

# ALGUNOS PROBLEMAS FUNDAMENTALES SOBRE LA COMBUSTION DE OXIDANTES LIQUIDOS EN HIDROGENO

por

C. S. TARIFA, P. P. DEL NOTARIO

Instituto de Técnica Aeroespacial "Esteban Terradas", Madrid (España)

## 1. Introduccion

El hidrógeno es el combustible de mayor poder energético entre los actualmente en utilización. Sus reacciones de combustión con el oxígeno, ácido nítrico, tetróxido de nitrógeno, etc., es decir, con cualquier oxidante, proporcionan mayores calores de reacción y temperaturas mucho más elevadas que cuando se utilizan combustibles usuales a base de hidrocarburos. Por otra parte, los productos de la combustión son de bajo peso molecular.

El hidrogeno tiene características especiales que lo diferencian notablemente de otros combustibles. Además de su baja temperatura de ebullición, su presión crítica es de reducido valor (unas 12 atmósferas) por lo que se inyecta normalmente a presiones supercríticas en las cámaras de combustión de los motores cohete. En estas condiciones la tensión superficial se anula por lo que el hidrógeno no puede formar gotas.

Por el contrario, el oxígeno, ácido nítrico, etc. tienen presiones críticas superiores a las presiones normales de inyección, y por tanto, se dispersan en forma de un chorro de gotas en las cámaras de combustión.

Así pues, el proceso fundamental de la combustión  $H_2$ -oxidante en motores cohetes es el de la combustión de gotas de oxidante en atmósfera de hidrógeno. Al estudio de este proceso en su aspecto fundamental: combustión de una gota de oxidante en atmósfera en calma de hidrógeno es al que se dedica este trabajo.

## 2. Combustion de gotas de oxidante en atmosfera de hidrogeno

La combustión de gotas de combustible en aire ha sido estudiada teóricamente y experimentalmente por diversos autores, incluso por nosotros

mismos. Por el contrario, el caso de combustión en atmósfera de hidrógeno no ha sido todavía estudiado.

Una característica especial de este caso es el pequeño peso molecular del hidrógeno en comparación con el del oxidante y el de los productos de la combustión. Esto plantea condiciones especiales en los procesos de difusión y obliga a tratar con todo cuidado los valores de los coeficientes de transporte. A este respecto, la hipótesis normalmente admitida de tomar el valor de la densidad de la mezcla y el de dichos coeficientes constantes con respecto a la composición de esta mezcla, conduce a importantes errores, como se demuestra en este trabajo. Así pues, se considerarán valores variables de la densidad y conductividad térmica, lo que introduce complicaciones adicionales en el estudio teórico del proceso.

En primer lugar, se efectuará un estudio general del proceso en forma adimensional, y a continuación se efectuará una aplicación teórica y experimental para los siguientes oxidantes: bromo, oxígeno y ácido nítrico. El bromo fué seleccionado porque la cinética química de la reacción  $H_2-Br_2$  es perfectamente conocida, lo que permite una buena comparación entre resultados teóricos y experimentales; el oxígeno por su evidente interés tecnológico y finalmente el ácido nítrico por la facilidad con que puede experimentarse con él.

### 3. Modelo del proceso

El estudio teórico del proceso se basará en las siguientes hipótesis fundamentales:

- 1) Simetría esférica, despreciándose posibles efectos de convección libre, siempre pequeños en atmósfera de hidrógeno.
- 2) Estado estacionario, despreciándose la velocidad de recesión superficial de la gota en comparación con las velocidades de difusión.
- 3) Presión constante, ya que las variaciones de presión son insignificantes en una llama de esta naturaleza.
- 4) Solo se considerarán tres especies químicas: hidrógeno, oxidante y productos de la combustión. La influencia de los radicales aparecerá solamente en la cinética química del proceso.
- 5) Se considerará una velocidad de reacción global como cinética química del proceso. Esta velocidad de reacción puede deducirse del modelo cinético químico completo del proceso.

### 4. Ecuaciones generales

De acuerdo con las hipótesis anteriores, las ecuaciones diferenciales que gobiernan el proceso son las siguientes:

**a) Continuidad**

$$\frac{\dot{m}}{4\pi r^2} \frac{d\varepsilon_i}{dr} = w_i \quad (1)$$

que expresa la conservación de masa de cada especie química  $i$ .

**b) Energía**

$$\dot{m} \sum_i h_i \varepsilon_i - 4\pi r^2 \lambda \frac{dT}{dr} \quad (2)$$

que expresa el balance entre los flujos de entalpía y calor.

La constante de esta ecuación se obtiene expresando que en la superficie de la gota el calor recibido se invierte en evaporar el líquido:

$$4\pi r_s^2 \left( \frac{dT}{dr} \right)_s = \dot{m} q_{li}^0 \quad (3)$$

**c) Difusión**

$$\sum_j \frac{y_j}{M_j} \left[ \frac{\dot{m}}{4\pi r^2 \rho} D_{ij} \left( \frac{\varepsilon_j}{y_j} - \frac{\varepsilon_i}{y_i} \right) - \frac{1}{y_i} \frac{dy_i}{dr} + \frac{1}{y_j} \frac{dy_j}{dr} \right] = 0 \quad (4)$$

en la que únicamente se ha considerado difusión por concentración.

