



Departamento de
Ingeniería Mecánica
Universidad de Concepción

Confección de un modelo CFD para el análisis del comportamiento de la dinámica de gases al interior de un motor de combustible sólido

POR

Matías Raimundo Tomás Quintana Rebolledo

Memoria de Título presentada a la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Concepción para optar al título profesional de Ingeniero Civil Aeroespacial

Profesor patrocinante:
PhD. Pablo Eduardo Cornejo Olivares

Marzo 2025
Concepción, Chile

©2024 Matías Raimundo Tomás Quintana Rebolledo

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento

Agradecimientos

A mi familia, que nunca dejó de apoyarme en todos mis años de universidad.

A mis amigos, que dejaron en mí los mejores recuerdos de esta etapa.

Al GIP, por permitirme formarme profesionalmente desde el 2019.

A todos mis compañeros y profesores, que de alguna u otra forma son parte de este logro.

A Valentina: tu paciencia y cariño me permitió descansar en los momentos más complejos.

El propósito siempre estará en el camino y no en la meta.

Resumen

La presente investigación se enmarca en el desarrollo de una mejora para la modelación de combustión de propelente sólido al interior de un motor de cohete para el Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Concepción. La estrategia empleada históricamente consiste en desacoplar el problema, utilizando un modelo 0-dimensional para la cámara de combustión y CFD para la tobera. En cambio, aquí se propone resolver el problema acoplado, representando la combustión sólida como un fenómeno fluido-dinámico únicamente (sin reacciones químicas). Usando un volumen de control 2D axisimétrico, se empleó una malla fija y otra Overset para la simulación del problema usando ANSYS Fluent. Los resultados de ambas simulaciones son casi idénticos, a excepción del tiempo de cómputo que es 125% mayor con la malla Overset. Adicionalmente, se programó en Python la combustión de Nitrato de Potasio y Dextrosa (KNDX) usando un modelo de composita y otro de quemado erosivo. El modelo de composita describe correctamente la combustión de KNDX al compararla con datos experimentales, por lo que será usado en trabajos futuros para representar la regresión del grano.

Palabras Clave:

CFD, modelo de combustión sólida, propelente sólido, tasa de quemado

Abstract

The work presented herein aims to improve the Mechanical Engineering Department's current model for solid propellant combustion inside a solid rocket motor. Historically, the strategy has been to de-couple the problem, employing a 0-dimensional model on the combustion chamber and CFD on the nozzle. Here, a coupled approach is proposed instead, depicting solid propellant combustion solely as a fluid dynamic's phenomenon (without chemical reactions). A 2D axisymmetrical control volume with a fixed mesh and another one with an overset mesh were developed to simulate the problem in ANSYS Fluent. Results from both simulations show almost perfect agreement, the exception being the calculation time which was 125% longer with the overset mesh approach. Additionally, combustion of Potassium Nitrate and Dextrose was coded in Python using a composite propellant combustion model and an erosive burning one. The composite propellant combustion model properly represents KNDX combustion when compared to experimental data, hence future research will employ this model to describe grain regression.

Keywords:

burn rate, CFD, solid combustion model, solid propellant

Contenidos

Lista de Figuras	1
Lista de Tablas	4
Acrónimos	5
Nomenclatura	5
Letras Griegas	6
Sub-índices	6
1 Introducción	7
1.1 Contexto del proyecto	7
1.2 El problema de la combustión sólida	7
1.3 Hipótesis	10
1.4 Objetivos	10
1.4.1 Objetivo General	10
1.4.2 Objetivos Específicos	10
2 Metodología	11
3 Marco Teórico	13
3.1 La Onda de Combustión	13
3.1.1 Curva de Hugoniot y puntos de Chapman-Jouguet	13
3.1.1.1 Onda de Deflagración	14
3.1.2 Modelo Matemático de la Onda de Combustión	15
3.1.2.1 Ecuación de energía para la fase sólida	15
3.1.2.2 Balance de flujos para la interfaz gas-sólido	16
3.1.2.3 Ecuaciones de continuidad para la fase gaseosa	17
3.1.2.4 Ecuaciones de tiempo característico	18
4 Estado del Arte	19
4.1 Modelos 1D de la Onda de Combustión	19
4.1.1 Modelo dp/dt	19
4.1.2 Modelo de Descripción de Llama	20
4.1.3 Modelo de Zel'dovich	21
4.2 Tasa de quemado	22
4.2.1 Quemado erosivo	23
4.2.1.1 Lenoir-Robillard, 1957	24
4.2.1.2 Ma et al. 2020	25
4.3 Modelos de combustión para composita	26
4.3.1 Cai et al., 2008	27
4.3.2 Cao et al., 2015	28
4.3.3 Chen et al., 2024	29
5 Optimización de Modelo CFD para la Dinámica de Gases	31
5.1 Objetivo	31
5.2 Caso de referencia	31

5.3	Primera implementación en ANSYS Fluent	31
5.3.1	Dominio y malla	31
5.3.1.1	Malla Overset para el frente de quemado	32
5.3.2	Fenómenos modelados	33
5.3.3	Condiciones de Borde	33
5.3.4	Esquema de integración y precisión	35
5.3.5	Resultados parciales del modelo	35
5.3.5.1	Deficiencias del modelo	36
5.4	Optimización computacional del modelo	37
5.4.1	Discusión del modelo optimizado	42
5.4.2	Primera simulación con modelo optimizado: dificultades	42
5.4.3	Segunda simulación con modelo optimizado	44
6	Modelo Computacional de Combustión de KNDX	52
6.1	Modelación de combustión de KNDX con modelo de composita	52
6.1.1	Reproducción de resultados de deflagración de AP	52
6.1.2	Modelación de combustión de KNDX	53
6.2	Modelación de combustión de KNDX con modelo de quemado erosivo	54
7	Conclusiones	59
	Anexo A Planos del BEM	63
	Anexo B Códigos de Python	65
B.1	Adición de propelentes a la base de datos de CEA	65
B.2	Aproximaciones polinómicas	65
B.2.1	Presión registrada en la prueba estática de Rocha	65
B.2.2	Tasa de quemado estacionaria de Nakka para KNDX	65
B.3	Implementación del modelo de combustión de Cai et al., 2008	65
B.4	Implementación del modelo de combustión de Ma et al., 2020	72
	Anexo C Especies Modeladas en Fluent	79
C.1	Fracciones molares en el modelo anterior	79
C.2	Fracciones molares en el modelo final	79
	Anexo D Expresiones de Fluent	80
D.1	Flujo másico en modelo anterior	80
D.2	Flujo másico en modelo final	80
D.3	Temperatura	80
D.4	Movimiento de la malla Overset en modelo anterior	80
D.5	Movimiento de la malla Overset en modelo final	80

Lista de Figuras

Figura 1.1	Modelo de combustión sólida en el DIM [1, 2, 3].	7
Figura 1.2	Perfil de temperatura 1D durante la combustión de un grano de propelente.	9
Figura 1.3	Representación gráfica y matemática de la combustión de propelente sólido.	9
Figura 2.1	Estructura de la implementación en Python de los métodos de combustión.	12
Figura 3.1	Propagación de la onda de combustión (<i>Combustion wave propagation</i> [4]).	13
Figura 3.2	Representación gráfica y matemática de la combustión de propelente sólido.	14
Figura 3.3	Perfil de temperatura 1D durante la combustión de un grano (<i>One-dimensional temperature profiles in the burning of a solid propellant</i> . [5])	15
Figura 3.4	Balance de flujos en la zona reactiva (<i>Balance of mass, species and energy fluxes at the gas-solid interface</i> [5])	16
Figura 4.1	Tasa de quemado de composita con diferente % de masa de Perclorato de Amonio (AP) (<i>Burning rates of three AP-HTPB composite propellants at low pressures below 1 MPa</i> . [4]).	23
Figura 4.2	Razón erosiva para propelentes de alta y baja energía, en comparación con uno con energía de referencia para distintas magnitudes de velocidad de flujo cruzado [4].	24
Figura 4.3	Modelo de combustión de Cai et al. [6]	27
Figura 4.4	Modelo de combustión de Cao et al. [7] (<i>Combustion model for AP/HTPB composite propellant</i>).	28
Figura 5.1	Resultados de presión y empuje del motor BEM durante una prueba estática el 22 de octubre de 2018 [8].	31
Figura 5.2	Extensión del dominio utilizado, en unidades relativas al radio (R) de la salida de la tobera.	32
Figura 5.3	Malla generada en la cámara de combustión.	32
Figura 5.4	Vista general de la malla, con sus condiciones de borde.	32
Figura 5.5	Extensiones de la malla <i>Overset</i>	33
Figura 5.6	Malla <i>Overset</i> y condiciones de borde empleadas.	33
Figura 5.7	Malla de fondo y <i>Overset</i> sobrepuestas en la cámara de combustión.	33
Figura 5.8	Condiciones de borde obtenidas a partir de SRM de Nakka [9].	34
Figura 5.9	Comparación de contornos de presión estática en $t = 0.127 s$	36
Figura 5.10	Comparación de contornos de velocidad axial en $t = 0.127 s$	36
Figura 5.11	Comparación entre datos experimentales de Rocha [8] y los obtenidos en la simulación con malla <i>Overset</i>	36
Figura 5.12	Celdas huérfanas en la zona convergente de la tobera.	37
Figura 5.13	Malla <i>Overset</i>	37

Figura 5.14 Malla de fondo.	38
Figura 5.15 Malla de fondo y Overset superpuestas, vista con su simetría axial y con 9816 elementos en total.	38
Figura 5.16 Sensibilidad de variables en el estudio 1.	38
Figura 5.17 Contornos de presión en el estudio 1.	39
Figura 5.18 Vectores de velocidad en el estudio 1.	39
Figura 5.19 Valores de y^+ obtenidos en el estudio 1.	39
Figura 5.20 Influencia del tamaño de paso de tiempo sobre la presión estática a la salida de la tobera.	41
Figura 5.21 Influencia del tamaño de paso de tiempo sobre la velocidad axial a la salida de la tobera.	41
Figura 5.22 Influencia del tamaño de paso de tiempo sobre el empuje generado.	42
Figura 5.23 Modificaciones a la condiciones de borde de la simulación.	43
Figura 5.24 Malla de fondo y Overset modificadas, con 39183 elementos en total.	43
Figura 5.25 Contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.1$ s.	45
Figura 5.26 Detalle de la tobera de los contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.1$ s.	45
Figura 5.27 Contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.35$ s.	45
Figura 5.28 Detalle de la tobera de los contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.35$ s.	46
Figura 5.29 Contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.7$ s.	46
Figura 5.30 Detalle de la tobera de los contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.7$ s.	46
Figura 5.31 Presión a lo largo de la tobera en distintos instantes de tiempo en el caso de la malla fija.	47
Figura 5.32 Presión a lo largo de la tobera en distintos instantes de tiempo en el caso de la malla overset.	47
Figura 5.33 Contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.1$ s.	48
Figura 5.34 Detalle de la tobera de los contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.1$ s.	48
Figura 5.35 Contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.35$ s.	48
Figura 5.36 Detalle de la tobera de los contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.35$ s.	48
Figura 5.37 Contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.7$ s.	49
Figura 5.38 Detalle de la tobera de los contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.7$ s.	49
Figura 5.39 Contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.1$ s.	49

Figura 5.40 Detalle de la tobera de los contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.1$ s.	49
Figura 5.41 Contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.35$ s.	50
Figura 5.42 Detalle de la tobera de los contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.35$ s.	50
Figura 5.43 Contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.7$ s.	50
Figura 5.44 Detalle de la tobera de los contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.7$ s.	50
Figura 5.45 Evolución en el tiempo de la presión total en el mamparo superior del motor (cámara de combustión) y error asociado.	51
Figura 5.46 Evolución en el tiempo del flujo másico y presión estática a la salida de la tobera.	51
Figura 5.47 Evolución en el tiempo del empuje generado y la velocidad axial máxima a la salida de la tobera.	51
Figura 6.1 Extensión del volumen de control ocupado para modelar la combustión de KNDX.	52
Figura 6.2 Tasa de quemado ajustada a datos experimentales de Cai [10].	52
Figura 6.3 Comportamiento de la tasa de quemado.	54
Figura 6.4 Tasa de quemado de KNDX calculada con el modelo de Cai et al. [6].	54
Figura 6.5 Variables termodinámicas de los gases al interior de la cámara.	55
Figura 6.6 Combustión de KNDX con el modelo de Cai et al. [6], vista en 2D.	55
Figura 6.7 Combustión de KNDX sin inclusión de quemado erosivo.	56
Figura 6.8 Combustión de KNDX con inclusión de quemado erosivo.	57
Figura 6.9 Combustión de KNDX con inclusión de quemado erosivo (cont.).	57
Figura 6.10 Tasas de quemado erosiva y normal.	58
Figura 6.11 Tasa de quemado máxima y área de quemado.	58
Figura A.1 Vista general del motor BEM del GIP.	63
Figura A.2 Vista en detalle del motor BEM del GIP.	64

Lista de Tablas

Tabla 3.1	Características termofísicas de las ondas de deflagración y combustión (<i>Thermophysical characteristics of deflagration and detonation waves</i> . [4]).	14
Tabla 5.1	Condiciones de borde del problema.	34
Tabla 5.2	Parámetros temporales de la simulación.	35
Tabla 5.3	Resultados del estudio 2 de sensibilidad.	40
Tabla 5.4	Resultados del estudio 3 de sensibilidad.	41
Tabla 6.1	Parámetros empleados en el modelo de combustión de KNDX.	53
Tabla 6.2	Parámetros de combustión de KNDX empleados en el modelo.	56
Tabla C.1	Especies químicas modeladas.	79
Tabla C.2	Especies químicas modeladas.	79

Acrónimos

AP	Perclorato de Amonio
BEM	<i>Ballistics Engine Motor</i>
CEA	<i>Chemical Equilibrium and Applications</i>
CFD	Dinámica de Fluidos Computacional
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
EDP	Ecuaciones Diferenciales Parciales
GIP	Grupo de Interés en Propulsión de la Universidad de Concepción
HTPB	Polibutadieno Terminado en Hidroxilo
KNDX	Nitrato de Potasio y Dextrosa
NEPE	<i>Nitrate Ester Plasticized Polyether</i>
O/F	Oxidante/Combustible
ProPEP	<i>Propellant Evaluation Program</i>
SRM	Motor de Propelente Sólido

Nomenclatura

\dot{m}	Flujo másico
A	Factor pre-exponencial en la Ley de Arrhenius
C	Calor específico
D	Difusividad másica, Diámetro
E_a	Energía de activación
G	Flujo másico por unidad de superficie
L	Largo
M	Número de Mach
Nu	Número de Nusselt
Pr	Número de Prandtl
Q	Calor transferido
R_u	Constante universal de gases
Re	Número de Reynolds
S	Término fuente
T	Temperatura
V	Volumen, Velocidad de difusión
Y	Fracción másica
a	Coefficiente de quemado en la correlación de pirólisis (Ley de Vieille)
e	Energía interna
f	Factor de fricción de Darcy
h	Entalpía específica, Coeficiente convectivo con transpiración
h_0	Coeficiente convectivo sin transpiración

n	Exponente de presurización en la correlación de pirólisis (Ley de Vieille)
p	Presión
q	Calor de formación por unidad de masa
r	Tasa de quemado del propelente, Radio
t	Tiempo
u	Velocidad radial

Letras Griegas

$\dot{\omega}$	Tasa de generación de especies
α	Difusividad térmica
β	Coefficiente de ajuste en modelo de quemado erosivo de Lenoir-Robillard, Energía de activación adimensional
ρ	Densidad volumétrica
λ	Conductividad térmica
γ	Razón de calores específicos (C_P/C_V)
δ	Espesor de la onda de combustión
ϕ	Gradiente de temperatura
ε	Fracción molar, Razón erosiva, Rugosidad superficial
τ	Tiempo característico
μ	Viscosidad dinámica

Sub-índices

b	Etapa transiente
c	Fase condensada
f	Llama
g	Fase gaseosa
i	Inicial, Contador, Interior
o	Estado estacionario
p	Propelente
rad	Radiación
s	Superficie del sólido

1 Introducción

1.1 Contexto del proyecto

El Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Concepción ha tenido interés en la coherencia experimental desde hace décadas, interés que se ha visto incrementado y otorgado un carácter más práctico desde la creación de la carrera Ingeniería Civil Aeroespacial, en el año 2002. Hoy en día, el principal acercamiento que tiene el Departamento y la Universidad hacia la coherencia experimental es a través del Grupo de Interés en Propulsión de la Universidad de Concepción (GIP). Si bien este grupo ha alcanzado hitos relevantes desde su formación en 2007, la construcción y uso regular de un banco de ensayos propio para un Motor de Propelente Sólido (SRM) resulta compleja para un grupo de estudiantes, dada la vigente normativa legal.

Con miras de extender la capacidad de prueba de SRM del Departamento de Ingeniería Mecánica (DIM), es que en 2023 se realizó la compra de un banco de ensayos que permitirá probar específicamente este tipo de motores y cuya instalación está actualmente en curso. Especificaciones técnicas, prestaciones y material fotográfico de este banco es información reservada, que el autor no dispone.

Para hacer un uso eficiente de los recursos necesarios para llevar a cabo una prueba estática en este banco es fundamental ser capaces de realizar simulaciones que permitan adelantarse de forma confiable a los resultados de las pruebas *in situ*.

1.2 El problema de la combustión sólida

Un *sistema* motor sólido se constituye de una cámara de combustión (sellada en un extremo) y una tobera. La idea de estudiar estos componentes de forma desacoplada es común debido a lo complejo que resulta modelar la combustión dentro de la cámara. Históricamente[1, 2, 3], en el DIM la estrategia de modelación consiste en ocupar un modelo 0-dimensional para obtener el estado termodinámico de los productos de combustión del propelente en la cámara de combustión para una cierta presión de trabajo. Luego, los datos obtenidos se ocupan como condición de borde para simular el flujo de gases en estado estacionario en la tobera usando CFD, como se ve en la Figura 1.1.

