como referencia, empleando metano, el mayor componente del gas natural comercial, así como conceptos avanzados derivados de los diagramas de combustión de equilibrio termodinámico, como base de la combustión real simulada. El rango del cálculo de la temperatura adiabática se hace a partir del límite superior (riqueza de 2), hasta el límite inferior de inflamación (riqueza de 0,5), con aire atmosférico como comburente.

Palabras clave: temperatura adiabática, combustión oxidante completa, combustión real hidrocarburos.

● Abstract

The adiabatic temperature is the maximum theoretical temperature that you can see in an actual fuel's combustion in the absence of heat transfer, which for thermodynamic reasons is not feasible to avoid, so the observed effective temperature is lower than the adiabatic temperature. The estimation of the adiabatic temperature must be done based on the composition of chemical equilibrium of the species present in the combustion's flame. The problem is then defined as a complex algorithm that obliges to iterate the adiabatic temperature together with the species' composition at the same adiabatic temperature according to the specific process of chemical equilibrium, which in our case is represented by the wet gas mechanism of reaction and considers also the NO_x production due to thermal chemical reaction of oxygen and nitrogen and the existence or not of hydrogen in that composition. This work presents a comparative estimate of the adiabatic temperature from the composition obtained through the reduced combustion to the oxidizing complete combustion as the reference using methane, the major component of commercial natural gas, as well as advanced concepts derived from the thermodynamic equilibrium diagrams of combustion as the basis for the simulated real combustion. The calculus of the estimation and the comparison will be done in the range: lower limit ($\phi=0,5$), to upper limit ($\phi=2,0$) of inflammation using atmospheric air as oxidant.

Keywords: adiabatic temperature, oxidizing complete combustion, real burning hydrocarbons.

● Introducción

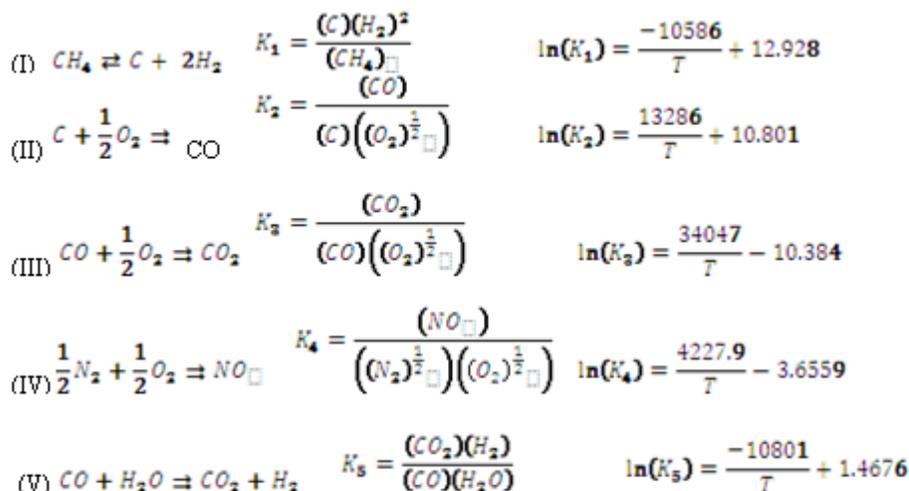
En este trabajo se explora la combustión del metano con aire como comburente en el rango de riqueza permisible: $\Phi_{inf} = 0,5$ & $\Phi_{sup} = 2$; en el contexto de este trabajo se utilizará el factor de

comburente, lo que da el siguiente rango: $\mu_{inf} = 0,5$ & $\mu_{sup} = 2$. La exploración del rango mencionado brinda la posibilidad de conocer los productos de la combustión así como la temperatura adiabática de la combustión en función del factor de aire que tiene la siguiente relación:

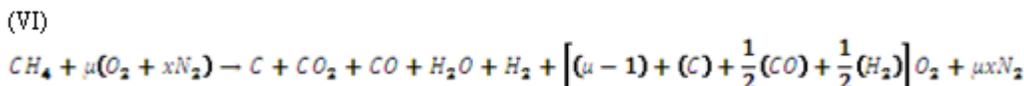
$$\mu = \left(1 + \frac{\%e}{100}\right); \text{ con } e = \text{Porcentaje de aire en exceso}$$

Para predecir las composiciones a la temperatura adiabática se utiliza un modelo de equilibrio químico; compuesto por cuatro balances molares, 4 ecuaciones de equilibrio

químico y una ecuación limitante, que es conocida como ecuación de reacción de gas húmedo, esta última controla la concentración entre CO, CO₂, H₂O y H₂ en el equilibrio.



