

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI FEDERICO II
DIPARTIMENTO DI SCIENZA E INGEGNERIA DELLO SPAZIO

**Esercitazioni del corso di:
Propulsione Aerospaziale**

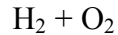
Professoressa: A. Russo Sorge

Esercitazione n°02:
Calcolo della temperatura finale in camera di combustione

Studente: Petrosino Francesco
Matricola: 347/680

1. Scopi dell'esercitazione

Si vogliono determinare le condizioni finali di equilibrio di una miscela bipropellente presente nella camera di combustione di un endoreattore. I propellenti scelti sono idrogeno e ossigeno:

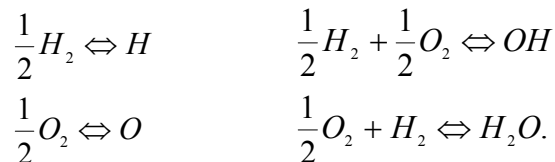


Il problema viene svolto sotto le seguenti ipotesi:

- Miscela di gas perfetti monofase ($c_p = \text{cost}$).
- Condizioni finali di equilibrio, si suppone cioè che il tempo di permanenza in camera di combustione sia tale da assicurare il raggiungimento delle condizioni di equilibrio.
- Pressione costante, camera di combustione a sezione costante.
- Numero di Mach della miscela nullo, $M \cong 0$.
- Processo globalmente adiabatico, $H \cong \text{cost}$.
- Costante universale dei gas: $R_0 = 1.99 \text{ cal/moleK}$.
- Pesi molecolari: $m_{\text{H}_2} = 2 \text{ g/mol}$, $m_{\text{O}_2} = 32 \text{ g/mol}$
- Temperatura di riferimento $T_0 = 298 \text{ K}$.

Le specie presenti all'equilibrio sono: O, H, O_2 , H_2 , OH, H_2O , quindi in totale abbiamo $s = 6$ specie, mentre quelle formate da H_2 e O_2 sono $s-c = 4$.

Le 4 reazioni che avvengono sono:



Vogliamo determinare le condizioni finali di equilibrio della miscela di gas combustibili, ovvero la temperatura finale e le concentrazioni delle s specie presenti, quindi abbiamo $s+1$ incognite; abbiamo bisogno di $s+1$ equazioni per poter risolvere il problema, ed useremo: l'equazione di conservazione dell'energia, c equazioni di conservazione degli atomi, $s-c$ equazioni di equilibrio. I dati numerici sono stati tratti dal testo "Wilkins - Theoretical Evaluation Of Chemical Propellants".

2. Equazione di conservazione dell'energia

Entalpia finale uguale a quella iniziale:

$$h_i = h_f \Rightarrow \sum_{k=1}^2 \left[\frac{\alpha_k}{m_k} \left((\Delta H_F)_k + \int_{T_0}^{T_{in}} c_{pk}(T) dT \right) \right] = \frac{1}{\rho_f} \sum_{k=1}^6 \left[(\Delta H_F)_k + \int_{T_0}^T c_{pk}(T) dT \right] n_k;$$

con

$n_k = N_k/M_t$ concentrazione della specie k per unità di massa, incognita;

N_k numero moli della specie k ;

M_t massa totale;

α_k è la frazione di massa della specie k ;

m_k è il peso molecolare della specie k ;

$c_{pk}(T)$ è il calore specifico a pressione costante della specie k ;

$(\Delta H_F)_k$ è il calore di formazione della specie k alla temperatura di 298 K;

ρ_f = densità finale della miscela in equilibrio.

I calori di formazione delle specie in gioco, alla temperatura di 298 K sono:

- $(\Delta H_F)_H = 52.09 \text{ kcal/mole}$;
- $(\Delta H_F)_O = 59.55 \text{ kcal/mole}$;
- $(\Delta H_F)_{\text{H}_2} = 0 \text{ kcal/mole}$, essendo una specie elementare;
- $(\Delta H_F)_{\text{O}_2} = 0 \text{ kcal/mole}$, essendo una specie elementare;

- $(\Delta H_F)_{OH} = 10.06 \text{ kcal/mole}$;
- $(\Delta H_F)_{H_2O} = -57.8 \text{ kcal/mole}$.

Per i calori specifici delle specie in esame, assumiamo un valore medio nel range di temperatura di 1000 - 3000 K:

- $(c_p)_H = 4.968 \text{ cal/moleK}$;
- $(c_p)_O = 5 \text{ cal/moleK}$;
- $(c_p)_{H_2} = 8 \text{ cal/moleK}$;
- $(c_p)_{O_2} = 8.8 \text{ cal/moleK}$;
- $(c_p)_{OH} = 8 \text{ cal/moleK}$;
- $(c_p)_{H_2O} = 11 \text{ cal/moleK}$.