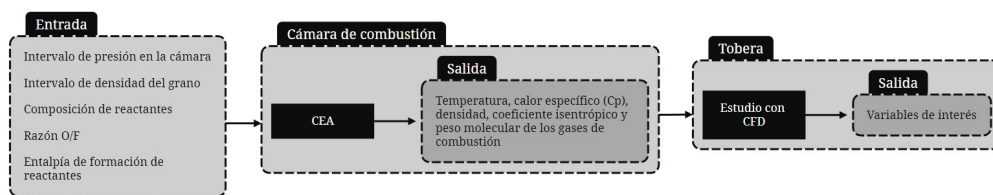


Figura 1.1 Modelo de combustión sólida en el DIM [1, 2, 3].

Dentro de la cámara de combustión, la combustión del propelente sólido (denominado grano de propelente, o simplemente grano) puede ocurrir de forma radial, como se muestra en la Figura 1.3a, axial (en la dirección x de la Figura 1.3a), o ambas, de acuerdo a los requerimientos de diseño. La diferencia entre cada tipo de quemado se reflejará en la forma de la curva de presión dentro de la cámara de combustión; un quemado puramente radial produce una forma progresiva (monótona creciente) debido a que el área de quemado aumenta continuamente conforme se quema el grano.

La combustión sólida es un proceso complejo, en comparación con aquella gaseosa o líquida. En la combustión sólida, la reacción química que se desencadena (sublimación, fusión y evaporación, principalmente) ocurre de forma progresiva a través de las superficies expuestas a la ignición inicial y posterior combustión continua, pero no se excluye la posibilidad de reacciones sub superficiales. Las superficies que se encuentren expuestas se les denomina el *frente de quemado*. Para estudiar la combustión de propelente sólido, esta se separa, por lo general, en varias etapas conectadas entre sí y que en conjunto ocurren en la escala de las décimas de segundo. La Figura 1.3b representa esto último, permitiendo identificar primero una etapa de inducción, en la que se acciona una carga iniciadora (explosivo de baja potencia), pero aún no comienza la reacción (el retraso corresponde al tiempo en el que se alcanza la energía de activación de la carga iniciadora); la etapa de propagación de la llama, en la que los gases a alta temperatura que se liberan desde el frente de quemado se esparcen sobre la o las superficies expuestas; la etapa de quemado erosivo, en la que ocurre un aumento drástico de presión dentro de la cámara debido a los gases que se liberan a alta velocidad en relación al diámetro del núcleo del grano. Este flujo de gases aumenta la transferencia de calor entre los gases y el frente de quemado, provocando un aumento en la tasa de quemado y, por ende, en la presión dentro de la cámara; y, por último, la etapa de estado estacionario, en la cual se alcanza una combustión estable en el tiempo. Esta última etapa puede no ser estacionaria (pero sí estable), como en el caso de un quemado progresivo.

Las etapas de inducción, de propagación de la llama y la primera parte de la de quemado erosivo (hasta *Chamber Filling* en la Figura 1.3b) se agrupan dentro de lo que se conoce como la ‘transiente de ignición’. Del estudio específico de la transiente de ignición de propelente sólido se desprende un parámetro que es fundamental para la caracterización de un grano de propelente y, por ende, necesario para el diseño adecuado de la cámara de combustión. Este parámetro es la tasa de quemado instantánea, r_b , y su obtención se puede lograr tras resolver un complejo sistema de Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP), cuya formulación *no* es generalizable para cualquier propelente sólido, sino que depende de su composición química, su estado físico (si es un cilindro macizo o si es granulado, como la pólvora) y del conocimiento que se tenga sobre su comportamiento, si se dispone de datos experimentales. El sistema de EDP completo representa la *onda de combustión*, que es la zona que separa los gases en reacción del gas inicial o aún sin reaccionar. La teoría detrás de la onda de combustión se encuentra cubierta por Kuo [5] y Kubota [4] y son sus descripciones las que se utilizan con frecuencia dentro de la literatura. La Figura 1.2 representa el perfil de temperatura durante la combustión de un grano de propelente y es la representación desde la cual se procede a establecer el sistema de EDP.

Las diferentes composiciones químicas de propelente sólido se pueden categorizar según cómo esté unido el combustible al oxidante a nivel molecular. De aquí, se distinguen los propelentes cuyos agentes (combustible y oxidante) están unidos por un enlace químico, de los propelentes cuyos agentes se encuentran unidos mecánicamente, usando, por ejemplo, un aglutinante externo. Un tipo de propelente sólido de agentes unidos mecánicamente es la composita o propelente composita. Este propelente se utiliza casi únicamente en el sector militar y consiste en un oxidante cristalino (comúnmente AP) y un combustible plástico (por lo general, Polibutadieno Terminado en Hidroxilo (HTPB)). Una vez que comienza la descomposición de estos agentes se generan gases de alta temperatura (>2000 K) en períodos de tiempo cortos.

El propelente sólido *Rocket Candy*, que se compone de un oxidante cristalino, como Nitrato de Potasio, y un combustible en base a azúcar, es un tipo especial de propelente sólido que puede considerarse como composita (a pesar de no ser formalmente reconocido como uno) ya

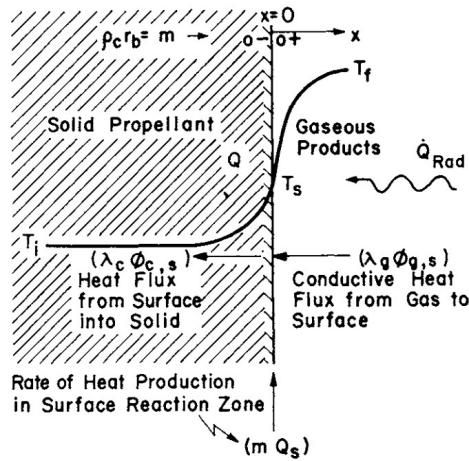
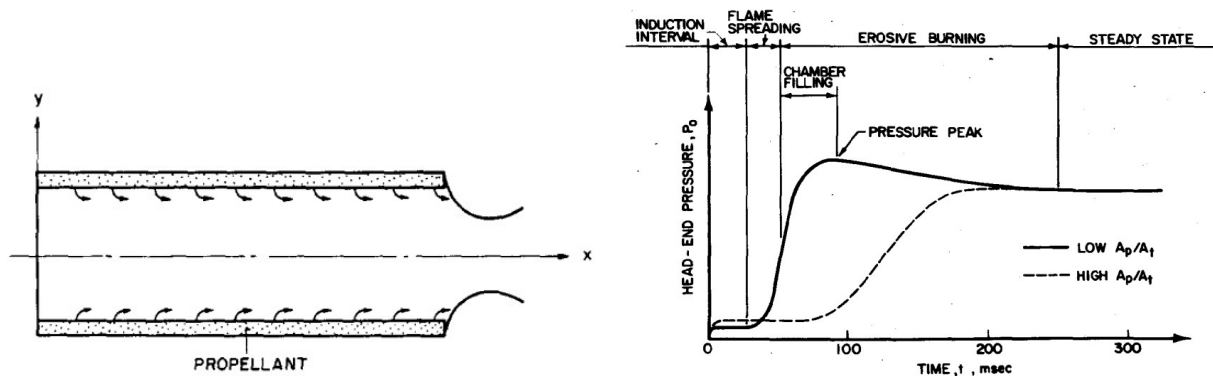


Figura 1.2 Perfil de temperatura 1D durante la combustión de un grano de propelente.

que la unión entre el combustible y el oxidante ocurre gracias a la capacidad aglutinante del azúcar derretida, que recubre las partículas del oxidante sin enlazarse químicamente con él. El propelente KNDX, compuesto de Nitrato de Potasio y Dextrosa es un propelente *Rocket Candy* empleado en cohetaría experimental [9], debido a la relativa facilidad de adquisición de los insumos necesarios y un proceso de fabricación de carácter similar. El GIP ha llevado a cabo ensayos estáticos con motores *Ballistics Engine Motor* (BEM) usando granos de KNDX, por lo que se cuenta con información sobre su combustión.



(a) Combustión de propelente sólido en un motor [11] (*Schematic diagram of a solid-propellant starting transient of HVT motors (low A_p/A_t ,) rocket motor*). (b) Etapas de la combustión transiente (*Typical starting transient of HVT motors (low A_p/A_t ,) compared with that of motors having high A_p/A_t [12]*).

Figura 1.3 Representación gráfica y matemática de la combustión de propelente sólido.

Así, en esta investigación se buscará desarrollar una mejora al modelo actual de combustión de propelente sólido del DIM, anexando ahora la cámara de combustión al volumen de control y reduciendo los fenómenos que ocurren dentro de ella a unos netamente fluido-dinámicos. Los criterios que se emplearán para determinar si el modelo nuevo es una mejora son 1) la precisión de los resultados, en relación a los experimentales; 2) el tiempo de cómputo del modelo; y 3) la versatilidad del modelo para adaptarse a distintas configuraciones del propelente. Los resultados del modelo se compararán con los que ha obtenido el GIP de sus pruebas estáticas.

1.3 Hipótesis

El empleo de un modelo de combustión para propelente composita aplicado a propelente KNDX representa correctamente la regresión del grano durante la transiente de ignición al interior de la cámara de combustión de motores sólidos.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Confeccionar un modelo de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) que represente la dinámica de gases liberados durante la transiente de ignición de propelente KNDX al interior de un conjunto cámara de combustión-tobera.

1.4.2 Objetivos Específicos

1. Optimizar el tiempo de cómputo de un modelo CFD de la dinámica de gases durante la etapa de combustión estable de KNDX al interior de un motor de referencia.
2. Comparar los resultados del modelo CFD al usar una malla estática y otra móvil.
3. Desarrollar un modelo de combustión que describa la tasa de quemado del propelente KNDX durante la transiente de ignición.
 - 3.1 Presentar la información experimental disponible y las suposiciones necesarias para la construcción del modelo.
 - 3.2 Programar en Python el modelo de combustión.
 - 3.2.1 Definir el tiempo físico de simulación y simular.
 - 3.2.2 Ajustar los parámetros o coeficientes del modelo.
 - 3.2.3 Comparar resultados obtenidos con los experimentales.

2 Metodología

Dentro de este proyecto se hace uso de un modelo CFD desarrollado anteriormente por el autor [13]. Este modelo CFD tenía como objetivo abordar la combustión sólida desde el punto de vista fluido dinámico a través de la modelación de la dinámica de gases de combustión liberados desde el frente de quemado del grano, pero considerando la información asociada a la etapa estable de esta, como se presentó en la Figura 1.3b. El modelo hace uso de una malla *Overset* móvil para representar una regresión puramente radial del grano, mientras que una segunda malla *Background* estática contiene las extensiones y geometría del dominio y de un motor de referencia, respectivamente. El dominio es axisimétrico y contiene tanto el sistema motor como un dominio exterior. Los fenómenos modelados son la turbulencia con un modelo $k-\varepsilon$ Realizable y *Non-equilibrium wall functions*; transporte de especies sin reacciones químicas ni difusión térmica; y la ecuación de energía. Se incluyen efectos de compresibilidad para los gases.

El primer Objetivo Específico (OE) de este proyecto se alcanza al tomar el modelo CFD mencionado y buscar maximizar su eficiencia computacional (minimizar el tiempo de cómputo) a través de diversos análisis de sensibilidad. Monitoreando variables de presión al interior de la cámara y velocidad de gases a la salida de la tobera, 1) se analizará la influencia de la cantidad de elementos de la malla de fondo sobre las variables. Este análisis tiene un requisito adicional y es que el valor de y^+ debe mantenerse siempre dentro del rango aceptable para el modelo de turbulencia $k-\varepsilon$ Realizable, esto es, entre 30 y 300. Este requisito se fija para que los resultados sean físicamente correctos ($y^+ < 300$) y que al mismo tiempo no se esté refinando innecesariamente la malla ($y^+ < 30$); 2) se analizará la influencia de los distintos esquemas de integración y orden de métodos numéricos empleados sobre las variables. Conociendo cómo funcionan los esquemas de integración explícitos e implícitos, es esperable que para este tipo de problema un esquema completamente implícito (espacial y temporal) sea la mejor opción, ya que estos esquemas son incondicionalmente estables en relación al paso de tiempo. El orden de los métodos numéricos se revisará con cuidado, puesto que es necesario encontrar un equilibrio entre la eficiencia computacional y la precisión de los resultados; y 3) se analizará el tamaño de paso de tiempo máximo que se puede emplear sin que los resultados diverjan. Se considerará que los resultados divergen si las variables monitoreadas (y no los residuales) se alejan de los valores obtenidos para un instante de tiempo particular usando pasos de tiempo más pequeños. Asimismo, se estudiará la eficiencia de usar residuales con un criterio de convergencia absoluto/relativo, en comparación con un criterio absoluto. Más detalles sobre este último punto se entregarán en la sección correspondiente.

El segundo OE se alcanza al usar el modelo CFD optimizado para simular el tiempo total de combustión de un caso de referencia usando dos configuraciones: 1) sin usar la malla *Overset* (es decir, toda la malla es estática) y fijando la distancia desde el frente de quemado al eje de simetría igual al radio de la cámara de combustión, y 2) usando la malla *Overset* y otorgándole movimiento radial, con el fin de comparar los resultados de las variables monitoreadas y el tiempo de cómputo de ambas simulaciones.

Por último, el tercer OE requiere primero presentar el estado del arte de modelos de combustión que se encuentran en la literatura. La literatura principal que guía este proyecto son los trabajos de Kuo [5], Kubota [4], López [14] y François [15], quienes han recopilado la teoría [5, 4] y resuelto numéricamente [14, 15] distintos modelos de combustión uni/bidimensionales. El estado del arte se concluye seleccionando dos modelos de combustión, para programar su resolución en Python. Un modelo se denomina químico, ya que modela la tasa de quemado

incluyendo el calor generado/requerido por la combustión/descomposición del oxidante y el combustible. El otro modelo se denomina erosivo, puesto que modela la tasa de quemado como la suma de la tasa de quemado estacionaria (que proviene de mediciones en Bombas de Crawford) más la tasa de quemado erosiva, que se estima principalmente según el aumento en la transferencia de calor desde los gases hacia el frente de quemado debido a la velocidad de los gases sobre este. En la Figura 2.1 se presenta la estructura que seguirá el programa.

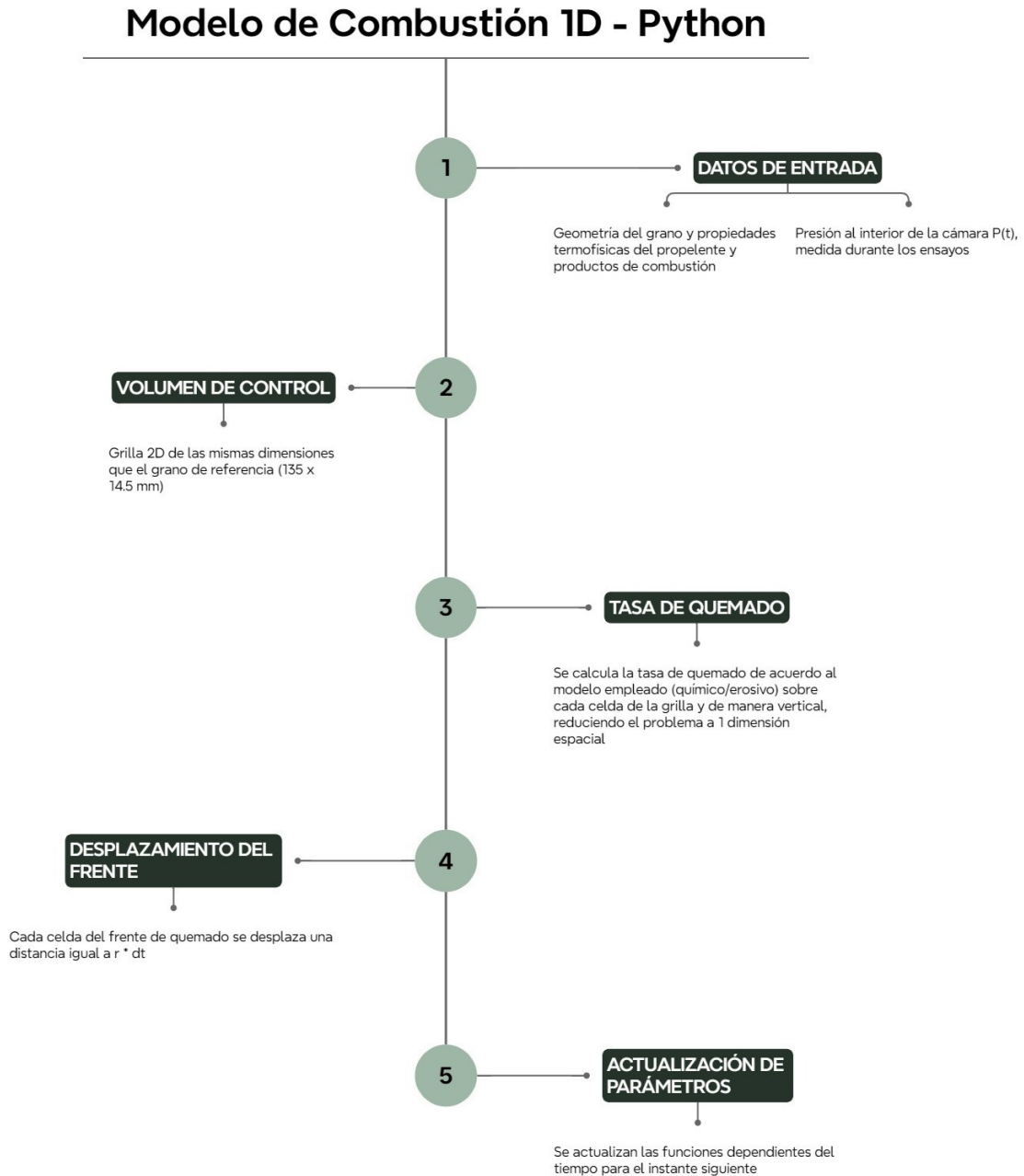


Figura 2.1 Estructura de la implementación en Python de los métodos de combustión.

