

CARACTERIZACIÓN DE LA COMBUSTIÓN DE PROPULSANTES SÓLIDOS

LÓPEZ-MUÑOZ C.⁽¹⁾ GARCÍA-CASCALES J.R.⁽¹⁾; VELASCO F.J.S.⁽²⁾; SERNA J.⁽²⁾; LOPEZ-BELCHÍ A.⁽²⁾;

OTÓN-MARTÍNEZ R.A.⁽³⁾; REY F.⁽³⁾; LASO A.⁽³⁾; MUR R.⁽³⁾; MORATILLA D.⁽³⁾

carmen.lopez@upct.es

⁽¹⁾Universidad Politécnica de Cartagena, ETSII, Dpto. de Ingeniería Térmica y de Fluidos, Cartagena.

⁽²⁾Centro Universitario de la Defensa de San Javier MDE-UPCT, Santiago de la Ribera.

⁽³⁾Expal Systems S.A. (Maxam Defence), Madrid.

RESUMEN

En este trabajo se estudia un modelo bifásico separado de una presión para la caracterización de propulsores sólidos. En este modelo, cada fase está caracterizada por un sistema de ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. Ambos sistemas están acoplados. A lo largo del trabajo, se presta atención especial a las ecuaciones que cierran el sistema, en concreto la ecuación de la fricción y el calor interfacial y a la tasa de reacciones de combustión. Se aproximan soluciones de dicho sistema a través de una aproximación en volúmenes finitos. Para el cálculo de los flujos en las interfases se utiliza un solver aproximado de Riemann resolviéndose el sistema de forma explícita. En concreto se extiende el esquema de Rusanov (Rusanov, 1961), éste es un esquema numérico tradicionalmente utilizado en la resolución de sistemas de ecuaciones hiperbólicos. Para la validación de la metodología empleada se estudia un problema de un tubo de combustión propuesto por Hoffman y Krier (1981) observando que los resultados obtenidos son similares a los encontrados en la literatura. A la vez se ha analizado el efecto que tiene la iniciación en la simulación del problema. El trabajo concluye comentando los resultados obtenidos y citando las acciones futuras.

Palabras clave: Combustión, propulsante, modelo bifásico

1. Introducción

En literatura hay un buen número de modelos propuestos para el estudio de problemas de combustión que involucran mezclas de sólidos y gases. Éstos se diferencian en la consideración o no de diversos términos que dan cuenta de fenómenos más o menos complejos. Cada nivel de aproximación debe ser aplicado en función del tipo de problema que se esté considerando, los fenómenos físicos que intervengan y el realismo requerido por la aplicación en la que se quieran utilizar. En el caso del análisis de problemas de balística interior se ha observado que el modelo de Gough es suficientemente adecuado para caracterizar convenientemente estos problemas, entre otras cosas porque incluía una ecuación para la distancia de quemado del grano de pólvora. El trabajo que aquí se presenta forma parte del estudio que se está realizando para valorar distintos modelos de combustión de mezclas sólido gas que nos permitan analizar el tipo de problema que nos encontramos en la combustión de los granos de proyectiles con unidades Base Bleed o en los motores cohete.

La tecnología Base Bleed consiste en un método de mejora del alcance de los proyectiles aplicado en balística exterior, cuyo fin es la disminución de la resistencia de base experimentada por los vehículos en vuelo, traducándose como se ha dicho en un incremento en el alcance final ofrecido por la munición.

A continuación, se presenta uno de estos modelos, el sistema de ecuaciones que lo caracteriza, las ecuaciones de cierre utilizadas para dar cuenta de los fenómenos físicos que tienen lugar en el problema, se estudian los métodos numéricos empleados para obtener soluciones aproximadas de dicho sistema de ecuaciones y se analiza un test encontrado en la bibliografía y que permitirá mostrar cualitativamente que la metodología presentada es adecuada para utilizarla en el estudio de estos problemas. Unas conclusiones finales y unos comentarios sobre los trabajos que darán continuidad a éste cierran este estudio.