Supponendo che la temperatura iniziale di H_2 sia pari a 20 K, mentre quella di O_2 sia uguale a 90 K, si ottiene:

$$h_i = \frac{\alpha_{H_2}}{m_{H_2}} \left((\Delta H_F)_{H_2} + (c_p)_{H_2} \int_{298}^{20} dT \right) + \frac{\alpha_{O_2}}{m_{O_2}} \left((\Delta H_F)_{O_2} + (c_p)_{O_2} \int_{298}^{90} dT \right)$$

$$h_f = \frac{1}{\rho_f} \left[\begin{aligned} &((\Delta H_F)_{H_2} + (c_p)_{H_2} (T_f - 298))n_{H_2} + ((\Delta H_F)_{O_2} + (c_p)_{O_2} (T_f - 298))n_{O_2} + \\ &+ ((\Delta H_F)_H + (c_p)_H (T_f - 298))n_H + ((\Delta H_F)_O + (c_p)_O (T_f - 298))n_O + \\ &+ ((\Delta H_F)_{HO} + (c_p)_{HO} (T_f - 298))n_{HO} + ((\Delta H_F)_{H_2O} + (c_p)_{H_2O} (T_f - 298))n_{H_2O} \end{aligned} \right]$$

Il valore di ρ_{fin} può essere espresso in funzione delle concentrazioni delle n specie tramite la relazione: $\rho_f = \sum_{k=1}^6 n_k \cdot m_k$.

3. Equazioni di conservazione degli atomi (c equazioni)

Le specie in ingresso sono: H_2 e O_2 ; le specie in uscita sono: O, H, O_2 , H_2 , OH, H_2O .

Le due equazioni di conservazione sono quindi:

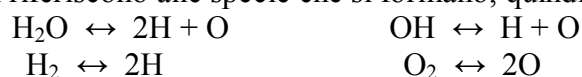
$$2 \frac{\alpha_{H_2}}{m_{H_2}} = \frac{1}{\rho_f} (2n_{H_2} + n_H + n_{OH} + 2n_{H_2O}) ; \quad 2 \frac{\alpha_{O_2}}{m_{O_2}} = \frac{1}{\rho_f} (2n_{O_2} + n_O + n_{OH} + n_{H_2O}) .$$

Ipotizziamo un rapporto di miscelamento $r = 3$ minore di quello stechiometrico ($r_{st} = 8$) in modo da avere un impulso specifico più elevato (essendo $I_{SP} \propto \sqrt{\frac{T_0}{m}}$). Si ottiene quindi:

$$\alpha_{H_2} = \frac{\dot{m}_{H_2}}{\dot{m}} = \frac{1}{r+1} = \frac{1}{4} ; \quad \alpha_{O_2} = \frac{\dot{m}_{O_2}}{\dot{m}} = \frac{r}{r+1} = \frac{3}{4} .$$

4. Equazioni di equilibrio (s-c equazioni)

Le equazioni di equilibrio si riferiscono alle specie che si formano, quindi sono:



Per ogni equazione di formazione possiamo scrivere la *Legge di azione di massa*:

$$K_i(T) = \frac{n_i}{\prod_{j=1}^c n_j^{v_{ij}}}$$

$$K_i(T)_H = \frac{n_H}{n_{H_2}^{1/2}}; \quad K_i(T)_O = \frac{n_O}{n_{O_2}^{1/2}};$$

$$K_i(T)_{OH} = \frac{n_{OH}}{n_{H_2}^{1/2} \cdot n_{O_2}^{1/2}}; \quad K_i(T)_{H_2O} = \frac{n_{H_2O}}{n_{H_2} \cdot n_{O_2}^{1/2}}.$$

$$K_i = (R_0 T)^{v_i - 1} K_p$$

Determiniamo la legge $K_p(T)$ per ogni specie formata. Nell'ipotesi che tale andamento sia parabolico, noti i valori di $K_p(T)$ per tre diversi valori di temperatura ($T_1=1000$ K, $T_2=2000$ K e $T_3=3000$ K), possiamo ricavare i coefficienti A,B,C dell'equazione che rappresenta la legge $K_p(T)$, tramite un sistema lineare di tre equazioni nelle tre incognite suddette:

$$\begin{cases} K_p(T_1 = 1000) = A + BT_1 + CT_1^2 \\ K_p(T_2 = 2000) = A + BT_2 + CT_2^2 \\ K_p(T_3 = 3000) = A + BT_3 + CT_3^2 \end{cases}$$