3 Marco Teórico

3.1 La Onda de Combustión

Si a un material energético se le suministra el calor suficiente para que sus agentes (combustible/oxidante) alcancen la temperatura de descomposición o gasificación, entonces se desencadenarán reacciones endotérmicas y exotérmicas en y sobre la superficie del grano [4]. Los gases liberados reaccionarán formando productos de descomposición y generando calor. Si la fuente de calor inicial se remueve y este proceso continúa, entonces se dice que comenzó la combustión del material energético. En la superficie del material estarán ocurriendo reacciones de cambio de fase (fusión, descomposición, sublimación y gasificación [4]) hasta que este se consuma por completo. Para un observador que se encuentre alineado con la posición inicial del frente de quemado previo a iniciar la combustión, este notaría que los gases calientes generados por las reacciones se desplazarían por difusión másica y térmica hacia las regiones que tienen gases cuya combustión aún no comienza (que, además, están estáticos). La región que está entre los gases en combustión y los gases sin combustionar se denomina la Onda de Combustión. La Figura 3.1 ilustra este proceso.

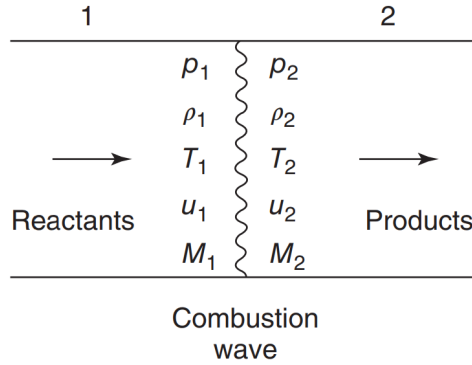


Figura 3.1 Propagación de la onda de combustión (*Combustion wave propagation* [4]).

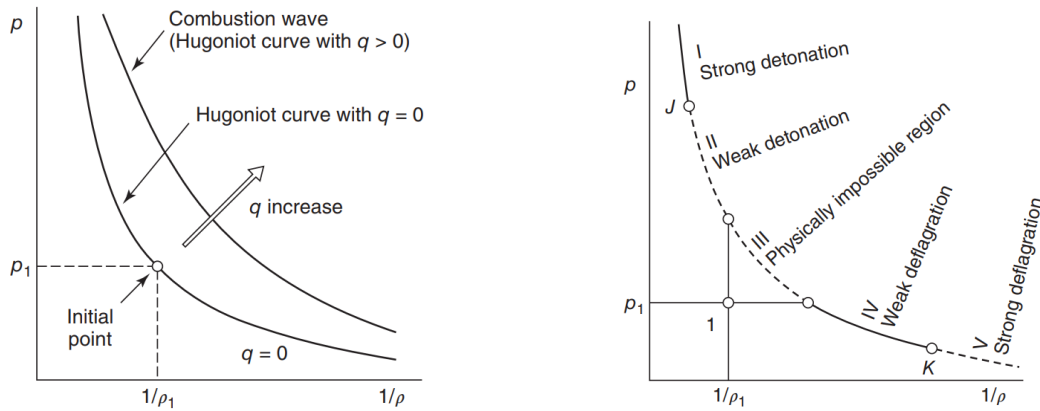
3.1.1 Curva de Hugoniot y puntos de Chapman-Jouguet

Al combinar las Ecuaciones 9-11 de la Sección 3.1.2, se obtiene lo que se conoce como la Ecuación de Rankine-Hugoniot [4]:

$$e_2 - e_1 = \frac{1}{2}(p_1 + p_2)\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right) + q \quad (1)$$

Donde q es el calor de formación por unidad de masa (generado por las reacciones químicas), e es la energía interna, ρ es la densidad de los gases y p , la presión. Al graficar la Ecuación 1 en términos de $1/\rho$ y p se obtiene la curva de Hugoniot [4], que permite diferenciar dos tipos de onda de combustión: la onda de detonación y la onda de deflagración. De forma general, en la Figura 3.2 se hace uso de la curva de Hugoniot (Figura 3.2a) para separar las características de las ondas de detonación de las de deflagración (Figura 3.2b). La relación entre las características termofísicas de los reactivos y productos en las ondas de detonación y las ondas de deflagración se presenta en la Tabla 3.1. Para diferenciar la velocidad de propagación de la onda de combustión en ambas, a la velocidad de la onda de deflagración se le llama *rapidez de la llama*, mientras que a la de la onda de detonación se le llama *velocidad de detonación* [4].

A los puntos J y K de la curva de Hugoniot se les conoce como puntos de Chapman-Jouguet y representan la velocidad mínima y máxima, respectivamente, de la propagación de la onda de combustión con respecto al gas sin combustionar (estático).



(a) Curva de Hugoniot (*Hugoniot curve for a combustion wave* [4]).

(b) Identificación de ondas de deflagración o detonación usando la curva de Hugoniot (*Regions of detonation and deflagration on the Hugoniot curve*. [4]).

Figura 3.2 Representación gráfica y matemática de la combustión de propelente sólido.

Tabla 3.1 Características termofísicas de las ondas de deflagración y combustión (*Thermophysical characteristics of deflagration and detonation waves*. [4]).

	Deflagración	Detonación
p_2/p_1	< 1	> 1
ρ_2/ρ_1	< 1	> 1
T_2/T_1	> 1	> 1
u_2/u_1	> 1	< 1
M_1	< 1	> 1
M_2	< 1	< 1

La combustión de propelente sólido para cohetes produce una onda de combustión deflagrante, de modo que la información que se presenta a continuación tiene relación con este tipo de onda en particular.

3.1.1.1 Onda de Deflagración

En la deflagración, la temperatura de la onda de combustión aumenta desde la temperatura inicial del gas (aire, en el caso de un cohete dentro de la atmósfera terrestre) a la temperatura de ignición del propelente, para luego alcanzar la temperatura de la llama [4]. La máxima temperatura teórica que podrán alcanzar los gases de combustión corresponde a la temperatura de llama adiabática. Una vez que los gases generados producto de la sublimación del propelente alcanzan su temperatura de descomposición, se generará calor adicional de esta reacción que es transferido de vuelta al grano, manteniendo así el proceso de combustión. El espesor de la onda de combustión se puede estimar como [4]:

$$\delta = \frac{\lambda_g}{C_g \rho_g u_g} \quad (2)$$

3.1.2 Modelo Matemático de la Onda de Combustión

Para modelar matemáticamente la combustión de un material sólido se han establecido ecuaciones que se deben resolver secuencialmente y que corresponden a las de continuidad para fluidos (gases, en este caso) y a la ecuación de conservación de energía para sólidos (el grano de propelente). Tales ecuaciones se presentan en esta sección en su forma transiente, en base a lo planteado por Kuo & Summerfield y López [5, 14].

3.1.2.1 Ecuación de energía para la fase sólida

La conservación de energía para la fase sólida se puede comprender al observar la Figura 3.3, en donde el calor liberado por las reacciones en el frente de quemado hacia los gases es proporcional al calor de combustión que los gases entregan al grano. En la figura, λ_g y λ_c son la conductividad térmica de la fase gaseosa y condensada (grano), respectivamente; $\phi_{g,s}$ y $\phi_{c,s}$ son los gradientes de temperatura desde la fase gaseosa a la superficie del grano y desde la superficie del grano hacia su interior, respectivamente. El origen del eje horizontal x se fija justo en la superficie de la fase sólida, de modo que la posición es positiva hacia la fase gaseosa y negativa hacia el interior del grano. La posición $x = 0$ es, por tanto, donde interactúa la fase gaseosa con la sólida, es decir, donde el propelente sólido se transforma en líquido y/o gas y los productos químicos de este cambio de fase se forman a través de reacciones endotérmicas o exotérmicas [4]. Para un sistema Cartesiano bidimensional, sería útil fijar al eje x en la dirección longitudinal al grano (en el sentido de desplazamiento de los gases en el motor) y al eje y en la dirección radial (eje x de la Figura 3.3).

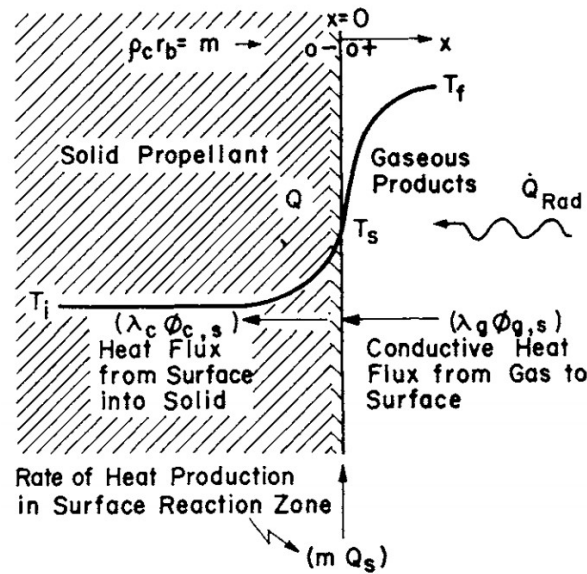


Figura 3.3 Perfil de temperatura 1D durante la combustión de un grano (*One-dimensional temperature profiles in the burning of a solid propellant.* [5])

En la Ecuación 3, T es la temperatura, r_b es la tasa de quemado instantánea del grano, y α_c , ρ_c y C_c son la difusividad térmica, densidad y calor específico de la fase condensada, respectivamente. \dot{Q} es la porción del calor irradiado por los gases (\dot{Q}_{rad}) que es absorbido de forma sub superficial por el grano debido a la porosidad del mismo y/o grietas o fracturas.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + r_b \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha_c \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\dot{Q}}{\rho_c C_c} + \frac{\dot{Q}_{rad}}{\rho_c C_c} \quad (3)$$

Las respectivas condiciones de borde para los casos transientes son:

$$T(t, -\infty) = T_i \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x}(t, 0^-) = \phi_{c,s}(t) \quad (5)$$

3.1.2.2 Balance de flujos para la interfaz gas-sólido

La interfaz gas-sólido (zona reactiva) se describirá siempre de forma unidimensional, ya que el volumen de control que la representa corresponde a una sección de la fase sólida y gaseosa, como se observa en la Figura 3.4.

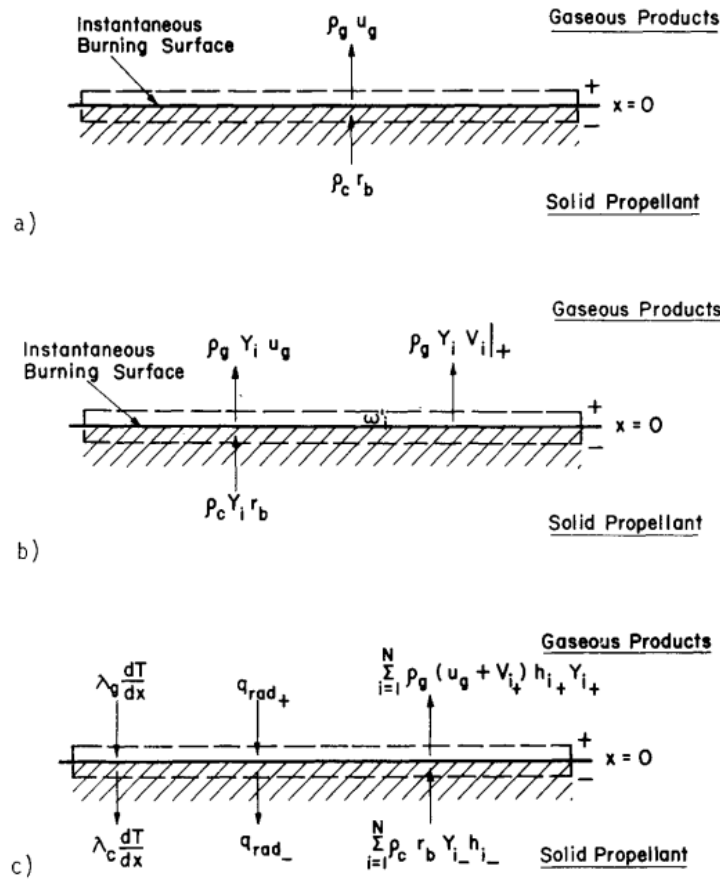


Figura 3.4 Balance de flujos en la zona reactiva (*Balance of mass, species and energy fluxes at the gas-solid interface* [5])

De ella, se tiene que los balances de flujo de masa, energía y fracción de especies, respectivamente, son:

$$\rho_c r_b = \rho_g u_g \quad (6)$$

$$\lambda_c \frac{dT}{dx} \Big|_{-} = \lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{+} + (q_{rad+} - q_{rad-}) + \sum_{i=1}^N \rho_c r_b Y_{i-} h_{i-} - \sum_{i=1}^N \rho_g Y_{i+} (u_g + V_{i+}) h_{i+} \quad (7)$$

$$\rho_g Y_i u_g \Big|_+ + \rho_g Y_i V_i \Big|_+ = \dot{\omega}'_i + \rho_c Y_{i-} r_b \quad (8)$$

Donde $\dot{\omega}'_i$ es la tasa de generación de especies en la fase sólida y V , la velocidad de difusión.

3.1.2.3 Ecuaciones de continuidad para la fase gaseosa

En las Ecuaciones 11, 9 y 12, h es la entalpía específica, D es la difusividad másica, Y es la fracción másica y $\dot{\omega}$ es la tasa de generación de especies en la fase gaseosa. La Ecuación 10 no considera efectos de viscosidad.

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_g)}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_g^2 + p)}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

$$\rho_g \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_g h)}{\partial x} = \lambda_g \frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_g \sum_{i=1}^N h_i D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) \quad (11)$$

$$\rho_g \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_g Y_i)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho_g D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x})}{\partial x} = \dot{\omega}_i \quad (12)$$

Si bien Kuo & Summerfield [5] plantean estas ecuaciones haciendo la suposición de que durante el quemado transiente la distribución de presión es uniforme en el espacio y solo varía en el tiempo, en esta investigación esta suposición se omite (por esa razón está incluida la ecuación de conservación de momentum). Sí se consideran despreciables los efectos de disipación viscosa, el trabajo realizado por fuerzas de cuerpo y flujos de energía debidos al efecto Dufour, además de asumir que no hay fuentes externas de energía, como señalan Kuo & Summerfield [5].

Las condiciones de borde para la fase gaseosa dependen del conocimiento que se tenga sobre las reacciones químicas que se llevan a cabo. Si se cuenta con dicha información, entonces se puede establecer que, a medida que se alejan los gases del frente de quemado ($x \rightarrow \infty$):

$$Y_i = Y_{i,\infty} \quad (13)$$

Y, si se considera que el comportamiento de la llama es adiabático, entonces también se puede indicar que:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad \text{y/o} \quad T = T_\infty \quad (14)$$

Las ecuaciones 9-12 no deben ser empleadas para cualquier caso, y se pueden simplificar de acuerdo al valor relativo de un parámetro en particular: el tiempo característico de la fase, que es una variable adimensional que da cuenta de cuán rápido ocurre la difusión térmica dentro de la fase analizada, según un cambio repentino en su presión (representado por la tasa de quemado instantánea) [5]. Al comparar el valor del tiempo característico de cada fase, con la escala de tiempo asociada a la tasa de cambio de presión, se puede incluso

suponer un estado estacionario de combustión. La forma de calcular el tiempo característico para la fase condensada, gaseosa y la superficie del grano se presenta en las ecuaciones 15, 16 y 17, respectivamente:

3.1.2.4 Ecuaciones de tiempo característico

$$\tau_c = \frac{\alpha_c}{r_b^2} \quad (15)$$

$$\tau_g \approx \frac{\alpha_g}{u_g^2} = \left(\frac{\lambda_g C_c \rho_g}{\lambda_c C_g \rho_c} \right) \tau_c \quad (16)$$

$$\tau_s \approx \left(\frac{R_u T_s}{E_a} \right) \frac{\alpha_c}{r_b^2} = \left(\frac{R_u T_s}{E_a} \right) \tau_c \quad (17)$$

Donde E_a es la energía de activación y R_u , la constante universal de los gases.

4 Estado del Arte

4.1 Modelos 1D de la Onda de Combustión

Estos modelos, como su nombre lo indica, tienen como objetivo resolver las ecuaciones planteadas en la Sección 3, haciendo la suposición de que la llama se comporta de forma cuasi estacionaria. Kuo & Summerfield [5] establecieron tres enfoques bajo los cuales categorizaron los métodos de diferentes autores: el enfoque dp/dt , el enfoque de Descripción de Llama y el enfoque de Zel'dovich.

4.1.1 Modelo dp/dt

El modelo dp/dt consiste en considerar que en la Ecuación 3, el término transiente se puede reescribir como una relación entre la dependencia de la presión para la temperatura, y la dependencia del tiempo para la presión, asumiendo que la presión es una función monótona creciente o decreciente en el tiempo [5].

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (18)$$

Además, se asume que la función de la temperatura en dirección radial se puede descomponer por medio de series de Taylor. En la Ecuación 19, \dot{p} es $\partial p/\partial t$.

$$T(p, x) = T_o(p, x)|_{p=p_o} + \dot{p} \frac{\partial T}{\partial p} \Big|_{p=p_o} + \frac{\dot{p}^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \right) \Big|_{p=p_o} + \dots \quad (19)$$

Y que la tasa de quemado instantánea queda como:

$$r_b(p) = r_o + \dot{p} \frac{\partial r_b}{\partial p} \Big|_{p=p_o} + \frac{\dot{p}^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 r_b}{\partial p^2} \right) \Big|_{p=p_o} + \dots \quad (20)$$

Por lo tanto, al reemplazar en la Ecuación 3, aplicando condiciones iniciales y considerando solo los términos de primer orden, resulta:

$$\left(\frac{\partial T_o}{\partial p} \right) \Big|_{p=p_o} \frac{\partial p}{\partial t} + r_b \left(\frac{\partial T_o}{\partial x} \right) \Big|_{p=p_o} + r_o \frac{\dot{p}}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right) \right) \Big|_{p=p_o} = \alpha_c \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(T_o + \dot{p} \frac{\partial T}{\partial p} \right) \Big|_{p=p_o} \quad (21)$$

El modelo dp/dt desprecia por completo el calor irradiado por los gases al grano, pero permite conocer la distribución radial de temperatura en la fase sólida de acuerdo a la tasa de cambio de esta con respecto a la presión. Para esto, se requiere de igual forma tener de antemano el valor de la presión en estado estacionario (p_o). La tasa de quemado instantánea, r_b , se puede obtener a través de las ecuaciones 5 y 7.