Y la ecuación de combustión, que sirve como base de los balances molares empleada, válida para todo el rango señalado:



Con el miembro de la derecha, expresado para fines del análisis, en función de las constantes volumétricas de la combustión teórica V_{CO_2} y V_{H_2O} y las composiciones molares: C para el carbono, α para el CO₂, β para el CO, W para el

agua, h para el hidrógeno, ω para el oxígeno y δ para el nitrógeno.

A continuación se muestran las ecuaciones resultantes o modelo matemático de la solución específica:

$$C + \alpha + \beta - V_{CO_2} = 0 \quad (1)$$

$$W + h - V_{H_2O} = 0 \quad (2)$$

$$(\mu - 1)V_{O_2} + \frac{1}{2}\beta + \frac{1}{2}h - \frac{1}{2}\theta - \omega = 0 \quad (3)$$

$$\mu V_{N_2} - \frac{1}{2}\theta - \delta = 0 \quad (4)$$

$$K_4 \beta W - \alpha h = 0 \quad (5)$$

$$K_3 \beta \omega^{\frac{1}{2}} - \alpha = 0 \quad (6)$$

$$K_2 C \omega^{\frac{1}{2}} - \beta = 0 \tag{7}$$

$$K_1 \gamma_4 - Ch^2 = 0 \tag{8}$$

$$K_5 (\delta \omega)^{\frac{1}{2}} - \theta = 0 \tag{9}$$

Para calcular la temperatura de combustión adiabática se utiliza un modelo energético (el cual surge de la primera ley de la termodinámica) que tiene como variable el calor específico a presión

constante de la mezcla de los gases de combustión a la misma temperatura. El modelo es el siguiente, indicando una T_1 de 293° K (20 °C) correspondiente a la ambiente:

$$\{A\}(T_a - 293) + \{B\}(T_a^2 - 293^2) + \{C\}\left(\frac{1}{T_a} - \frac{1}{293}\right) - \frac{PCI}{1 + \mu P_a} = 0 \tag{10}$$

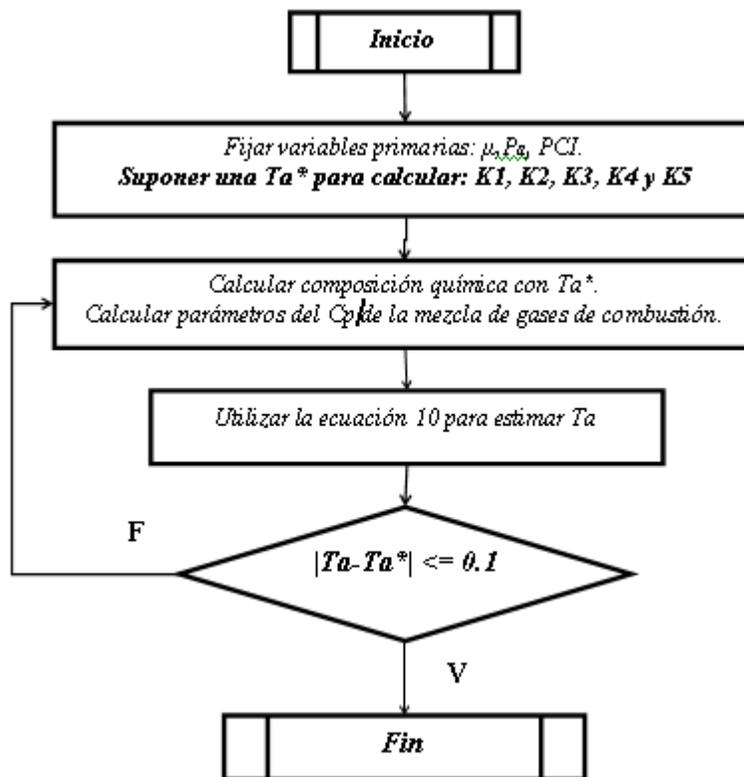
donde:

- $\{A\}$ = Parámetro promedio molar del calor específico de los gases de combustión.
- $\{B\}$ = Parámetro promedio molar del calor específico de los gases de combustión.
- $\{C\}$ = Parámetro promedio molar del calor específico de los gases de combustión.
- PCI = Poder Calorífico Inferior del combustible, metano para el interés propio.
- P_a = Poder del comburente.