- Per H :

$$\ln K_p(T)_H = \frac{-\Delta F_T^0}{R_0 T} = \frac{1}{2} \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{H_2}}{R_0 T} - \frac{(F_T^0 - H_0^0)_H}{R_0 T} + \frac{1/2(H_0^0)_{H_2} - (H_0^0)_H}{R_0 T};$$

$$T = 1000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_H = 0.2 \cdot 10^{-8};$$

$$T = 2000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_H = 0.0164;$$

$$T = 3000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_H = 0.158;$$

$$K_p(T)_H = 0.153 - 0.00023T + 7.7 \cdot 10^{-8} T^2;$$

- per O :

$$\ln K_p(T)_O = \frac{-\Delta F_T^0}{R_0 T} = \frac{1}{2} \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{O_2}}{R_0 T} - \frac{(F_T^0 - H_0^0)_O}{R_0 T} + \frac{1/2(H_0^0)_{O_2} - (H_0^0)_O}{R_0 T};$$

$$T = 1000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_O = 0;$$

$$T = 2000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_O = 0.00058;$$

$$T = 3000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_O = 0.114;$$

$$K_p(T)_O = 0.112 - 0.00017T + 5.6 \cdot 10^{-8} T^2;$$

- per OH :

$$\ln K_p(T)_{OH} = \frac{-\Delta F_T^0}{R_0 T} = \frac{1}{2} \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{H_2}}{R_0 T} + \frac{1}{2} \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{O_2}}{R_0 T} - \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{OH}}{R_0 T} + \frac{1/2(H_0^0)_{H_2} + 1/2(H_0^0)_{O_2} - (H_0^0)_{OH}}{R_0 T};$$

$$T = 1000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_{OH} = 1.3 \cdot 10^{-7};$$

$$T = 2000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_{OH} = 0.000794;$$

$$T = 3000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_{OH} = 1.05;$$

$$K_p(T)_{OH} = 1.05 - 0.00157T + 5.2 \cdot 10^{-7} T^2;$$

- per H₂O :

$$\ln K_p(T)_{H_2O} = \frac{-\Delta F_T^0}{R_0 T} = \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{H_2}}{R_0 T} + \frac{1}{2} \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{O_2}}{R_0 T} - \frac{(F_T^0 - H_0^0)_{H_2O}}{R_0 T} + \frac{(H_0^0)_{H_2} + 1/2(H_0^0)_{O_2} - (H_0^0)_{H_2O}}{R_0 T};$$

$$T = 1000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_{H_2O} = 1.07 \cdot 10^{10};$$

$$T = 2000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_{H_2O} = 3300;$$

$$T = 3000 \text{ K} \quad \Rightarrow \quad K_p(T)_{H_2O} = 21.4;$$

$$K_p(T)_{H_2O} = 3.2 \cdot 10^{10} - 2.67 \cdot 10^7 T + 5350 T^2.$$

I valori dei coefficienti $\frac{F_T^0 - H_0^0}{T}$ e di H_0^0 per le varie specie sono tabellati.

5. Sistema di equazioni finale

Il sistema si 7 equazioni nelle 6 incognite n_k e nell'incognita T_f (temperatura finale) è:

$$\left\{ \begin{array}{l} -641.8 = \frac{1}{\rho_f} (63900 + (T_f - 298)(8n_{H_2} + 8.8n_{O_2} + 4.97n_H + 5n_O + 8n_{OH} + 11n_{H_2O})) \\ 0.25 = \frac{1}{\rho_f} (2n_{H_2} + n_H + n_{OH} + 2n_{H_2O}) \\ 0.047 = \frac{1}{\rho_f} (2n_{O_2} + n_O + n_{OH} + n_{H_2O}) \\ 0.153 - 0.00023T + 7.7 \cdot 10^{-8} T^2 = (R_0 T)^{1/2} \frac{n_H}{n_{H_2}^{1/2}} \\ 0.112 - 0.00017T + 5.6 \cdot 10^{-8} T^2 = (R_0 T)^{1/2} \frac{n_O}{n_{O_2}^{1/2}} \\ 1.05 - 0.00157T + 5.2 \cdot 10^{-7} T^2 = (R_0 T)^0 \frac{n_{OH}}{n_{H_2}^{1/2} n_{O_2}^{1/2}} \\ 3.2 \cdot 10^{10} - 2.67 \cdot 10^7 T + 5350 T^2 = (R_0 T)^{-1/2} \frac{n_{H_2O}}{n_{H_2}^{1/2} n_{O_2}^{1/2}} \end{array} \right.$$

Questo sistema è non lineare, va risolto iterativamente.