El modelo dp/dt es válido solo para tasas de cambio de presión pequeñas ($\dot{p} \ll p_o$). Para este modelo, la tasa instantánea de quemado fue obtenida por Krier [16].

$$r_b = r_o + \left[1 + \psi \left(\frac{n\alpha}{pr_o^2} \right) \frac{dp}{dt} \right] \quad (22)$$

Donde el término auxiliar ψ encapsula otras variables para ayudar a simplificar la ecuación.

$$\psi = \frac{\left[1 - \frac{1}{k} \left(\frac{p}{p_{o,i}} \right)^{n/k} \right]}{\left[\left(\frac{p}{p_{o,i}} \right)^{n/k} \left(2 + \frac{1}{k} \right) - \frac{2Q_s}{C_c(T_s - T_i)} \right]} \quad (23)$$

La gran ventaja del modelo dp/dt es que, disponiendo del valor de la tasa de quemado estacionaria del propelente (obtenida experimentalmente), tasa de presurización, presión instantánea y algunas propiedades del propelente, se puede obtener la tasa de quemado instantánea y, por ende, su evolución.

4.1.2 Modelo de Descripción de Llama

Este modelo consiste en abordar las ecuaciones de conservación de la fase gaseosa (Ecuaciones 9, 11 y 12) de forma cuasi-estacionaria, eliminando los términos que varían en el tiempo y sin considerar la radiación absorbida de forma sub superficial por el grano. Ya que las ecuaciones resultantes de esta aproximación siguen siendo complejas, se realizan suposiciones adicionales [5].

- La densidad de la fase gaseosa es uniforme espacialmente.
- Los gases producto de la reacción tienen el mismo calor específico de presión constante (C_g). Además, este valor se asume aproximadamente constante.
- La Ley de difusión molecular de Fick es válida y la difusividad másica de todos los gases de combustión es la misma.
- La reacción de los gases de combustión se representa por medio de una reacción química de un paso (se estudia solo el estado termodinámico de la composición final de los gases de combustión).

Con una serie de sustituciones algebraicas basadas en estas suposiciones, la Ecuación 11 se transforma en:

$$\lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0} = Q_f \int_0^\infty e \left[- \frac{\rho_c r_b C_g x}{\lambda_g} \right] \rho_g \dot{\omega} dx \quad (24)$$

Donde $\dot{\omega}$ es la tasa de generación de productos de combustión y Q_f es el calor transferido por la llama.

Para seguir simplificando la matemática de este modelo, es necesario realizar aún más suposiciones. Krier et al. [17] desarrollaron el modelo KTSS, en el que asumen que el término de la tasa de generación de productos de combustión está distribuido uniformemente en la zona reactiva [5]. Así, la retroalimentación de calor se modela bajo la Ecuación 25.

$$\lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0} \approx \frac{\Phi(p)}{r_b} \quad (25)$$

Donde, $\Phi(p)$ se puede obtener al considerar una relación de estado estacionario.

$$\Phi(p) = r_o \lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0^+} \quad (26)$$

Luego, la tasa de quemado de estado estacionario se puede expresar con la Ley de Vieille o de Arrhenius.

$$r_o = ap_o^n = b(\bar{T}_s - T_i)^k = Ae^{-E/R_u T_s} \quad (27)$$

Finalmente, la ecuación de retroalimentación de calor de la fase gaseosa queda expresada según se use la Ley de Vieille o de Arrhenius para la tasa de quemado estacionaria. Estas corresponden a las Ecuaciones 28 y 29, respectivamente.

$$\lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{\rho_c (ap_o^n)^2}{r_b} \left[C_c \left[\frac{ap_o^n}{b} \right]^{1/k} - Q_s \right] \quad (28)$$

$$\lambda_g \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{\rho_c (ap_o^n)^2}{r_b} \left[E_a C_c \ln \left(\frac{ap_o^n}{A} \right) - Q_s \right] \quad (29)$$

Cualquiera de estas dos expresiones finales se puede sustituir en la Ecuación 7 para obtener las condiciones de borde necesarias para resolver la Ecuación 5 [5].

4.1.3 Modelo de Zel'dovich

El modelo de Zel'dovich busca evitar obtener los complejos datos requeridos en el modelo de Descripción de Llama. Para esto, realiza las siguientes suposiciones:

- Las reacciones en la superficie y en la fase gaseosa son cuasi-estacionarias
- No hay reacciones químicas sub-superficiales ni emisión de calor (término Q en la Ecuación 3) o se pueden incluir en la emisión de calor superficial (término \dot{Q}_{rad} , Ecuación 3)
- El sistema propelente-llama se considera adiabático
- No hay influencia de fuerzas externas (como la generada por una carga iniciadora, por ejemplo), por lo que el quemado erosivo es mínimo
- La fase condensada se considera homogénea e isotrópica

Con estas suposiciones, se puede realizar un balance de energía sobre un volumen de control delimitado por $[0^-, x_f]$, donde x_f es la posición radial de la llama desarrollada. De este balance, resulta:

$$\dot{m} h_{c,s}(T_s) = \dot{m} h_{g,f}(T_f, p) + \lambda_c \phi_{c,s} \quad (30)$$

Donde, $\phi_{c,s}$ se puede obtener desde la ecuación de energía para la fase sólida:

$$\phi_{c,s} = \dot{m}C_c(T_{s,o} - T_{i,o}) \quad (31)$$

Con este sencillo modelo, se puede especificar la condición de borde de la Ecuación 5 para resolver la Ecuación 3, sabiendo la temperatura inicial del propelente, la presión dentro de la cámara y la tasa de quemado para algún instante de tiempo [5]. El modelo de Zel'dovich requiere iterar y no producirá resultados precisos si no se cuenta con suficiente información experimental.

4.2 Tasa de quemado

El parámetro más relevante para los estudios de combustión sólida y por el cuál la mayoría de los experimentos y simulaciones se llevan a cabo es la tasa de quemado del propelente. Como se mostró en las ecuaciones 3-17, la tasa de quemado instantánea, r_b , está presente en ellas de forma explícita o implícita (para las ecuaciones de continuidad en la fase gaseosa, por ejemplo, está implícitamente incluida en la tasa de generación de especies y velocidad normal a la superficie). Técnicamente, denominar la tasa de quemado como tal resulta impreciso, puesto que lo que muestra es la tasa a la cual están ocurriendo las reacciones químicas que consumen el propelente, pero con unidades de longitud y tiempo, de modo que tenga relación con el problema que se está estudiando.

Existen diversas formas de representar matemáticamente la tasa de quemado y en esta sección se presentan solo aquellas que han sido utilizadas en casos de combustión de granos de propelente sólido. La forma más general de modelar la tasa de quemado o reacción de propelente sólido es a través de la ecuación de Arrhenius, que representa la frecuencia (r) con la que ocurren colisiones moleculares que logran generar reacciones para una especie i en particular:

$$r = A_i e^{-\frac{E_{a,i}}{RuT_{s,i}}} \quad (32)$$

Krier et al. [17] plantearon otra forma de representar la tasa de quemado en base a la ecuación de Arrhenius que le da prioridad a la temperatura superficial del grano para realizar la estimación. En su ecuación, m es un término de orden 10 [17].

$$r = b(T_s - T_\infty)^m \quad (33)$$

En general, la formulación de la tasa de quemado que se presenta en libros [18, 19] es la de la Ley de Vielle o de Saint Robert, que corresponde a una correlación empírica para la tasa de quemado durante la etapa estacionaria o estable de la combustión. En esta ecuación, a es el coeficiente de tasa de quemado, p la presión, y n el exponente de presurización. El cálculo de la tasa de quemado por medio de la Ley de *Vielle* presenta una ventaja debido a que el experimento que se debe llevar a cabo 'solo' debe permitir medir la presión del recipiente que contiene la muestra de propelente.

$$r_o = ap^n \quad (34)$$

Kubota [4] representa la tasa de quemado para un caso unidimensional, en estado estacionario, a una cierta presión constante (suposiciones adecuadas para casos en los que el propelente tiene quemado neutro) y donde el calor irradiado por los gases es absorbido en la superficie de quemado. Con el fin de ser consistente con la nomenclatura ocupada hasta ahora, se presenta aquí la ecuación final desarrollada por Kubota [4] para la tasa de quemado, con la nomenclatura de Kuo & Summerfield [5].

$$r = p \left[\frac{\alpha_i}{\rho_c C_c} \frac{1}{(R_g T_g)^2} \frac{Q_g \varepsilon_g^2 A_g \exp\left(\frac{-E_g}{RT_g}\right)}{T_s - T_i - \frac{Q_s}{C_c}} \right]^{1/2} \quad (35)$$

Con la temperatura de los gases, T_g , dada por la Ecuación 36, p la presión de los gases, $\alpha_i = \lambda_g / \rho_c C_g$, R_g es la difusión térmica de los gases en la zona de reacción, Q_s es el calor de la reacción en la superficie (calor de descomposición) y Q_g , el de los gases (calor de combustión). ε es la fracción molar y A_g es el factor pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius que, en este caso, se considera un único valor para todas las especies involucradas.

$$T_g = T_i + \frac{Q_s}{C_c} + \frac{Q_g}{C_g} \quad (36)$$

En la Figura 4.1 se muestra la variación de la tasa de quemado para propelente composita (AP-HTPB) con distinta concentración de AP a presiones menores a 1 MPa.

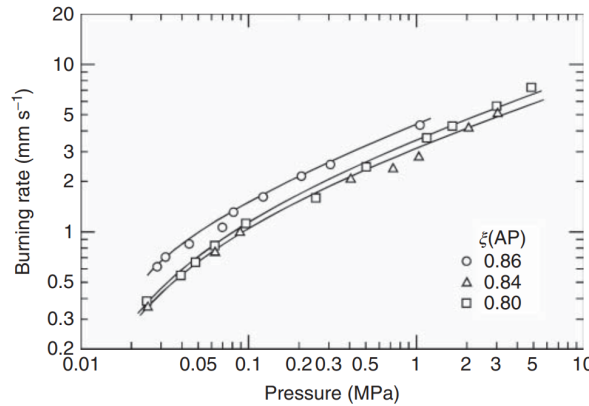


Figura 4.1 Tasa de quemado de composita con diferente % de masa de AP (*Burning rates of three AP-HTPB composite propellants at low pressures below 1 MPa.* [4]).

4.2.1 Quemado erosivo

Como se menciona en la Sección 1.2, este fenómeno consiste en el aumento en la tasa de quemado del propelente debido al flujo de gases a alta velocidad que erosiona la superficie del grano (alta velocidad en relación al diámetro instantáneo del núcleo del grano, para un caso de quemado radial). La tasa de quemado radial depende de la velocidad axial y normal al grano de los gases de combustión. Esta dependencia es lo que se conoce como quemado erosivo. La intensidad del efecto del quemado erosivo sobre el quemado ‘normal’ se cuantifica por lo general mediante un término denominado razón erosiva, $\varepsilon = r/r_o$, donde r_o , la tasa de quemado normal, supone ausencia de flujo cruzado de gases. En la Figura 4.2 se muestra cómo la razón erosiva aumenta de acuerdo a la velocidad relativa de los gases de combustión en la superficie del grano.

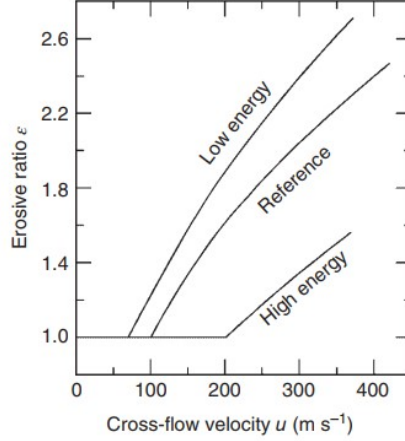


Figura 4.2 Razón erosiva para propelentes de alta y baja energía, en comparación con uno con energía de referencia para distintas magnitudes de velocidad de flujo cruzado [4].

Para poder incluir la influencia del quemado erosivo sobre la tasa de quemado de forma matemática han surgido diferentes estrategias. Una de las aproximaciones más tempranas es la de Lenoir & Robillard [20], quienes postularon que el quemado erosivo es proporcional a la tasa de transferencia de calor entre el flujo de gases en el núcleo y las paredes del grano.

4.2.1.1 Lenoir-Robillard, 1957

Al considerar el caso de una placa plana en la que no existe transpiración, la expresión matemática queda:

$$\begin{aligned}
 r &= ap^n + \alpha \frac{G^{0.8}}{L^{0.2} \exp(z)} & (37) \\
 \alpha &= k \cdot (0.0288 \cdot C_g \mu^{0.2} Pr_g^{-0.667}) \\
 G &= G^* M_g \sqrt{\frac{2(\gamma + 1)(1 + M_g^2(\frac{\gamma-1}{2}))}{1 + \gamma M_g^2}} \\
 z &= \frac{\beta r \rho_c}{G} \\
 k &= \frac{1}{\rho_c c C_c} \left(\frac{T_f - T_s}{T_s - T_i} \right)
 \end{aligned}$$

Donde β es una constante de ajuste, L es la longitud del grano, G es el flujo másico de gases por unidad de superficie y G^* es el flujo másico cuando $M = 1$. El alto nivel de correlación que obtuvieron Lenoir & Robillard [20] en su trabajo les permitió justificar matemáticamente sus observaciones sobre la relación inversamente proporcional entre la tasa de quemado de un propelente sólido y la magnitud del quemado erosivo. Debido a esta última observación, es posible notar en ensayos estáticos a motores cuyos granos tienen un diámetro de núcleo reducido un aumento en la tasa de quemado al comienzo de la combustión, que es precisamente donde la tasa de quemado normal es baja aún. Una vez que se alcanza el valor estable de la tasa de combustión, el quemado erosivo deja de ser relevante.

En 2003, Landsbaum [21] precisó que prácticamente todos los estudios de quemado erosivo posteriores al de Lenoir & Robillard han ocupado el mismo enfoque para cuantificar el nivel

de quemado erosivo para sus propelentes. Además de esto, Landsbaum [21] vuelve a señalar que la influencia del quemado erosivo pareciera disminuir a medida que el tamaño del motor (diámetro) aumenta. La vigencia del enfoque de Lenoir & Robillard [20] en el libro de 2015 de Kubota [4] da cuenta de que la aproximación hecha por estos autores ha sido una de las más adecuadas desde su planteamiento.

El único cambio significativo que ha tenido hasta la fecha la expresión matemática presentada corresponde al efectuado por Ma et al. [22] en 2020, quienes, con el objetivo de eliminar la necesidad de realizar experimentos para obtener el valor de algunas constantes de la Ecuación 37 (β y c , por ejemplo), presentaron una forma alternativa basada en el equilibrio térmico en la superficie del grano.

4.2.1.2 Ma et al. 2020

El modelo de Ma et al. se basa en la idea de que la tasa de quemado es un proceso dominado por la cinética química, más que por la difusión. Su formulación consiste en lo siguiente:

$$r_b = r_o + r_e, \quad r_e = \frac{h}{\rho_c C_c} \frac{T_f - T_s}{T_s - T_i} \quad (38)$$

Con $r_o = ap^n$. El coeficiente de transferencia de calor por convección con transpiración, h , es directamente proporcional al mismo coeficiente pero sin contar la transpiración, h_0 , bajo la siguiente expresión:

$$\frac{h}{h_0} = \frac{\beta_{th}}{e^{\beta_{th}} - 1} \quad (39)$$

Donde $\beta_{th} = \rho_g u_g C_g / h_0$. La velocidad u_g es, en este caso, la velocidad en la dirección axial del motor (paralela a la superficie de quemado del grano). Para obtener el coeficiente h_0 se debe primero conocer el estado del flujo en el núcleo del grano a través de su número de Reynolds, $Re = \rho_g u_g D_{p,i} / \mu_g$.

$$h_0 = \frac{Nu \cdot \lambda_g}{D_{p,i}} \quad (40)$$

Donde el número de Nusselt, Nu , es calculado según el estado del flujo:

$$Nu = \begin{cases} Nu_{lam} & , Re < 2300 \\ Nu_{tr} & , 2300 \leq Re \leq 4000 \\ Nu_{turb} & , Re > 4000 \end{cases} \quad (41)$$

Cualquiera sea el número de Reynolds el número de Nusselt asociado es calculado usando correlaciones empíricas.

$$\begin{aligned} Nu_{lam} &= (Nu_1^3 + 0.7^3 + (Nu_2 - 0.7)^3 + Nu_3^3)^{1/3} \\ Nu_1 &= 3.66 \\ Nu_2 &= 1.615 \cdot \left(\frac{Re Pr D_{p,i}}{L} \right)^{1/3} \\ Nu_3 &= \left(\frac{2}{1+22Pr} \right)^{1/6} \left(\frac{Re Pr D_{p,i}}{L} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (42)$$

$$Nu_{turb} = \frac{\frac{f}{8}(Re - 1000)Pr}{1 + 12.7(Pr^{2/3} - 1)\sqrt{\frac{f}{8}}} \left[1 + \left(\frac{D_{p,i}}{L} \right)^{2/3} \right] K \quad (43)$$

Donde K es un factor de ajuste relacionado con la composición del fluido:

$$K = \left(\frac{T_f}{T_s} \right)^\kappa$$

$\kappa = 0.45$ para el aire [22]. El factor de fricción de Darcy, f , se puede calcular de distintas maneras, todas dadas por correlaciones empíricas.

$$f : \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{f}} = 2 \log \left(\frac{Re\sqrt{f}}{2.51} \right) & : \text{corr. de Prandtl para tuberías lisas} \\ \frac{1}{\sqrt{f}} = 1.8 \log \left(\frac{Re}{6.9} \right) & : \text{corr. de Colebrook [23]} \\ \frac{1}{\sqrt{f}} = 2 \log \left(\frac{3.7D_{p,i}}{\varepsilon} \right) & : \text{corr. de von Karman para tuberías rugosas} \\ \frac{1}{\sqrt{f}} = -0.6 \log \left(\left(\frac{6.9}{Re} \right)^3 + \left(\frac{\varepsilon}{3.7D_{p,i}} \right)^{10/3} \right) & : \text{corr. de Haaland [24] para tuberías lisas/rugosas} \end{cases}$$

Para el caso de transición laminar a turbulento, se interpolan los números de Nusselt como:

$$Nu_{tr} = (1 - \gamma) \cdot Nu_{lam}(Re = 2300) + \gamma \cdot Nu_{turb}(Re = 4000) \quad (44)$$

$$\gamma = \frac{Re - 2300}{4000 - 2300}$$

Observando esto, se da cuenta de que la obtención de la tasa de quemado erosiva se logra iterando en todo momento, puesto que el diámetro del núcleo del grano irá en aumento a medida que este se quema, modificando el número de Reynolds del flujo y, por ende, el valor del coeficiente convectivo con transpiración. Para cerrar estos cálculos solo resta indicar la velocidad axial de los gases, u_g , que puede ser un valor de entrada constante a lo largo del motor (dirección axial) o alguna función cuyo valor dependa de la posición y/o del tiempo, $u_g = u_g(L, t)$.