Esquema de solución

Las diez ecuaciones anteriormente presentadas son de carácter no lineal, lo que

implica utilizar un esquema de solución iterativo para el cálculo de la temperatura adiabática de equilibrio químico y para el cual se sigue el siguiente diagrama de flujo:



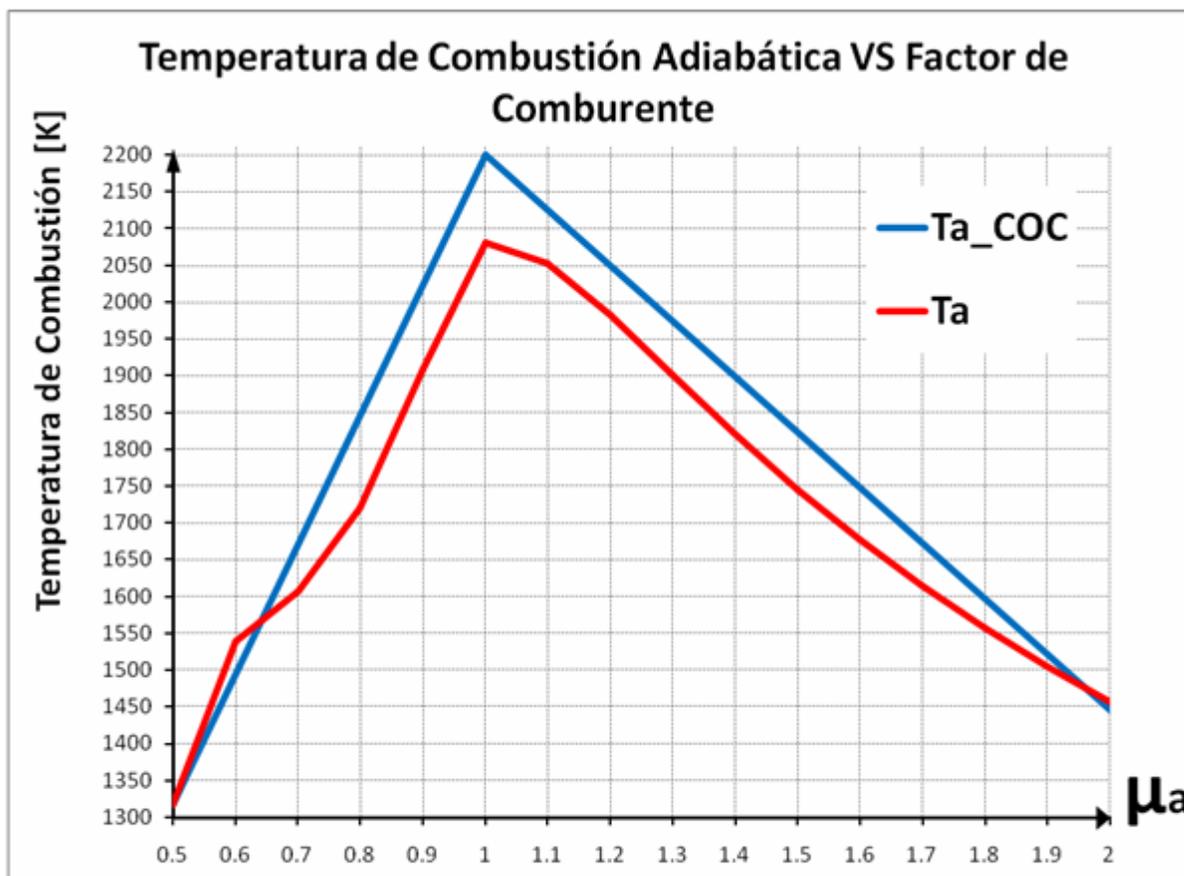
Herramientas de solución

Debido a la naturaleza no lineal de las ecuaciones, se utilizó una herramienta computacional común para resolver el problema, la herramienta utilizada es la función Solver de Excel,

dicha herramienta utiliza un sistema iterativo que requiere condiciones iniciales para comenzar la solución. Unas soluciones aproximadas para la temperatura adiabática en función de la riqueza pueden obtenerse de /1/, con esto se comienza el cálculo.