2. Sistema de ecuaciones

El modelo de Hoffman y Krier (1980, 1981) es básicamente el mismo que el propuesto por Krier y Kezerle (1977) sólo que incluye una serie de términos que dan cuenta de la compactación de la fase sólida a través de la tensión intergranular. El sistema de ecuaciones corresponde a un modelo bifásico de flujo separado con una presión. Está formado por seis ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía de cada fase completadas por las ecuaciones de estado para ambas fases, sólido y gas y por las correspondientes relaciones de cierre. Este modelo se desarrolla asumiendo las siguientes hipótesis:

El flujo es unidimensional, los calores específicos a presión y volumen constante para ambas fases se consideran constantes, las partículas se consideran esféricas y la fase sólida es incompresible. Siendo el sistema de ecuaciones,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha\rho_g) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha\rho_g u_g) = \Gamma \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha\rho_g u_g) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha\rho_g u_g^2 + \alpha p_g) = p_g \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \Gamma u_p - F_D \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha\rho_g E_g) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha(\rho_g E_g + p_g)u_g) = \Gamma \left(E_{chem}^g + \frac{u_p^2}{2} \right) - u_p \cdot F_D - \dot{Q} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}((1 - \alpha)\rho_p) + \frac{\partial}{\partial x}((1 - \alpha)\rho_p u_p) = -\Gamma \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\alpha)\rho_p u_p) + \frac{\partial}{\partial x}[(1-\alpha)\rho_p u_p^2 + (1-\alpha)\tau_p] = -\tau_p \frac{\partial \alpha}{\partial x} - \Gamma u_p + F_D \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\alpha)\rho_p E_p) + \frac{\partial}{\partial x}[(1-\alpha)u_p(\rho_p E_p + \tau_p)] = \Gamma \left(E_{chem}^p - \frac{u_p^2}{2} \right) + u_p \cdot F_D + \dot{Q} \quad (6)$$

donde α es la fracción volumétrica de gas en la mezcla también llamada fracción de huecos o porosidad en la bibliografía, ρ_k es la densidad de la fase k , ($k = p$ fase sólida y $k = g$ fase gaseosa), u_k es la velocidad de la fase k , p_k es la presión, E_k es la energía interna total específica dada por la expresión $E_k = e_k + u_k^2/2$, E_{chem}^g es el calor de combustión que se supone va todo a la fase gaseosa, E_{chem}^p es el calor latente de fusión de la fase sólida (no considerado en este estudio), τ_p es la tensión intergranular. Γ es la masa de gas generada como consecuencia de la combustión, Γu_p y $\Gamma \left(E_{chem}^g + \frac{u_p^2}{2} \right)$ son los términos de transferencia de cantidad de movimiento y energía asociados al proceso de transferencia de masa, F_D es el término de fricción interfacial y \dot{Q} corresponde al calor intercambiado entre las fases.

En el trabajo de Hoffman y Krier el estado termodinámico de la fase gaseosa es descrito mediante la ecuación de estado de Noble y Abel,

$$p_g = \frac{\rho_g R_g T_g}{1 - \rho_g \eta_g} \quad (7)$$

Los autores sugieren considerar el covolumen como una función de la densidad,

$$\frac{1}{1 - \rho_g \eta_g} = 1 + b\rho_g + c\rho_g^2 + d\rho_g^3 \quad (8)$$

En este trabajo no se ha considerado tal efecto. Como se ha dicho anteriormente la fase sólida se considera incompresible en el test estudiado aunque Hoffman y Krier también estudian la influencia que tiene en la solución del problema considerar una ecuación de estado para la fase sólida del tipo de la ecuación de Tait $\rho_p = \rho_{p0} \left[\frac{3p_g}{\kappa_0} + 1 \right]^{1/3}$.