4.3 Modelos de combustión para composita

A pesar de existir una formulación general de la onda de combustión unidimensional para propelentes sólidos, existen modelos matemáticos adaptados específicamente para propelentes con ciertas composiciones químicas, de modo que su formulación matemática considere solamente los efectos más relevantes.

El propelente de composita, o simplemente composita, es un material altamente energético que consiste en la mezcla de cristales de un compuesto que funciona como oxidante (KNO_3 , por ejemplo) y un combustible que funciona también como aglutinante. A esta mezcla por lo general se le agregan aditivos que aceleran la tasa de reacción (catalizadores) en la combustión. La composita es un propelente heterogéneo naturalmente, puesto que la unión del agente oxidante con el combustible es mecánica (adhesión) y no química (enlaces). Un ejemplo de composita es la mezcla AP-HTPB con polvo de aluminio como catalizador. La composita es encontrada casi exclusivamente en misiles o cohetes de guerra.

Debido a la composición química de la composita AP-HTPB, su combustión resulta en la formación de una llama que no es posible describir con un modelo unidimensional, sino que debe hacerse por medio de uno bidimensional o tridimensional [14]. Los propelentes heterogéneos son complejos de describir debido al tipo de unión entre el oxidante y el combustible, y la estructura molecular de los reactantes y productos que reaccionan entre sí. El desarrollo de modelos multidimensionales para el estudio de la combustión de composita es un requisito y es ahí donde se concentra la atención de las investigaciones hoy en día.

Los modelos que se encuentran en la literatura solo varían en la forma de representar la dinámica de los gases (Ecuaciones 9-12), mientras que la modelación del grano (Ecuación 3) es idéntica entre los autores. Algunos modelos de combustión para composita han sido recopilados por López [14] en su investigación, en los cuales se observa que una diferencia fundamental entre los enfoques de los autores es la disposición espacial que tienen los agentes.

4.3.1 Cai et al., 2008

Una formulación de la tasa de quemado de propelentes con composición *heterogénea* usada por López [14] es la de Cai et al. [6], quienes la desarrollaron tomando en cuenta la contribución del calor de reacción de las especies en la superficie y el calor de combustión entregado al grano por las especies en la fase gaseosa sumado a la tasa de reacción estacionaria dada por la Ley de Arrhenius para un propelente tipo sandwich, como se ve en la Figura 4.3:

$$r_i^2 = \alpha_i \left(\frac{D_i p^n e^{-\beta}}{\beta} \right) \frac{1}{\frac{\lambda_g}{\dot{m}_i C_{p,i} T_s} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_s + \frac{Q_{g,i}}{2C_{p,i} T_s} Q_s(T_s)} Q_{g,i} \quad (45)$$

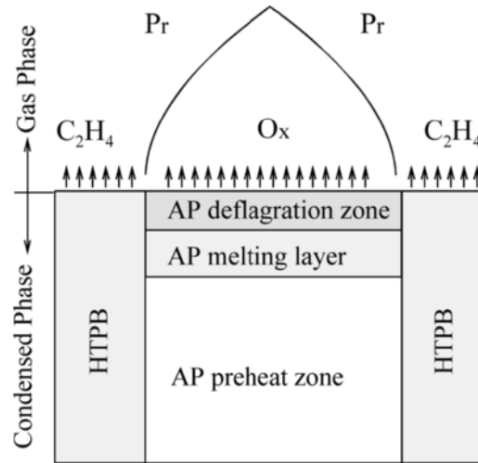


Figura 4.3 Modelo de combustión de Cai et al. [6]
(Schematic diagram of AP=HTPB combustion wave structure.).

Donde $Q_{g,i}$ es el calor de combustión de la especie en la fase gaseosa (el calor de su deflagración, en el caso de propelente sólido), Q_s es el calor de reacción de la superficie del grano (calor de descomposición). $\beta = E_a/R_u T_s$ es la energía de activación adimensional para la descomposición térmica de la especie en la fase sólida. López [14] aproxima el término $(\partial T/\partial y)_s$ como $\frac{T_g - T_s}{d_p}$ y el flujo másico lo representa como $\rho_i r_i$. El término d_p representa el tamaño de la grilla construida, en la dirección vertical; por ende, se puede sustituir con el valor del tamaño de las partículas del agente. La representación del flujo másico como $\rho_i r_i$

implica que la obtención de la tasa de reacción es por medio de iteraciones. La formulación de Cai et al. es muy similar a la de Kubota [4], con diferencias principalmente en el orden de influencia de la presión (en Kubota es lineal siempre) y en la contribución de los calores de reacción.

López [14] ocupa la formulación de Cai et al. [6] para calcular la combustión de composita (AP y HTPB), sin embargo, en uno de sus casos supone que el propelente es homogéneo, para cuyo cálculo de tasa de quemado queda:

$$r_b = Y_{AP}r_{AP} + Y_{HTPB}r_{HTPB} \quad (46)$$

Donde Y_i es la fracción másica del agente presente en el grano.

4.3.2 Cao et al., 2015

En 2015, Cao et al. [7] construyeron su modelo de combustión a partir del diagrama de la Figura 4.4, que usa la configuración tipo ‘sandwich’ para el grano. Modelar la combustión de composita usando esta configuración permite emplear tasas de quemado para cada agente por separado, facilitando así el cálculo de esta. Las ecuaciones que emplean para la fase gaseosa son en 2D e incluyen la ecuación de conservación momentum con viscosidad, presión dada por la ecuación de gases ideales y términos fuente para la ecuación de conservación de momentum y de masa. La tasa de quemado de cada agente es representada mediante la ecuación de Arrhenius, mientras que la tasa de quemado para la mezcla es estimada con una ponderación según la fracción volumétrica de los agentes en la mezcla.

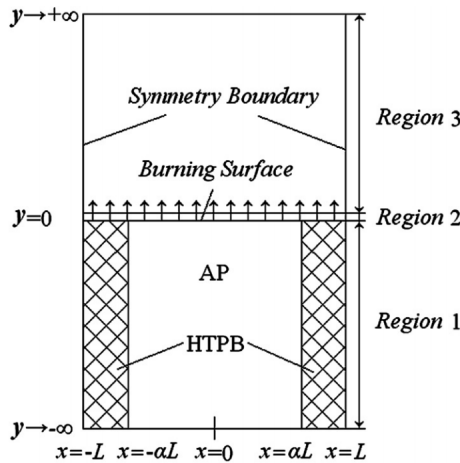


Figura 4.4 Modelo de combustión de Cao et al. [7] (*Combustion model for AP/HTPB composite propellant.*).

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}_g) = S_m \quad (47)$$

$$\frac{\partial \rho_g \vec{u}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\nabla p + \frac{\mu}{3} \nabla (\nabla \cdot \vec{u}_g) + \mu \nabla \vec{u}_g S_{\vec{u}_g} \quad (48)$$

$$L(X, Y, Z) = (-R_1, -R_2, R_1 - \beta R_2) \quad (49)$$

$$L(T) = (Q_{g1}R_1 + Q_{g2}R_2 + dp_g/dt)/C_g \quad (50)$$

Con L el operador $L(\phi) = \partial(\rho_g\phi)/\partial t + \nabla \cdot (\rho_g\phi\vec{u}_g) - \nabla \cdot (\lambda_g/C_g\nabla\phi)$ y la tasa de quemado dada por $r = r_{AP}^{1-\alpha}r_{HTPB}^\alpha$, donde α es la fracción volumétrica de AP presente en el grano.

Las condiciones de borde que emplean en la superficie del grano son:

$$T_g = T_c \quad (51)$$

$$\dot{m}Y_i|_{0+} - \lambda_g C_g \frac{\partial Y_i}{\partial y} \Big|_{0+} = \dot{m}Y_i|_0 \quad (52)$$

$$\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial y} \Big|_{0+} = \lambda_c \frac{\partial T_c}{\partial y} \Big|_{0-} - \rho_c r_b Q_c \quad (53)$$

La extensión del dominio que utilizan Cao et al. [7] es de $L = 85\mu m$, $500\mu m$ de altura para las regiones 1 y 3, y $0.2\mu m$ para la región 2. Además, utilizan solo la mitad horizontal derecha de la Figura 4.4 debido a la simetría del problema con respecto al eje y . El espesor del frente de quemado (región 2) da cuenta del alto costo computacional que pueden llegar a tener los modelos de combustión de propelente sólido, ya que en esta zona es donde se encuentran, por lo general, los fenómenos más relevantes de los estudios, por lo que una discretización fina es necesaria. Una discretización fina acompañada de fenómenos que ocurren en períodos muy cortos de tiempo implica que el paso de tiempo de la simulación deberá ser varios órdenes de magnitud menor al período de tales fenómenos.

4.3.3 Chen et al., 2024

En 2024, Chen et al. [25] modelaron el comportamiento térmico de un propelente *Nitrate Ester Plasticized Polyether* (NEPE) en 2D usando un modelo multipartículas para describir la distribución espacial de AP, HTPB y el agente aglomerante. Muy similar al trabajo de Cao et al. [7], Chen et al. [25] emplearon las siguientes ecuaciones para la fase gaseosa:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{q}) = S_m \quad , \quad \text{donde } \vec{q} = \begin{cases} \vec{u}_g \text{ y } S_m = \frac{\partial(\rho_c r_b)}{\partial x} \\ \vec{v}_g \text{ y } S_m = \frac{\partial(\rho_c r_b)}{\partial y} \end{cases} \quad (54)$$

$$\frac{\partial \rho_g \vec{q}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{q} \vec{q}) + \nabla p = \frac{1}{3} \nabla(\mu_g \nabla \vec{q}) + \nabla(\mu \vec{q}) S_{mom} \quad , \quad \text{donde } \vec{q} = \begin{cases} \vec{u}_g \text{ y } S_{mom} = \frac{\partial(\rho_c r_b)|\vec{u}_g|}{\partial x} \vec{u}_g \\ \vec{v}_g \text{ y } S_{mom} = \frac{\partial(\rho_c r_b)|\vec{v}_g|}{\partial y} \vec{v}_g \end{cases} \quad (55)$$

$$L(Y_i) = (-R_1 - \beta R_4, -R_2 - \beta R_4, -R_3 - R_4, R_1 - \gamma R_5, R_2 - \gamma R_5, R_3 - R_5) \quad (56)$$

$$L(T) = \frac{Q_{g,AP}R_4 + Q_{g,HMX}R_5 + Q_{g,binder}R_6 + Q_p R_7 + Q_f R_8 + dp(t)/dt}{\bar{C}_g} \quad (57)$$

Con $L(\phi) = \frac{D\rho_g\phi}{Dt} - \nabla\left(\frac{\lambda_g}{C_g}\nabla\phi\right)$. La conductividad térmica y la viscosidad dinámica, las modelaron aparte:

$$\lambda_g = 1.08 \cdot 10^{-4}T_g + 0.0133 \quad (58)$$

$$\lambda_g = \frac{Pr\lambda_g}{C_g} \quad (59)$$

El método de Chen et al. [25] divide las reacciones de combustión del propelente NEPE en 8 pasos para poder estimar el calor liberado en la reacción que resulta en la última composición de gases. La tasa de reacción en cada uno de los pasos la estimaron usando la ecuación de Arrhenius. Para resolver el sistema de ecuaciones, el método de volúmenes finitos fue empleado.

5 Optimización de Modelo CFD para la Dinámica de Gases

5.1 Objetivo

En la presente sección se aborda la optimización de un modelo CFD de dinámica de gases para un motor de referencia, previamente desarrollado [13]. El objetivo de optimizar este modelo sigue la idea de que una herramienta de diseño preliminar de motores de cohetes debe ser lo suficientemente rápida como para permitir iterar. El modelo desarrollado no cumple con este último punto, requiriendo cerca de 90 días de cómputo continuo en un computador con las siguientes especificaciones: CPU i3-9700F 4 Core 3.6 GHz, 16 Gb RAM, GPU NVIDIA 1050 TI.

5.2 Caso de referencia

El caso que se utilizó como referencia corresponde a un ensayo hecho a un motor de prueba BEM desarrollado por el GIP en años anteriores y que fue registrado por Rocha [8]. El propelente usado fue KNDX en una razón Oxidante/Combustible (O/F) 65/35.

Para modelar la combustión de este motor se consideró que la cámara de combustión se encontraba completamente cargada de propelente en su longitud, que la geometría del grano era perfectamente tubular, que el quemado era puramente radial y que la densidad del grano era 95% de la teórica, debido a que es común tener leves defectos en la manufactura de ellos. Asimismo, la presión dentro de la cámara es un dato que se obtuvo de la Figura 5.1a. Por último, la temperatura de los gases de combustión del propelente se obtuvo por medio del software *Chemical Equilibrium and Applications* (CEA).

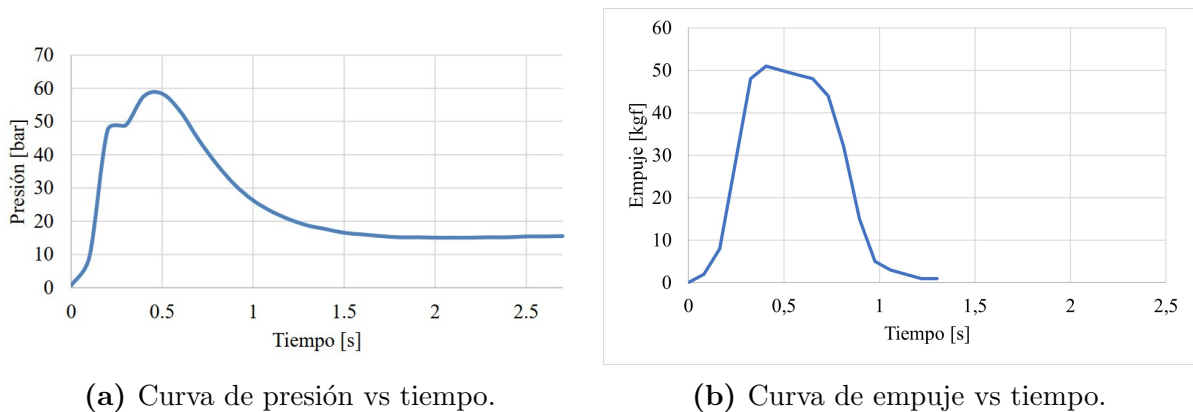


Figura 5.1 Resultados de presión y empuje del motor BEM durante una prueba estática el 22 de octubre de 2018 [8].

5.3 Primera implementación en ANSYS Fluent

5.3.1 Dominio y malla

Para el modelo desarrollado anteriormente se empleó una leve modificación del dominio que Torres [2] presenta para modelar la combustión de propelente sólido y se extendió para que incluyera la cámara de combustión. En la Figura 5.2 se muestran las extensiones del dominio construido en el proyecto anterior del autor.

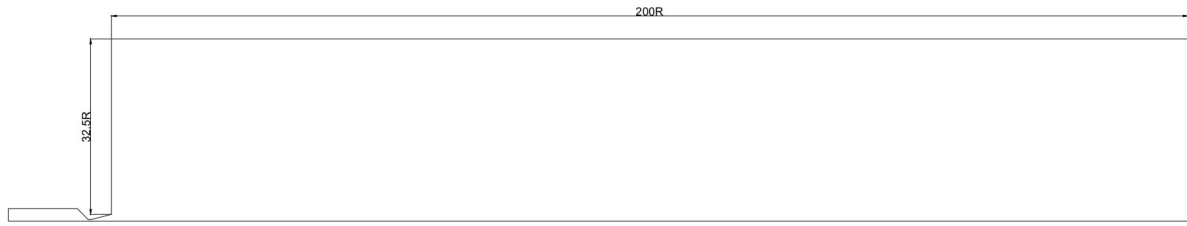


Figura 5.2 Extensión del dominio utilizado, en unidades relativas al radio (R) de la salida de la tobera.

La malla que se utilizó fue de tipo cuadrangular con 17000 elementos, estructurada en la zona del motor, tobera y la porción del dominio exterior que es de interés. En la Figura 5.3 se muestra el detalle de los elementos en la cámara de combustión, mientras que en la Figura 5.4 se muestra la totalidad de la malla generada, con sus condiciones de borde.