• Resultados y discusión

Temperatura de combustión adiabática



Utilizando el modelo y la herramienta de cálculo antes mencionados se generó la gráfica de la figura 1 que muestra las temperaturas adiabáticas estimadas por el método para cada factor de comburente μ considerado (línea roja o inferior contenida), y la compara contra las resultantes obtenidas por las combustiones reductora (rango $0.5 < \mu < 1$), la combustión teórica ($\mu = 1$) y la combustión oxidante completa o COC ($\mu > 1$).

Fig. 1 Temperatura adiabática en función del factor de aire.

En la figura 1 es posible observar las tendencias de la temperatura, tanto en la zona reductora como en la oxidante, se ve que en la zona reductora la caída de temperatura es más severa que en la oxidante. A 1 317 K se tiene la temperatura adiabática cuando la adición de O_2 está en el límite inferior, lo que, como se verá en el análisis de la composición de los gases de combustión,

corresponde a la disociación completa del metano en carbono e hidrógeno.

Composición química de los gases de combustión

Debido a que esta composición es la que predomina en la mezcla de los gases de salida es esta misma la que se necesita computar. Utilizando los modelos antes mencionados se obtiene la tabla 1.

TABLA 1. COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS GASES DE COMBUSTIÓN

μ	T_a	C	CH ₄	CO ₂	CO	H ₂	H ₂ O	N ₂	NO	O ₂
0,5	1 317	1,000 000	0,030 000	0,000 000	0,000 380	2,000 000	0,000 380	3,765 000	0,000 000	0,000 000
0,6	1 539	0,000 109	0,000 000	0,615 000	0,384 000	1,220 000	0,784 000	4,520 000	0,000 000	0,000 000
0,7	1 607	0,000 021	0,000 000	0,754 000	0,246 000	0,954 000	1,050 000	5,270 000	0,000 001	0,000 000
0,8	1 721	0,000 002	0,000 000	0,868 539	0,131 459	0,668 553	1,331 447	6,023 995	0,000 011	0,000 000
0,9	1 908	0,000 000	0,000 000	0,951 783	0,048 216	0,352 494	1,647 506	6,776 775	0,000 449	0,000 130
1,0	2 080	0,000 000	0,000 000	0,988 995	0,011 005	0,106 831	1,893 169	7,522 497	0,015 005	0,051 416
1,1	2 052	0,000 000	0,000 000	0,995 613	0,004 387	0,042 531	1,957 469	8,268 248	0,029 504	0,208 707
1,2	1 982	0,000 000	0,000 000	0,998 213	0,001 787	0,016 285	1,983 715	9,018 478	0,035 043	0,391 515
1,3	1 901	0,000 000	0,000 000	0,999 296	0,000 704	0,005 879	1,994 121	9,771 316	0,035 367	0,585 608
1,4	1 821	0,000 000	0,000 000	0,999 720	0,000 277	0,002 104	1,997 894	10,525 435	0,033 108	0,784 636
1,5	1 745	0,000 000	0,000 000	0,999 110	0,000 110	0,000 758	1,999 239	11,279 871	0,029 709	0,985 962
1,6	1 676	0,000 000	0,000 000	0,999 820	0,000 045	0,000 266	1,999 712	12,034 970	0,026 017	1,186 909
1,7	1 614	0,000 000	0,000 000	0,999 981	0,000 019	0,000 107	1,999 893	12,789 656	0,022 687	1,388 719
1,8	1 557	0,000 000	0,000 000	0,999 992	0,000 008	0,000 042	1,999 958	13,544 223	0,019 555	1,590 248
1,9	1 504	0,000 000	0,000 000	0,999 996	0,000 004	0,000 017	1,999 983	14,298 631	0,016 737	1,791 642
2,0	1 456	0,000 000	0,000 000	0,999 998	0,000 002	0,000 007	1,999 993	15,052 889	0,014 263	1,992 873

En la tabla 1 se puede observar como a 1 317 K se tiene la disociación del metano en 1 mol de C más 2 mol de H₂. Se puede observar que el H₂ tiende a desaparecer conforme la cantidad de O₂ que se alimenta aumenta.