3. Relaciones de Cierre

Para describir el flujo son necesarias una serie de relaciones constitutivas lo más realistas posibles que permitan explicar los diferentes fenómenos físicos que tienen lugar en el proceso de combustión de una mezcla de sólidos y gases. Como se deduce del sistema de ecuaciones presentado en el apartado anterior, en este trabajo se considera la interacción entre las fases a través de los términos de fricción interfacial y de calor interfacial que son completados por una ley de combustión y una ley que describe la tensión intergranular.

La fricción interfacial viene dada por la siguiente expresión,

$$F_D = \frac{\mu_g (u_g - u_p) (1 - \alpha)^2}{(2r_p)^2 \alpha^2} \left\{ 276.23 + 5.05 \left(\frac{Re_p}{1 - \alpha} \right)^{0.87} \right\} \quad (9)$$

donde

$$Re_p = \frac{2\alpha|u_g - u_p|\rho_g r_p}{\mu_g} \quad (10)$$

siendo la viscosidad del gas variable con la temperatura según la expresión

$$\mu_g = \mu_{g0} \left(\frac{T_g}{T_{g0}} \right)^{0.65} \quad (11)$$

El calor interfacial está definido por la expresión,

$$\dot{Q} = \frac{6(1-\alpha)}{d_p} h_c (T_g - T_p) \quad (12)$$

donde el coeficiente de transmisión del calor es,

$$h_c = \frac{0.65k_g}{2r_p} \left[\frac{\alpha\rho_g|u_g - u_p|2r_p}{\mu_g} \right]^{0.7} Pr^{1/3} = \frac{0.65k_g}{2r_p} Re_p^{0.7} Pr^{1/3} \quad (13)$$

la tensión intergranular viene dada por la expresión,

$$\tau_p = \begin{cases} \frac{B}{(1-\alpha)} \left(\frac{1}{(1-\alpha_c)} - \frac{1}{(1-\alpha)} \right), & \alpha \leq \alpha_c \\ 0, & \alpha > \alpha_c \end{cases} \quad (14)$$

donde B es una constante de proporcionalidad de la tensión intergranular y α_c es la porosidad crítica.

El término Γ de transferencia de masa está definido como,

$$\Gamma_g = \frac{6(1-\alpha)}{d_p} \dot{r} \rho_p \quad (15)$$

donde \dot{r} es la velocidad de combustión y d_p el diámetro de la partícula. En este trabajo se ha considerado la siguiente expresión para la velocidad de combustión $\dot{r} = ap_g^n$ utilizada en el caso base del trabajo de Hoffman y Krier aunque también consideran la expresión $\dot{r} = b \left(\frac{T_p}{T_{p0}} \right)^m (p_g)^n$.

4. Métodos numéricos

El sistema de ecuaciones (Ec. 1-6) se puede escribir en forma vectorial

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = S(U) \quad (16)$$

donde U son las variables conservadas, $F(U)$ el vector de flujo físico y $S(U)$ el vector de términos fuentes.

$$U = \begin{bmatrix} \alpha \rho_g \\ \alpha \rho_g u_g \\ \alpha \rho_g E_g \\ (1 - \alpha) \rho_p \\ (1 - \alpha) \rho_p u_p \\ (1 - \alpha) \rho_p E_p \end{bmatrix}, \quad F(U) = \begin{bmatrix} \alpha \rho_g u_g \\ \alpha (\rho_g u_g^2 + p_g) \\ \alpha (\rho_g E_g + p_g) u_g \\ (1 - \alpha) \rho_p u_p \\ (1 - \alpha) (\rho_p u_p^2 + \tau_p) \\ (1 - \alpha) (\rho_p E_p + \tau_p) u_p \end{bmatrix}, \quad (17)$$

$$S(U) = \begin{bmatrix} \Gamma \\ p_g \frac{\partial \alpha}{\partial x} + \Gamma u_p - F_D \\ \Gamma \left(E_{chem}^g + \frac{u_p^2}{2} \right) - u_p \cdot F_D - \dot{Q} \\ -\Gamma \\ -\tau_p \frac{\partial \alpha}{\partial x} - \Gamma u_p + F_D \\ \Gamma \left(E_{chem}^p - \frac{u_p^2}{2} \right) + u_p \cdot F_D + \dot{Q} \end{bmatrix} \quad (18)$$