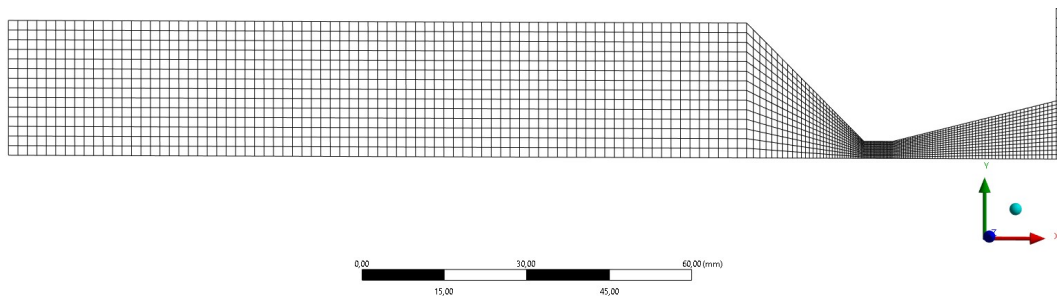


Figura 5.3 Malla generada en la cámara de combustión.

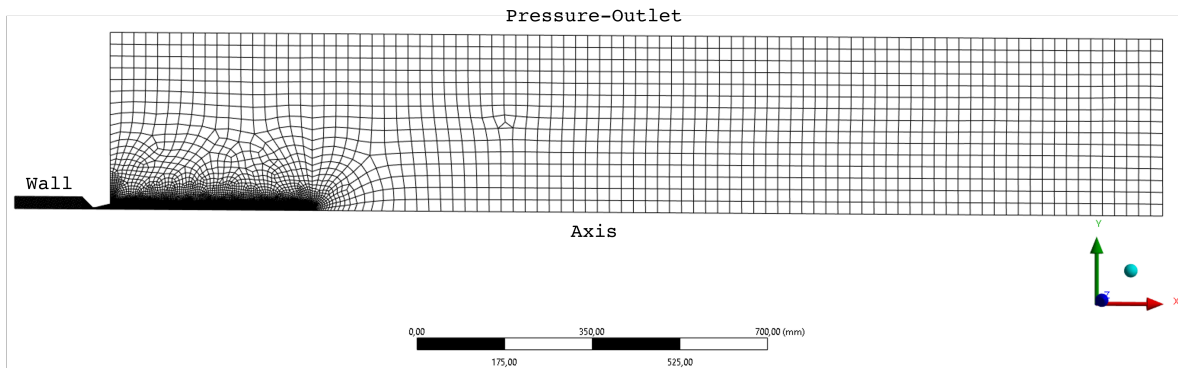


Figura 5.4 Vista general de la malla, con sus condiciones de borde.

5.3.1.1 Malla Overset para el frente de quemado

Para producir un frente de quemado móvil en el tiempo, se recurrió a la creación de una malla *Overset* con 8000 elementos. Esta malla cuenta con las condiciones de borde que representan adecuadamente el comportamiento del grano de propelente que se va consumiendo dentro de la cámara (regresión radial y liberación de gases). Las extensiones de la malla se presentan en la Figura 5.5. Debido a requisitos de cantidad de celdas *Overset* por cada celda de malla de fondo (una razón de 4:1 es recomendada) para evitar un problema numérico conocido como celdas ‘huérfanas’ (celdas que no transmiten la información), el radio del grano de propelente debió ser modificado a 10.5 mm, en vez de 10 mm, que era la medida del grano real. La línea horizontal por fuera y por debajo de la geometría en la Figura 5.5 es un eje horizontal

de referencia, que es coincidente con el eje de simetría de la malla de fondo (Axis, ver Figura 5.2). Las condiciones de borde y una vista general de la malla se presentan en la Figura 5.6.

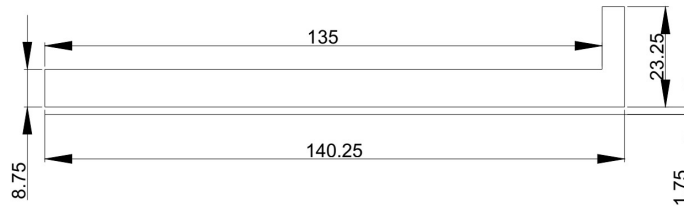


Figura 5.5 Extensiones de la malla *Overset*.

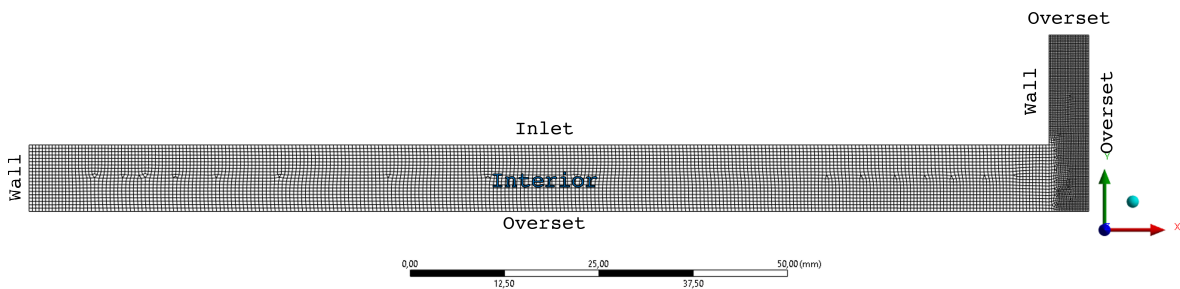


Figura 5.6 Malla *Overset* y condiciones de borde empleadas.

Una vista de la cámara de combustión y una porción de la zona convergente de la tobera al superponer ambas mallas se muestra en la Figura 5.7.

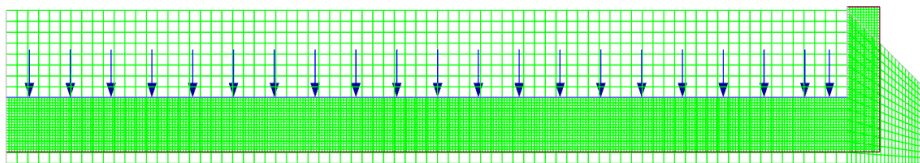


Figura 5.7 Malla de fondo y *Overset* sobrepuestas en la cámara de combustión.

5.3.2 Fenómenos modelados

Se modeló la turbulencia usando el modelo $k - \varepsilon$ *Realizable* con la modificación de Menter-Lechner para las paredes.

Se incluyó la modelación de transporte de especies sin reacciones químicas de ningún tipo, ni la inclusión de difusión térmica. Las especies involucradas y su fracción molar se obtuvo usando *Propellant Evaluation Program* (ProPEP) [26] y se muestran en el Anexo C (Tabla C.1). Como es de notar, la suma de las fracciones molares resulta 0.989. Esto se debe a que la especie que ocupa la fracción molar restante (KOH) no está presente dentro del listado de especies disponibles en Ansys Fluent.

5.3.3 Condiciones de Borde

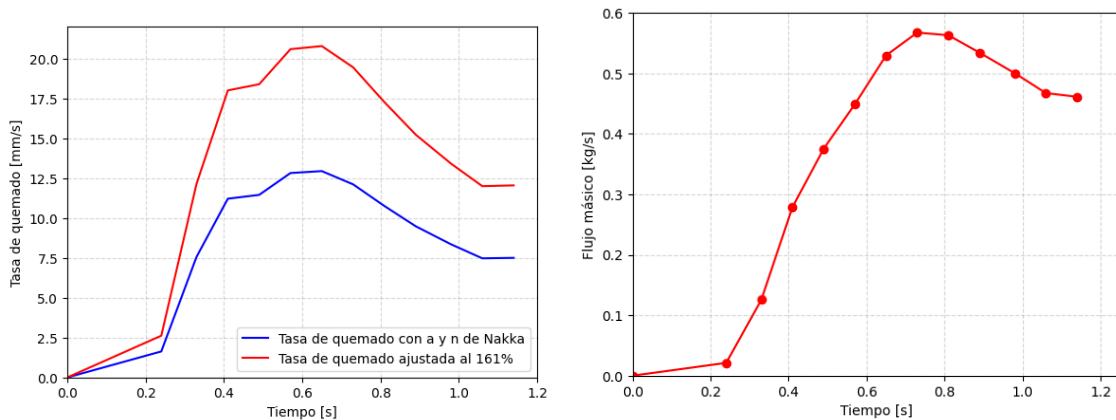
La lista de condiciones de borde empleadas se presenta en la Tabla 5.1. Se emplearon expresiones para la variación en el tiempo del flujo másico y temperatura en el Inlet, pero no para las especies químicas, que se consideraron constantes.

Tabla 5.1 Condiciones de borde del problema.

Tipo	Propiedades
<i>Mass-flow Inlet</i>	Expresiones (ver Anexo D) Intensidad de turbulencia : 5% Razón de viscosidad turbulenta : 10 Presión inicial: 101325 Pa
<i>Pressure Outlet</i>	101325 Pa 300 K 0 fracción molar en todas las especies
<i>Axis</i>	-
<i>Internal</i>	Compuesto por la mezcla de gases
<i>Wall</i>	No deslizamiento y estacionaria

A las paredes de la malla Overset se les modificó su condición estacionaria a una de pared móvil relativa al interior de la malla y sin velocidad de traslación, de modo que la malla las ‘arrastre’ consigo al moverse. La expresión que describe el movimiento de la malla se encuentra en el Anexo D, mientras que su obtención se detalla resumidamente a continuación.

A partir de la Figura 5.1a, se empleó la plantilla SRM de Nakka [9] para la obtención de los coeficientes a y n del propelente KNDX para la Ecuación 34. Nakka, presenta el valor de los coeficientes según la presión de la cámara (ya que el KNDX tiene un quemado del tipo *plateau*), por lo que lo que se hizo fue relacionar cada valor de presión de la Figura 5.1a (hasta los 1.1 s) con sus respectivos valores de coeficientes de tasa de quemado, sin embargo, la curva generada, al evaluar su integral en el tiempo de quemado, no resulta en un radio quemado de propelente de 14 mm. Es por esto que se debió ajustar de forma iterativa los datos de esta curva, asumiendo que existe una proporcionalidad directa de los coeficientes de Nakka con los posibles coeficientes del propelente utilizado en el ensayo descrito anteriormente. Al hacer esto, resulta la Figura 5.8a. Con estos datos y conociendo la masa total del grano, fue posible reconstruir una curva que se aproxime al valor del flujo másico para cada instante de tiempo de la combustión. Esta curva se presenta en la Figura 5.8b.



(a) Tasa de quemado ajustada para cumplir con el valor de radio del propelente. (b) Flujo másico reconstruido a partir de los datos experimentales.

Figura 5.8 Condiciones de borde obtenidas a partir de SRM de Nakka [9].

5.3.4 Esquema de integración y precisión

Inicialmente, se utilizó una aproximación de primer orden para la discretización temporal, de modo que se asegurara una buena estabilidad de la solución, sin embargo, el criterio de estabilidad impuesto con el valor inicial de CFL fue suficiente para que la solución fuese estable desde un comienzo, por lo que se cambió a aproximaciones de segundo orden para las variables del flujo, para la energía turbulenta y para la tasa de disipación de turbulencia. El tamaño de paso de tiempo y la cantidad de pasos de tiempo requeridos para completar 1.1 segundos de combustión se indican en la Tabla 5.2. Inicialmente se empleó un esquema de integración completamente explícito, ya que es significativamente más rápido para completar cada paso de tiempo, pero para este problema requería un tamaño de paso de tiempo cerca de 20 veces menor al que requería un esquema completamente implícito, a pesar de ser más lento para completar cada paso de tiempo. A pesar de ser más lento para completar cada paso de tiempo, el esquema completamente implícito resultó ser más rápido que el explícito, debido a la considerablemente menor cantidad de pasos de tiempo requeridos para completar la totalidad del tiempo de quemado. Al notar esto, el esquema se cambió a uno completamente implícito.

Tabla 5.2 Parámetros temporales de la simulación.

Parámetro	Valor
Paso de tiempo (s)	$8 \cdot 10^{-7}$
Cantidad de pasos requeridos	1375000

5.3.5 Resultados parciales del modelo

Los resultados de cada figura contienen un cronómetro de un software externo a Fluent en la parte superior izquierda, sin embargo, este cronómetro no se logró sincronizar a un nivel de milisegundo con cada cuadro de la animación que se generó para cada variable, por lo que el instante para el cual se capturó la imagen es el que se indica en el pie de cada figura. En general, se aprecia una buena similitud entre los resultados de ambas estrategias, siendo la configuración con malla fija considerablemente más fácil de implementar en el software. En las Figuras 5.9-5.10 se comparan los resultados de ambas simulaciones, mientras que en la Figura 5.11 se compara la evolución de la presión estática y el empuje generado por el cohete con los datos que provee Rocha [8] en su investigación. La curva de presión de la Figura 5.11a presenta información relevante acerca de la configuración del modelo numérico desarrollado en esta investigación. La diferencia de presión estática dentro de la cámara de combustión se puede asociar con el fenómeno de quemado erosivo, mencionado en la Sección 4.2.1. Este aumento se dará cuando la velocidad del flujo cruzado sobre la pared del frente activo de quemado sea alta, de acuerdo a la Figura 4.2. Una alta velocidad de flujo cruzado, sin embargo, es plausible si se considera que la carga pirotécnica utilizada para el ensayo estático descrito en esta investigación era lo suficientemente poderosa como para encender un motor de 3 veces el largo del motor BEM [8]. Por otro lado, el empuje experimental es ampliamente menor que el calculado a partir de los resultados de la simulación (con $T = \dot{m}V_e + (p_e - p_a)A_e$), lo que se puede deber al valor de flujo másico que se ocupó como condición de borde. Por último, el movimiento regresivo de la malla Overset no fue posible de visualizar debido al corto tiempo físico de simulación. A los 0.127 segundos, la malla Overset se movió apenas 0.197 milímetros, según la expresión utilizada para su movimiento.

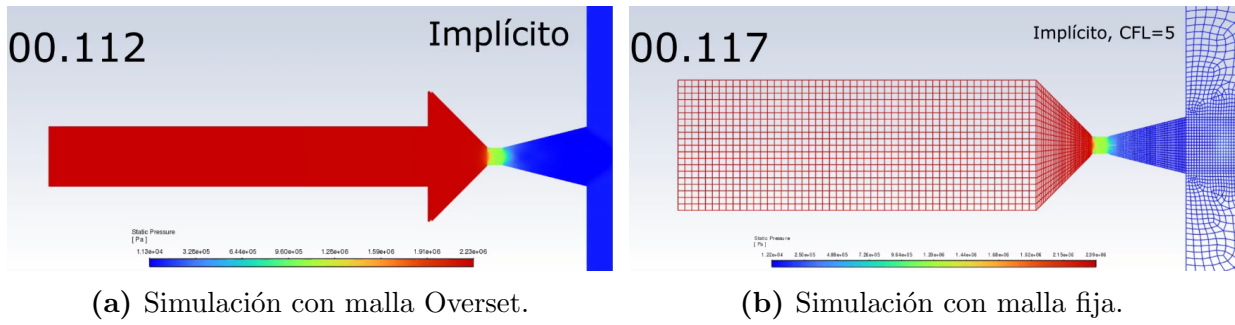


Figura 5.9 Comparación de contornos de presión estática en $t = 0.127$ s.

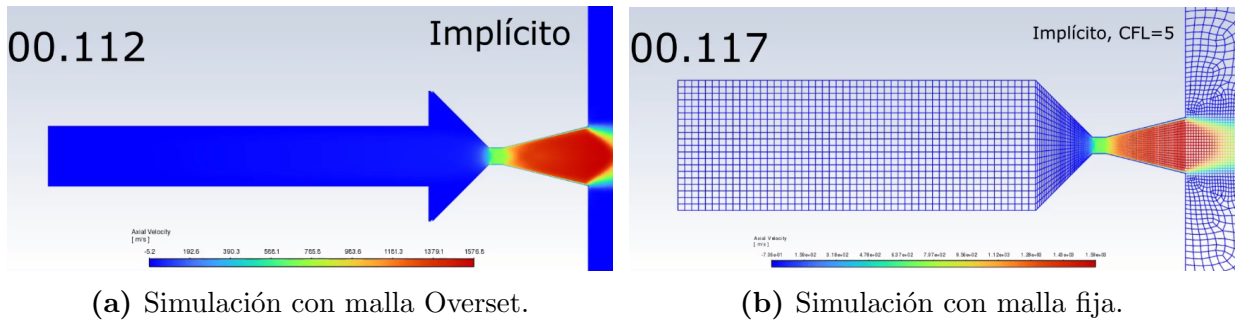


Figura 5.10 Comparación de contornos de velocidad axial en $t = 0.127$ s.

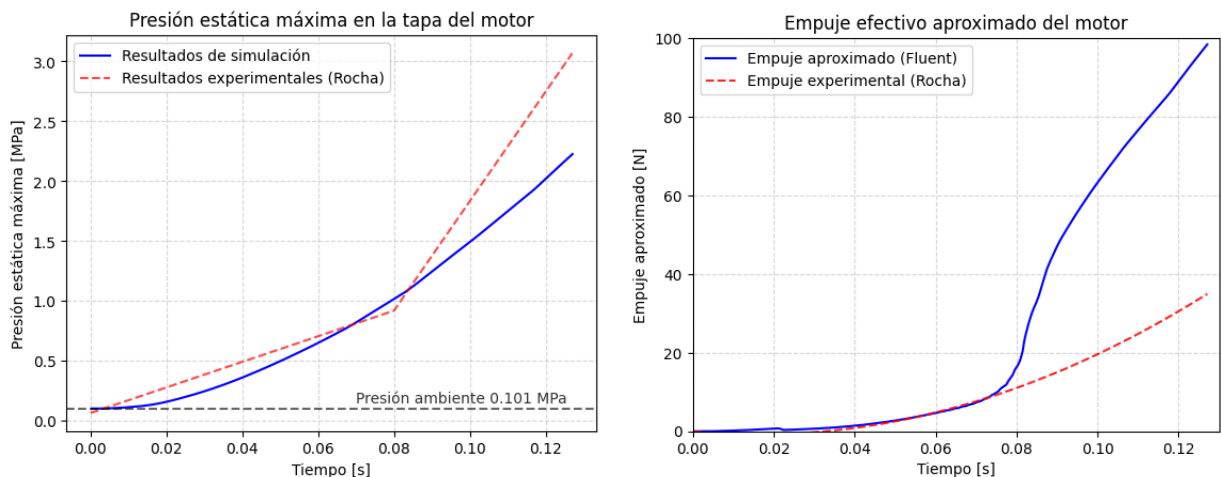


Figura 5.11 Comparación entre datos experimentales de Rocha [8] y los obtenidos en la simulación con malla Overset.