**5. Condiciones de contorno**

Las condiciones de contorno son las siguientes:

a) En la superficie de la gota:

$$\begin{aligned} T &= T_s \\ r = r_s \quad \varepsilon_{1s} &= 1; \quad \varepsilon_{is} = 0 \quad (i \neq 1) \end{aligned} \quad (5)$$

b) En el infinito

$$\begin{aligned} T &= T_\infty \\ y_{1\infty} &= 0; \quad y_i = y_{i\infty} \quad (i \neq 1). \\ \varepsilon_{1\infty} &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

La solución de este sistema no lineal de ecuaciones diferenciales, proporciona las funciones  $T(r)$ ,  $y_i(r)$ ,  $\varepsilon_i(r)$  y la velocidad de combustión  $\dot{m}$ , que es el valor propio del sistema.

**6. Solución del sistema**

Admitiendo que la reacción global de combustión es de la forma:



e introduciendo las variables adimensionales:

$$X = \frac{C_p^0}{M_1} \frac{1}{4\pi\lambda_0} \frac{\dot{m}}{r} \quad (8)$$

$$\theta = \frac{C_p^0}{q_r^0} (T - T_0) \quad (9)$$

las ecuaciones generales del proceso toman la forma:

$$\frac{d\varepsilon_i}{dX} = - \frac{C_p^0}{M_{10}\lambda_0} \frac{X_s^2 r_s^2}{X^4} w_i \quad (10)$$

$$(\varepsilon_1 - 1) \frac{v_3}{v_1} + \theta \left[ 1 + \frac{v_1 + v_2 - v_3}{v_1} (\varepsilon_1 - 1) \right] + \frac{\lambda}{\lambda_0} \frac{d\theta}{dX} + \theta_0 = 0 \quad (11)$$

$$\sum_j \frac{y_j}{M_j} \left( \frac{q_0}{\rho} L_{ij} + \frac{1}{y_i} \frac{dy_i}{dX} - \frac{1}{y_j} \frac{dy_j}{dX} \right) = 0 \quad (12)$$

en las que:

$$q_r^0 = \frac{1}{3} (v_1 h_1^0 + v_2 h_2^0 - v_3 h_3^0) \quad (13)$$

es el calor de reacción:

$$L_{ij} = \frac{M_1 \lambda_0}{C_p^0 \rho_0 D_{ij}} \quad (14)$$

es el numero de Lewis-Semenov,  $y\theta_0$  es un parámetro dado por:

$$\theta_0 = (C_{p1}^0 - C_p^0) \frac{T_s - T_1}{q_r^0} + \frac{C_p^0 (T_1 - T_0)}{q_r^0} + \frac{q_{i1}^0}{q_r^0} \quad (15)$$

En primer lugar el problema fué resuelto suponiendo una velocidad de reacción infinita, obteniéndose expresiones analíticas de la temperatura, concentraciones, flujos másicos y de la constante de evaporación  $K$  definida por la expresión

$$K = - \frac{dr_s^2}{dt} = - \frac{\dot{m}}{4\pi\rho_l}$$

En segundo lugar el sistema de ecuaciones (10) a (12) fué resuelto para el caso de velocidad de reacción finita utilizando un método aproximado. En el cuadro n° 1 se dan algunos de los resultados obtenidos.

## 7. Conclusiones

a) La combustión de gotas de oxidante en hidrógeno es mucho mas rápida que la combustión de las combinaciones de propulsantes usuales.

b) La llama está localizada muy cerca de la superficie de la gota de oxidante.

Cuadro n° 1

Velocidades de combustión, constantes de evaporación y relacion entre el radio de la llama y de la gota

	Velocidad de combustión adimensional $x_s \approx \frac{\dot{m}}{r_s}$	Constantes de evaporación $k - \frac{dr_s^2}{dt}, \text{ cm}^2/\text{sec}$	Radio de la llama Radio de la gota $r^*/r_s$
Gotas de oxígeno en hidrógeno (coeficientes de transporte constantes)	4.00	$3.27 \times 10^{-3}$	2.10
Gotas de oxígeno en hidrógeno (coeficientes de transporte variables)	2.80	$5.27 \times 10^{-3}$	1.78
Gotas de Acido nítrico en hidrógeno (Teoría)	1.02	$4.4 \times 10^{-3}$	1.53
Gotas de Acido nítrico en hidrógeno (Experimental)	—	$6.5 \times 10^{-3}$	1.30 valor medio
Gotas de bromo en hidrógeno (Teoría)	13.2	$12.6 \times 10^{-3}$	1.095
N-heptano en aire (Experimental)	—	$2.73 \times 10^{-3}$	3.10
Benzeno en aire (Experimental)	—	2.50	3.0
Etil-alcohol en aire (Experimental)	—	1.98	3.5

c) Cuando se calcula la combustión de oxidantes líquidos en hidrógeno es importante tener en cuenta los verdaderos valores de la densidad y de los coeficientes de transporte en función de la composición de la mezcla.

### Notación

$D$  — Coeficiente de difusión

$\dot{m}$  — Flujo másico

$q_i^0$  — Calor molar de evaporación

- $r$  — Radio  
 $w_i$  — Velocidad de reacción de la especie  $i$   
 $y_i$  — Fracción de concentración de la especie  $i$   
 $\varepsilon$  — Fracción de flujo  
 $\lambda$  — Conductividad térmica  
 $\rho$  — Densidad.