Obsérvese que los términos no conservativos que involucran derivadas espaciales de la fracción de huecos han sido incluidos en el término fuente.

Para aproximar soluciones del mismo utilizaremos un esquema en volúmenes finitos tal que el valor de las variables conservadas en cada instante es determinado de forma explícita mediante

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left[F_{j-\frac{1}{2}} - F_{j+\frac{1}{2}} \right] + \Delta t S_j^n \quad (19)$$

Para la evaluación de los flujos numéricos en las interfase se propone la utilización del esquema de Rusanov (1961) en el que el flujo numérico viene dado por un promedio de los flujos físicos calculados para cada celda adyacente para el instante anterior, corregido por un factor, que es proporcional a la diferencia en las variables conservadas de cada celda en el instante anterior, y una velocidad del orden de la velocidad de propagación de la perturbación, denotada S^+ . Así pues, el flujo numérico de Rusanov puede escribirse:

$$F_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (F_L + F_R) - \frac{1}{2} S^+ (U_R - U_L) \quad (21)$$

donde F_L es el flujo convectivo en la celda de la izquierda en el instante anterior, $F(U_j^n)$, y F_R el de la celda de la derecha, $F(U_{j+1}^n)$. La velocidad S^+ puede ser aproximada de varias formas, según el autor. En este trabajo se propone utilizar el máximo de los valores propios de la matriz jacobiana del vector de flujos del sistema de ecuaciones considerado. Este esquema numérico es sencillo y robusto. Numéricamente no es muy dispersivo y suele captar discontinuidades de una forma bastante limpia.

Los términos fuente son evaluados con el valor de las variables primitivas en el estado anterior y las derivadas espaciales de la fracción de huecos han sido aproximadas mediante

$$\frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\alpha_{j+1}^n - \alpha_{1,j-1}^n}{2\Delta x} \quad (22)$$

5. Resultados numéricos

El test que se plantea para estudiar la capacidad del modelo para caracterizar la combustión de mezclas densas de sólidos y gases es el propuesto por Hoffman y Krier (1980, 1981). Consiste en un tubo de combustión de 0.0762 m (3") de longitud. Las condiciones iniciales se describen en la Tabla 1, donde los subíndices g y p corresponden, respectivamente, a la fase gaseosa (gases de la combustión) y sólida (propulsante).

Tabla 1: Condiciones iniciales para el tubo de combustión según Hoffman y Krier (1980,1981).

α	$u_g = u_p$ (m/s)	$T_g = T_p$ (K)	p (Pa)
0.4	0	294	1.03×10^5

Se considerará un mallado de 500 celdas uniformes y un CFL = 0.1.

Los parámetros necesarios para definir las ecuaciones de cierre y caracterizar el estado termodinámico de las fases son:

Relación entre calores específicos es $\gamma_g = 1.252$ y $c_{v,g} = 1773.1$ J/(kg·K), el covolumen se considera $\eta_g = 1.078 \times 10^{-3}$ m³/kg.

La densidad del propulsante sólido y su calor específico son $\rho_p = 1910$ kg/m³ y $c_{v,p} = 1500$ J/(kg·K).

Los parámetros de la ley de combustión son el exponente $n = 0.9$ y $a = 3.32 \times 10^{-9}$ m/(s·Paⁿ).

Las partículas de propulsante son esféricas con diámetro $d_p = 0.101 \times 10^{-3}$ m. El calor de combustión es 5.4796×10^6 J/kg.