5.3.5.1 Deficiencias del modelo

La inclusión de una malla móvil generó dificultades para la correcta configuración de la simulación. Una de estas fue la aparición de celdas huérfanas. Este problema no se pudo sortear para esta simulación, de modo que se generaron 2 celdas huérfanas en toda la duración de la simulación. A pesar de la ubicación de estas celdas, presentada en la Figura 5.12, que permite pensar que no tuvieron influencia en los resultados, sí tiene un impacto significativo en la eficiencia computacional la aparición de celdas huérfanas. Además de esto, la malla que se construyó no fue estudiada con un análisis de sensibilidad y se cree que la calidad de los elementos en la cercanía de las paredes no fue la adecuada. Por último, las condiciones

de borde que se emplearon no fueron correctamente configuradas, principalmente debido al método en el que se obtuvieron. Todo lo recién mencionado se tomó en consideración para mejorar el modelo desarrollado.

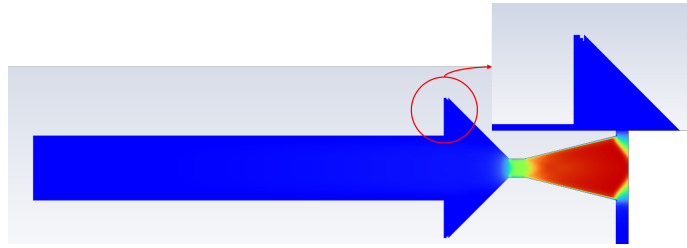
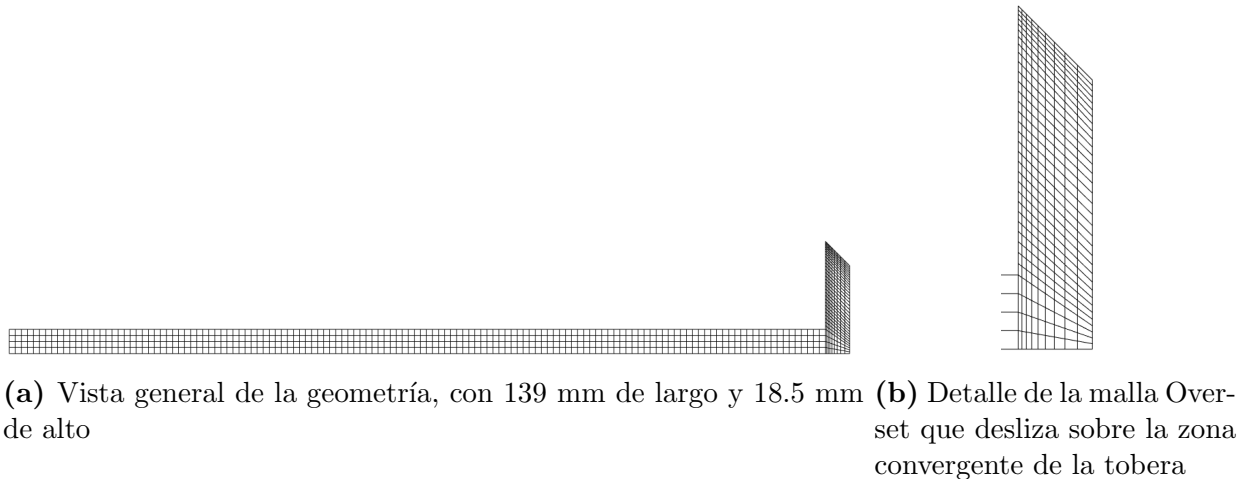


Figura 5.12 Celdas huérfanas en la zona convergente de la tobera.

5.4 Optimización computacional del modelo

Dadas las deficiencias del primer modelo, se apuntó a optimizar este por medio de tres análisis: 1) un estudio del impacto de la cantidad de elementos del dominio sobre el valor de la presión estática promedio y la velocidad axial máxima de los gases de combustión en la salida de la tobera del motor, sobre el valor de y^+ en todas las paredes, sobre el empuje generado y sobre el tiempo de cómputo, 2) un estudio del impacto de distintos métodos numéricos en las mismas variables y 3) un estudio del impacto del tamaño de paso de tiempo y los criterios de convergencia de la solución sobre las mismas variables. En la Figura 5.13 se presenta la geometría de la malla Overset que se empleó en todo el análisis, mientras que en la Figura 5.14 se presenta la malla de fondo. La Figura 5.15 muestra la composición de la malla de fondo y Overset simultáneamente, al mismo tiempo que se aprecia la ubicación de las condiciones de borde de inlet (flechas en azul) y outlet (flechas en rojo).



(a) Vista general de la geometría, con 139 mm de largo y 18.5 mm de alto **(b)** Detalle de la malla Overset que desliza sobre la zona convergente de la tobera

Figura 5.13 Malla Overset.

Los estudios 1 y 2 se ejecutaron en estado estacionario para hacer más ágil la prueba de cada caso que se planteó. En ambos estudios, los casos se corrieron por 1500 iteraciones. Las condiciones de borde en ambos estudios fueron: inlet de presión a 5.839 MPa con las mismas fracciones molares de especies que el modelo anterior, outlet de presión a 0.101 MPa, paredes sin deslizamiento y presión de operación de 0 Pa. El estudio 1 se hizo comenzando con una malla de fondo con 8970 elementos, todos cuadrangulares, para luego probar con 5 mallas distintas a esta, de 7100, 6532, 6248, 5160 y 4860 elementos. La malla overset se

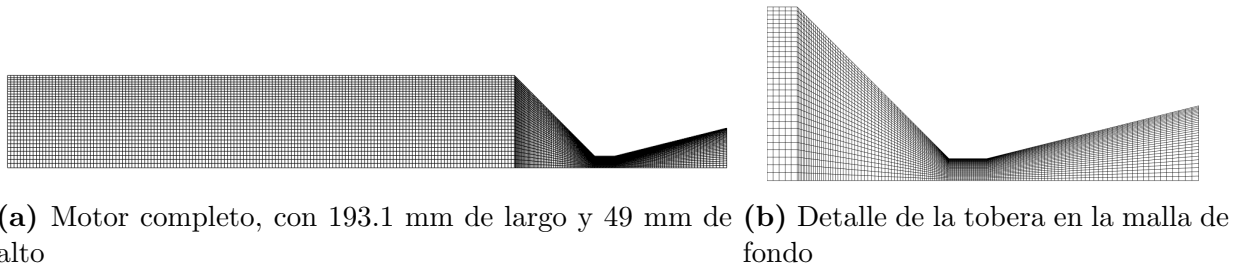


Figura 5.14 Malla de fondo.

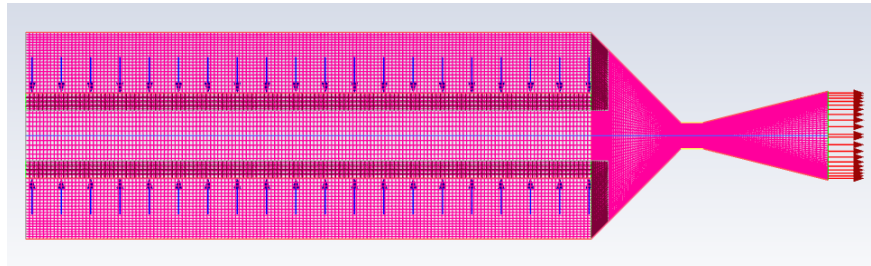
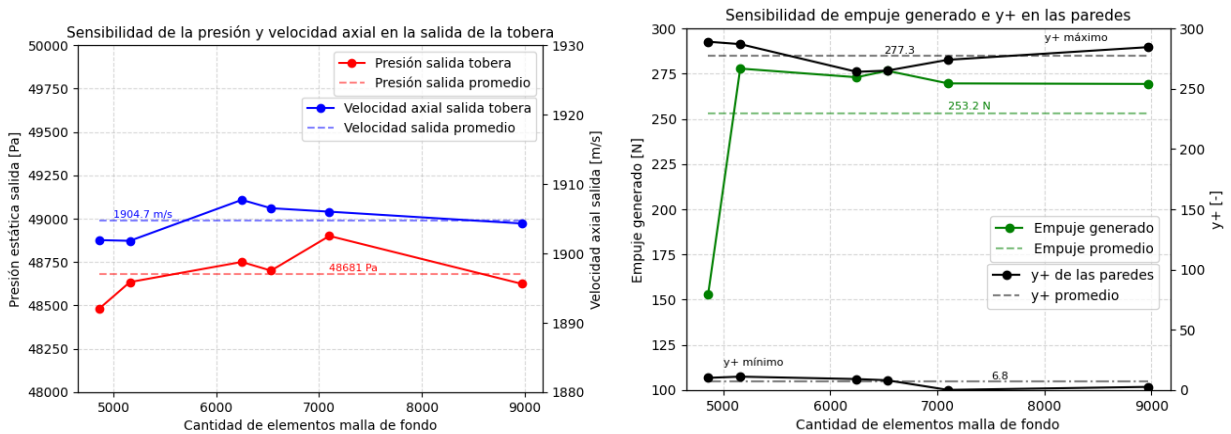


Figura 5.15 Malla de fondo y Overset superpuestas, vista con su simetría axial y con 9816 elementos en total.

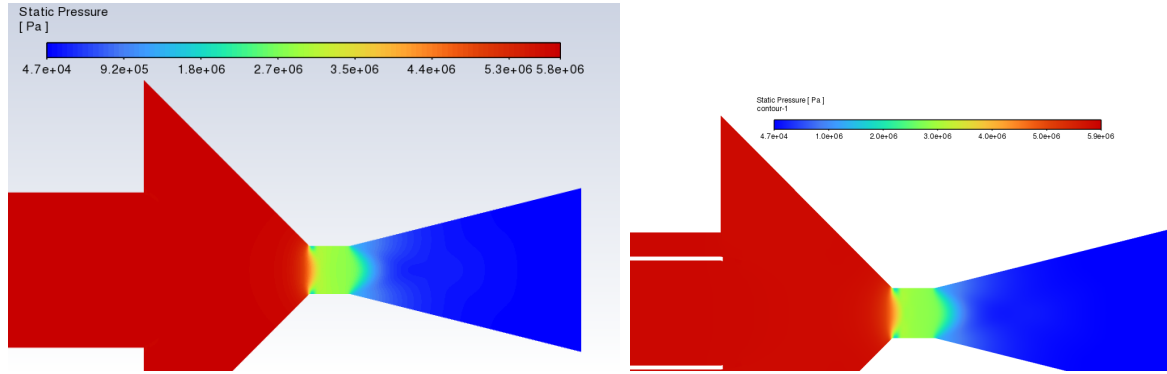
mantuvo fija con 846 elementos, todos cuadrangulares. Además, se empleó un esquema de integración implícito, discretización espacial de 2do orden y un esquema AUSM para describir el comportamiento del flujo. Los resultados de este estudio se presentan en la Figura 5.16, de la cual se desprende una presión estática promedio a la salida de la tobera de 48681 Pa y una desviación estándar de 141 Pa (0.29% del promedio). Para la velocidad axial de gases, estos valores son 1904.7 m/s y 2.5 m/s (0.13% del promedio), respectivamente, mientras que, para el empuje, los valores son 253.2 N y 49.3 N (19.5% del promedio), respectivamente. Los valores de y^+ (adimensional) se monitorearon en todo su rango. El promedio de los mínimos del rango fue de 6.8 y el promedio de los máximos, de 277. El empuje obtenido en la malla de menor cantidad de elementos refleja el límite inferior de elementos que puede tener la malla de fondo, límite que, si es traspasado, los resultados que se obtienen están lejos de la precisión esperada del modelo.



(a) Sensibilidad de presión y velocidad axial máxima (b) Sensibilidad de empuje e y^+ de todas las paredes

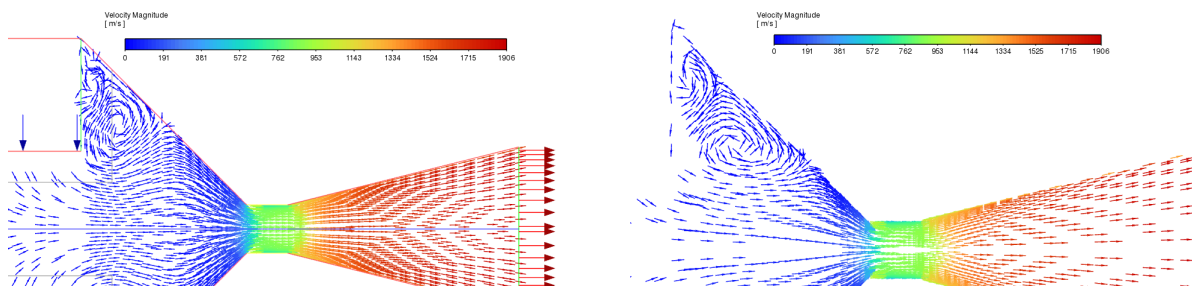
Figura 5.16 Sensibilidad de variables en el estudio 1.

En las Figuras 5.17-5.19 se presentan los contornos de presión, vectores de magnitud de velocidad y valores de y^+ de todas las paredes del volumen de control, para el caso base y para el último caso estudiado. En la Figura 5.17b es posible notar la aparición de una discontinuidad en la malla Overset, atribuible al aumento en el tamaño de celdas de la malla de fondo, que superó al tamaño de las celdas de la malla Overset.



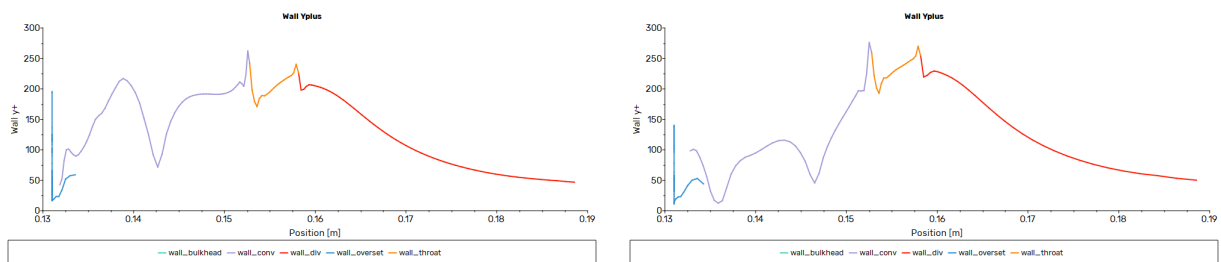
(a) Sobre la malla de fondo base (8970 elementos) (b) Sobre la última malla de fondo probada (4860 elementos)

Figura 5.17 Contornos de presión en el estudio 1.



(a) Sobre la malla de fondo base (8970 elementos) (b) Sobre la última malla de fondo probada (4860 elementos)

Figura 5.18 Vectores de velocidad en el estudio 1.



(a) Sobre la malla de fondo base (8970 elementos) (b) Sobre la última malla de fondo probada (4860 elementos)

Figura 5.19 Valores de y^+ obtenidos en el estudio 1.

El estudio 2 se hizo para un total de 4 permutaciones de configuraciones, dadas por: el uso de una discretización espacial de 1er o 2do orden y un esquema Roe-FDS o AUSM para el flujo. No se presenta el uso de un esquema de integración explícito puesto que, como se mencionó, tempranamente se detectó su elevado costo computacional en comparación con el esquema

implícito. Asimismo, no se presenta el uso de precisión simple (en vez de doble) en Fluent, ya que el propio software no lo recomienda en casos que usen malla Overset, ni tampoco es posible medir el empuje generado (fuerzas, en general) usando precisión simple. El estudio 2 se hizo sobre la malla con 6006 elementos totales (5160 elementos en la malla de fondo). Los resultados de cada permutación se muestran en la Tabla 5.3. Se obtiene una presión promedio de 48531 Pa con una desviación estándar de 476.9 Pa (0.98% del promedio). Para la velocidad axial, estos valores son 1899.6 m/s y 8 m/s (0.42% del promedio), respectivamente. Por último, para el empuje, estos los valores son 268.8 N y 10.2 N, respectivamente. A pesar de tener el mismo tiempo de cómputo (WCT) los casos 1 y 2, se considera más adecuado el caso 2, debido a su formulación matemática (mayor precisión para captar ondas de choque, comparado con Roe-FDS).

Tabla 5.3 Resultados del estudio 2 de sensibilidad.