En la combustión neutra se dice que los únicos productos de la combustión son CO₂, H₂O y N₂. Sin embargo, en los resultados se puede ver que hay ligeras producciones de CO, H₂ y NO así como una pequeña cantidad de O₂, esto quiere decir que la combustión neutra es un modelo muy aproximado de la combustión real. Un valor aproximado de la temperatura adiabática para la combustión neutra común es

de: 2 225 K, en este trabajo se computa un valor de 2 080 K, o sea un 6,5 % abajo. Aparentemente no es una desviación muy grande, sin embargo, se debe tener en cuenta que los modelos para la transferencia de calor por radiación involucran la temperatura elevada a la cuarta potencia. Pensando en lo anterior resulta factible tener más precisión en el cálculo de la T_a ya que la temperatura del hogar depende de ésta.

Se muestra una gráfica con las concentraciones de cada especie relativas a la cantidad total de los gases de combustión obtenidas en el equilibrio termodinámico de la temperatura adiabática respectiva.

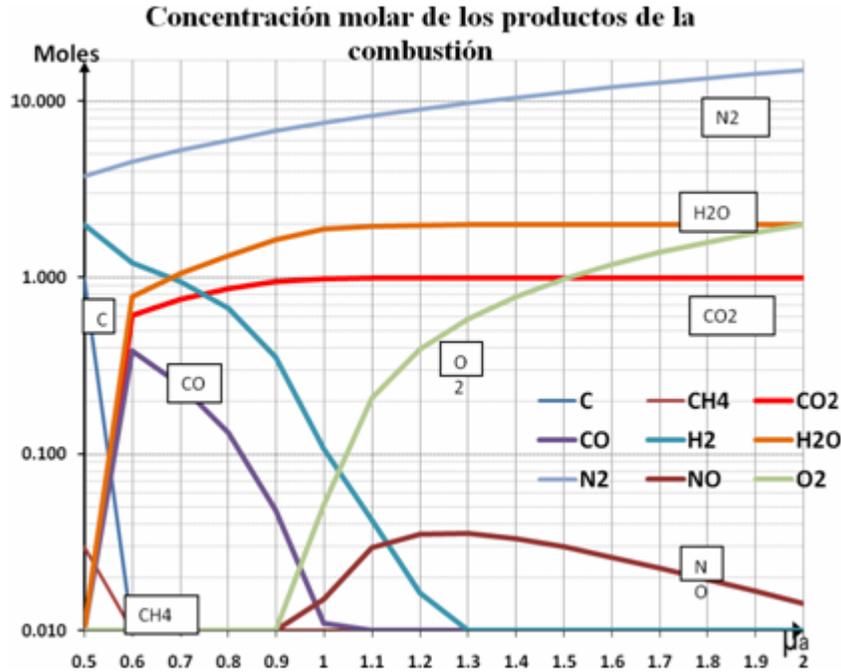


Fig. 2 Composición química de los gases de salida.

Nomenclatura

- T Temperatura
- T_a Temperatura adiabática
- Φ Riqueza de la mezcla combustible – comburente.
- μ Factor de comburente, es el inverso de la riqueza.
- K Constante de equilibrio químico para las reacciones químicas, funciones de T.
- T_a Temperatura adiabática.
- γ₄ Metano.
- C Carbono.
- h Hidrógeno molecular.
- ω Oxígeno molecular.
- α Dióxido de carbono.
- β Monóxido de carbono.

W Vapor de agua.

θ Monóxido de nitrógeno.

δ Nitrógeno molecular.

$\overline{C_p}$ Calor específico promedio de los gases de combustión.



Bibliografía

1. Cálculo de la temperatura adiabática de la combustión real simulada. 4º Congreso Internacional de Ingenierías Mecánica, Eléctrica, Electrónica, Mecatrónica y Computacional 2011. Querétaro, México.
2. DÁVILA GÓMEZ, J. Ángel. *Combustión Teoría y Práctica*. 1ra Ed. Julio 2000. PROYECTEC. Tlalneantla. Edo. México. 174 pp.
3. SMITH, J. M.; H. C. VAN NESS. *Introducción a la termodinámica en la ingeniería química*. 7ª Ed. 2007. Mc Graw Hill. 816 pp.
4. ERICKSON y PRABHU. *ALCHEj*. Vol. 32 # 7, 1986.
5. DÁVILA, J. A.; M. A. VACA. "Modelación termodinámica de reacciones de activación de carbones primarios". *Reporte 247*, UAM, 1990.
6. PERTHUIS, E. *La Combustión Industrielle*. Edic. Technip. IFP. Paris, 1983.