La constante de la tensión intergranular ha sido tomada de (Krier y Kerzele, 1979) y es $B = 48 \times 10^6$ Pa.

Porosidad crítica 0.2595.

Viscosidad inicial 4.45×10^{-5} kg/(m·s).

Los autores muestran el valor de distintas variables de interés tales como la porosidad, la presión y la temperatura del gas en diferentes instantes de tiempo (20, 40, 60 y 80 μ s).

En lo que se refiere al proceso de iniciación, en la bibliografía se han encontrados dos formas de iniciación más o menos realistas según el caso. Algunos autores plantean la iniciación del problema numérico suponiendo una presión y una temperatura en la zona de ignición y una transición con forma de rampa entre esta zona y el resto de la geometría del problema (Beckstead y Krier), en el caso de (Hoffman y Krier, 1980) se plantea esta opción, pero no se dan detalles de los valores impuestos. En (Hoffman y Krier, 1981), los autores dicen que asumen que una fracción de propulsante se quema iniciando el proceso de combustión. No se dan detalles de la cantidad de propulsante inicialmente quemado ni de las celdas consideradas.

En el estudio realizado se comparan estos dos modos de ignición artificial para iniciar el estudio numérico del test. En el primer caso se ha considerado una longitud de ignición arbitraria de 0.00508 m (0.2") y se plantea una rampa de 0.01778 m (0.5"). Se ha asumido el valor de $p_{ini,ign} = 99.28451 \times 10^5$ Pa y $T_{ini,ign} = 1865$ K. En el segundo caso se considera la misma longitud de ignición y que inicialmente se quema de forma isócara un 10% del propulsante existente en estas celdas lo cual se traduce en un incremento de la temperatura y la presión en dichas celdas.

A continuación, se muestran los resultados obtenidos para las variables más representativas, densidad del gas, presión del gas, velocidad de cada fase, temperatura de cada fase y fracción de huecos (Figura 1).

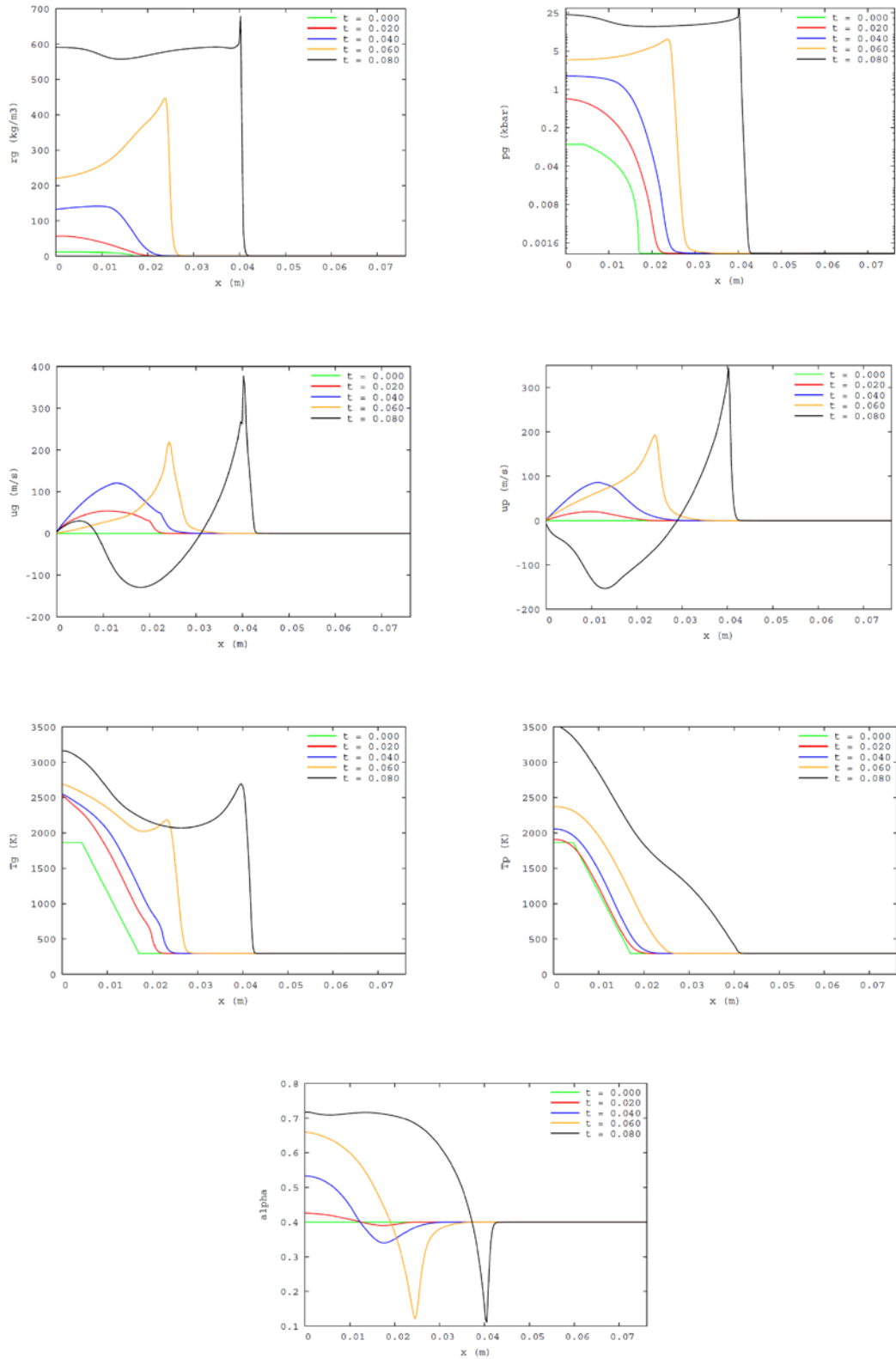


Figura 1. Distribución de las variables de interés del problema para diferentes instantes. De arriba abajo, de izquierda a derecha: densidad, presión, velocidad del gas, velocidad del sólido, temperatura del gas, temperatura del sólido y fracción de huecos.

Los resultados obtenidos son cualitativamente similares a los mostrados en la literatura. Se considera que diferencias son debidas al desconocimiento exacto del modo en el que se ha realizado la iniciación numérica del problema. En este sentido, en la Figura 2, se comparan los resultados obtenidos según el tipo de ignición seleccionado.

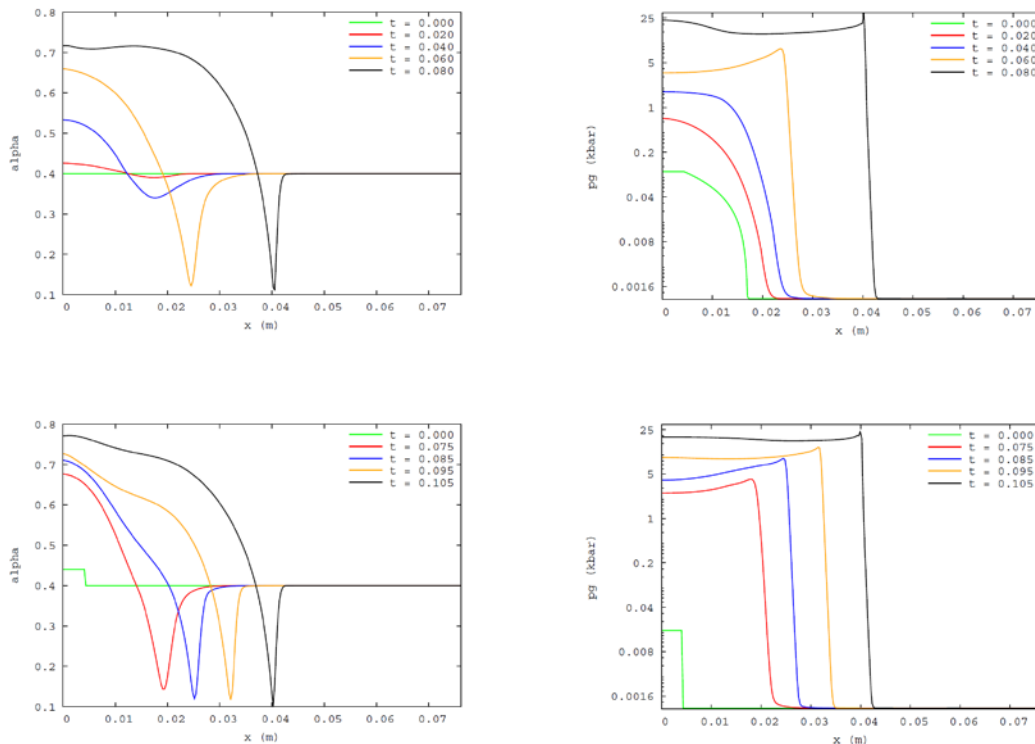


Figura 2. Arriba: ignición fijando una temperatura y una presión arbitrarias. Abajo: quemando un 10% del propulsante en las celdas consideradas.

Se observa que el modo de iniciación a través del cual se queman de partida un 10% del propulsante, si bien es más realista requiere más tiempo para alcanzar los niveles de presión alcanzados con el otro modo de iniciación.

6. Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado el modelo propuesto por Hoffmann y Krier (1980, 1981) para el estudio de problemas de combustión que involucran mezclas de sólidos y gases. Éste es un modelo bifásico separado en el que se considera una única presión, la del gas si bien la compactación de la fase sólida por debajo de un valor de la porosidad se introduce a través de un término que recuerda a una posible presión de la fase sólida que hemos llamado tensión intergranular. Se han aproximado soluciones al sistema de ecuaciones presentado mediante un esquema en volúmenes finitos. Se ha extendido el esquema de Rusanov para el cálculo de los flujos numéricos y se ha analizado el test descrito por los autores antes mencionados. Cualitativamente los resultados son satisfactorios y pensamos que este modelo podrá ser utilizado con éxito para la caracterización de la combustión del propulsante que contienen las unidades Base Bleed. Se han analizado dos formas de iniciación del problema numérico más o menos realistas. La validación futura de estos modelos con resultados experimentales permitirá identificar a medio plazo el modo de iniciación más adecuado.

7. Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado a través del Proyecto de Investigación “MODELIZACIÓN DE GENERACIÓN DE GASES PARA LA REDUCCIÓN DE LA

RESISTENCIA AERODINÁMICA” (Ref. IDI-20151011) financiado por el CDTI del Ministerio de Economía y Competitividad.

8. Referencias

- [1] HOFFMAN S.J., KRIER H. *Fluid mechanical processes of deflagration to detonation transition in beds of porous reactive solids*. Aeronautical and Astronautical Engineering Dep., University of Illinois at Urbana-Champaign, TR-AAE-80-2, UILU-Eng-80-0502, 1980.
- [2] HOFFMAN S.J. KRIER H. *Fluid Mechanics of Deflagration-to-Detonation Transition in Porous Explosives and Propellants*. AIAA Journal, 1981, num. 12, vol. 19, pp. 1571-1579.
- [3] KRIER H., KEZERLE J.A. *A separated two-phase flow analysis to study deflagration-to-detonation transition (DDT) in granulated propellant*. 17th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1979.
- [4] RUSANOV, V. *Calculation of Interaction of Non-Steady Shock Waves with Obstacles*. J. Comput. Math.Phys. USSR, 1961, vol. 1, pp. 267-279.