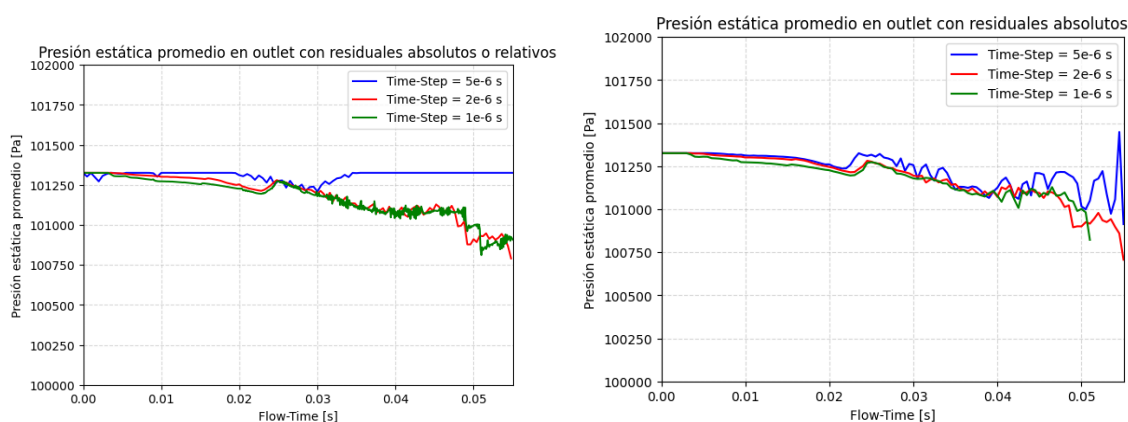
Caso	Disc. Espacial	Flujo	Presión [Pa]	Vel. Axial [m/s]	Empuje [N]	WCT (1500 iter) [s]
1	1er Orden	Roe-FDS	48939	1888.3	263.3	104
2	1er Orden	AUSM	47842	1903	257.2	104
3	2do Orden	Roe-FDS	48700	1906.7	277.1	108
4	2do Orden	AUSM	48643	1900.6	277.7	112

Para el estudio 3, que debía hacerse en estado transiente, se modificó el inlet para que el flujo másico variara en el tiempo usando la misma expresión que en el modelo original. Para la temperatura del inlet se hizo lo mismo. En este estudio se consideraron 3 tamaños de paso de tiempo (TS) distintos, mientras que para el resto de configuraciones del modelo, se mantuvieron las del caso 4 del estudio 2 para ahondar en la estabilidad de la solución. Los resultados de eficiencia computacional se presentan en la Tabla 5.4. Se fijó la cantidad de pasos de tiempo como las necesarias para completar 0.055 s de simulación, y en 50 la cantidad máxima de iteraciones por cada TS, de modo que se asegurara la convergencia de la solución antes de completar el TS. El total de iteraciones realizadas da cuenta de una rápida y continua convergencia de la solución para cada TS al usar un criterio de convergencia absoluto o relativo. El tiempo real requerido por el computador para completar 1 TS se indica en la penúltima columna, mientras que el tiempo total que requeriría el computador para modelar 1.1 s de quemado si se mantiene el tiempo promedio que tarda 1 TS en cada caso, se muestra en la última columna. Este estudio se llevó a cabo en un computador con un procesador de 20 hilos y 16 GB de RAM.

En las Figuras 5.20-5.22 se presenta cómo afecta el tamaño del paso de tiempo sobre la presión estática promedio y velocidad axial máxima a la salida de la tobera, y sobre el empuje generado por el motor. Es evidente señalar que el paso de tiempo de $5e-6$ s produce resultados inestables en el tiempo, mientras que la diferencia entre los pasos de tiempo $1e-6$ y $2e-6$ s es mínima. En este estudio también se monitoreó la presión estática y velocidad total en la zona convergente de la tobera y los resultados que se obtuvieron siguen el mismo comportamiento. El uso de un criterio de convergencia relativo o absoluto en comparación con uno absoluto resulta en una significativa reducción de tiempo de cómputo, sin pérdida alguna de información.

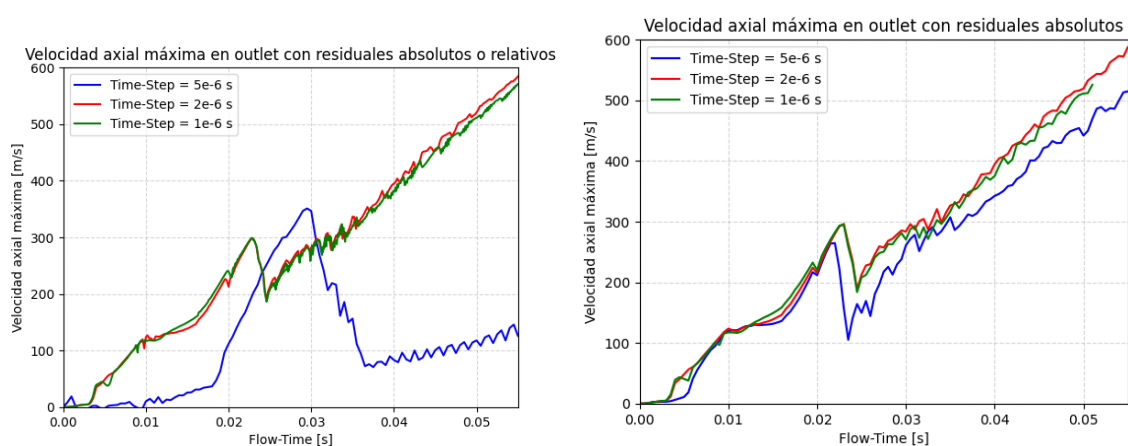
Tabla 5.4 Resultados del estudio 3 de sensibilidad.

Caso	TS [s]	Residuales	Cant. TS	WCT [s]	Total iter.	Tiempo/TS [s]	Tiempo req. [s]
Criterio de convergencia: absoluto o relativo							
1	5e-6	Inestables	11000	26958	276700	2.45	539000
2	2e-6	Estables	27500	77203	779200	2.81	1544060
3	1e-6	Estables	55000	213540	720000	3.88	4270800
Criterio de convergencia: absoluto							
4	5e-6	Inestables	11000	97809	550000	8.89	1956180
5	2e-6	Estables	27500	513317	1375000	18.67	10266340
6	1e-6	Estables	51400	864000	2558700	16.81	18490273



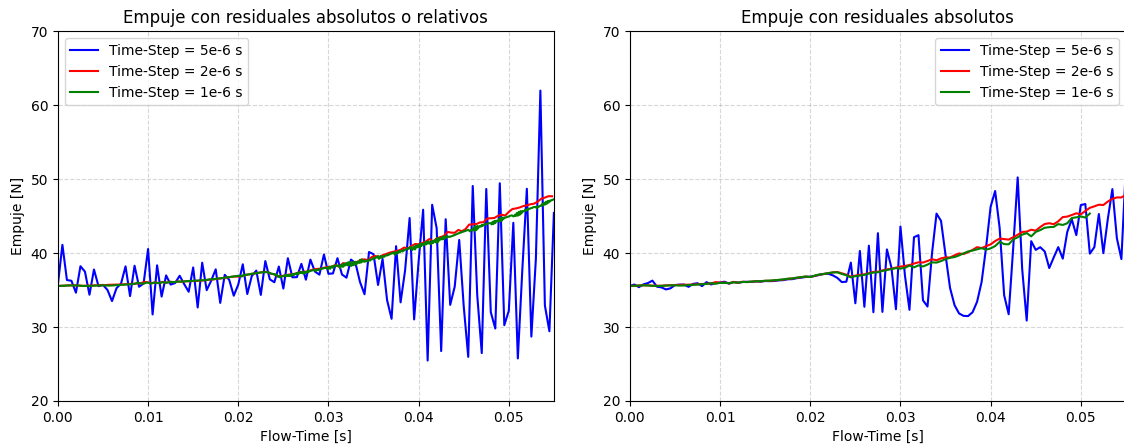
(a) Con criterio de convergencia absoluto o relativo (b) Con criterio de convergencia absoluto relativo

Figura 5.20 Influencia del tamaño de paso de tiempo sobre la presión estática a la salida de la tobera.



(a) Con criterio de convergencia absoluto o relativo (b) Con criterio de convergencia absoluto relativo

Figura 5.21 Influencia del tamaño de paso de tiempo sobre la velocidad axial a la salida de la tobera.



(a) Con criterio de convergencia absoluto o relativo (b) Con criterio de convergencia absoluto relativo

Figura 5.22 Influencia del tamaño de paso de tiempo sobre el empuje generado.

5.4.1 Discusión del modelo optimizado

Habiendo revisado en detalle los aspectos recién mencionados, se concluye que la configuración óptima del modelo consiste en: 1) una malla de fondo con 5160 elementos que representan sólo al interior del motor, sin un dominio exterior; 2) una malla Overset con 846 elementos cuya geometría es idéntica a una porción del interior del motor; 3) una discretización espacial de 1er orden con un esquema AUSM para la descripción del flujo; y, por último, 4) un tamaño de paso de tiempo de $2e-6$ s con un criterio de convergencia absoluto o relativo. Así, el caso 2 del estudio 3 (con métodos de 1er orden) es la configuración con menor tiempo de cómputo encontrado en este análisis que, a pesar de esto, muestra que se necesitan casi 18 días de simulación continua para completar el tiempo de quemado del grano, esto sin considerar el efecto de ralentizado producto de la acumulación de datos en el caché, que aumenta considerablemente el tiempo de cómputo en simulaciones que de por sí demandan altos recursos del computador. El tiempo de cómputo y la precisión del caso 2 pueden aumentar ligeramente si se utiliza una discretización temporal y espacial de orden 2, pero la estabilidad de la solución puede verse afectada durante los primeros pasos de tiempo.

5.4.2 Primera simulación con modelo optimizado: dificultades

Se simuló con la configuración del caso 2 del estudio 3 el problema inicial (ver Tabla 5.4). Durante la simulación se notó que la presión al interior de la cámara de combustión era casi 2 veces mayor que el valor esperado, tanto en el caso de la malla móvil como en el de la malla fija. El origen de la diferencia entre los valores se identificó al hacer una simulación adicional en estado estacionario (caso de malla fija, pero estacionario) con un inlet de presión. Luego de hacer varias simulaciones con distintos valores de presión en el inlet e incluso probando con mallas de diferente radio del grano, se concluyó que había una diferencia entre el valor de flujo másico que Fluent calculaba internamente (a partir de la presión en el inlet), en comparación con el que se calculó a partir de los datos experimentales de tasa de quemado (obtenida a partir de la presión). Al momento de la elaboración de este documento se desconocía acerca del método de cálculo de flujo másico a partir de la presión empleado por Fluent. Debido a esto, se optó por adaptar la expresión de flujo másico de acuerdo a la conversión interna de Fluent. La conversión se presenta a continuación:

$$\dot{m} = 2.4163 \cdot 10^{-8} p$$

Donde la presión, p , está en Pa y el flujo másico en kg/s.

De esta forma, el flujo másico *adaptado* para la simulación, junto con una tasa de quemado acorde y distinta a la anterior, se muestra en la Figura 5.23. Tanto la expresión del flujo másico como la de la tasa de quemado se encuentran en el Anexo D. Este cambio implica que ahora se buscará *reproducir* los resultados de presión interna en el motor del experimento de referencia, pero con datos *adaptados* de flujo másico que no se condicen con la tasa de quemado calculada y la geometría del grano del experimento, ya que, al evaluar la integral de la tasa de quemado, resulta en una regresión de 14.5 mm, es decir, el radio efectivo completo del grano, pero la integral de flujo másico resulta en 94.2 g, prácticamente 4 veces menor que la masa inicial original del grano (379 g).

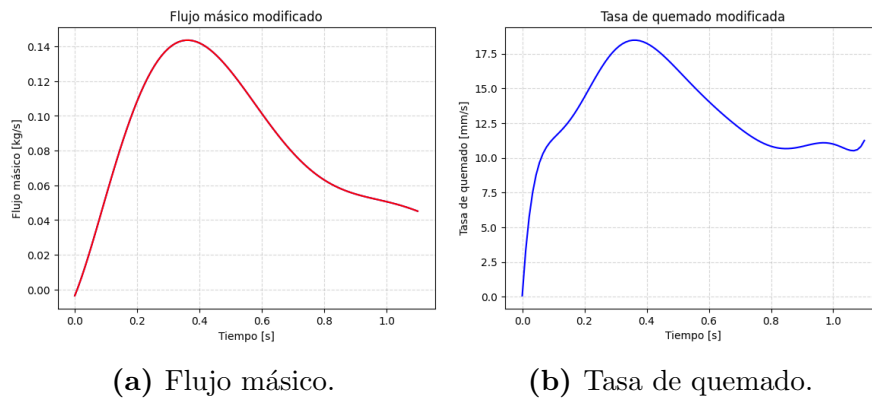


Figura 5.23 Modificaciones a la condiciones de borde de la simulación.

Sumado a este cambio, se debió modificar la malla del caso Overset, ya que se generaron celdas huérfanas que redujeron la velocidad de cómputo y provocaron que los resultados de las variables monitoreadas aumentaran a una tasa no física. La nueva malla tiene 39183 elementos -33720 de la malla de fondo más 5463 de la malla Overset- (más del doble de lo que tenía la anterior -6006 elementos- pero sigue siendo una cantidad baja de elementos) y una geometría modificada para la malla Overset, de modo que asegura que no se generan celdas huérfanas durante el desplazamiento de la malla. En la Figura 5.24 se presentan la malla de fondo y Overset modificadas superpuestas.

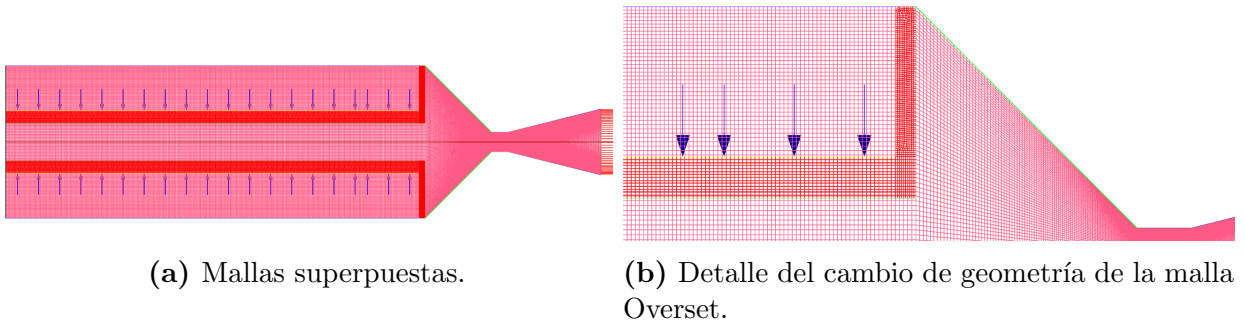


Figura 5.24 Malla de fondo y Overset modificadas, con 39183 elementos en total.

5.4.3 Segunda simulación con modelo optimizado

El cambio en la cantidad de elementos del caso con malla Overset tuvo una limitación que no se pudo sortear: el tiempo de cómputo. Con 30 días de simulación se alcanzó a simular un 67.8% del tiempo total de quemado (0.746 s), por lo que se proyectó que el tiempo requerido para completar el total del tiempo de quemado era de 45 días, tiempo que no se disponía para este proyecto. A pesar de esto, al revisar los resultados parciales se da cuenta de una tendencia que permite, sin problemas, extrapolarlos y extraer conclusiones de ellos. En las figuras 5.25-5.44 se presentan los contornos resultantes de presión estática, velocidad axial y temperatura en el caso de la malla fija y el de la malla Overset.

Los contornos de presión (figuras 5.25-5.30) se presentan usando una escala logarítmica para resaltar el gradiente de presión que existe al interior del motor. Además, las figuras de la malla Overset de estos contornos poseen un rectángulo coloreado en la mitad superior, mientras que en la mitad inferior este rectángulo no aparece. Esto fue hecho con el fin de dar a entender que la zona coloreada corresponde al interior del grano de propelente que, al no ser considerada en la resolución de las ecuaciones durante la simulación, los valores que se obtienen de las variables son todos 0, lo que visualmente equivale a ser una zona invisible.

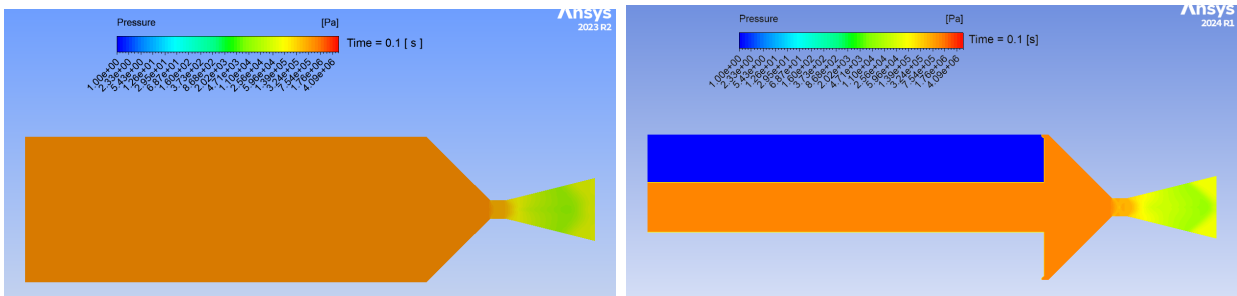
Junto a los contornos de presión, en las figuras 5.31 y 5.32 se presenta la evolución espacial de la presión estática a lo largo de la tobera, resaltando el alcance que tiene cada zona que la compone y la presión ambiente que se fijó en la simulación. Tanto a través de las líneas de contorno que se deforman hacia el interior de la garganta en los contornos de presión como de los valores de presión que se observan en los gráficos recién mencionados es que se concluye que el flujo de gases está continuamente sobre expandido en la salida de la tobera, incluso cuando se alcanza la presión máxima en la cámara, lo que indica que la geometría con la que se diseñó la tobera no fue la adecuada para el escenario de operación, o la combustión del propelente utilizado no ocurrió como se esperaba.

Por último, se presentan en las figuras 5.45-5.47 la evolución en el tiempo de la presión total en el mamparo superior (cámara de combustión), flujo másico, presión estática y velocidad axial máxima a la salida de la tobera, y empuje generado por el motor. La presión en la cámara de combustión y el empuje generado por el motor durante la prueba estática se incluyen en las figuras correspondientes. Si bien se aprecia en la Figura 5.45b que la diferencia promedio entre los casos simulados y los datos experimentales es alta (principalmente debido a la diferencia en el intervalo de tiempo $0 - 0.2$ s), la diferencia que más importa conocer es la que hay entre los valores máximos de presión al interior de la cámara, puesto que de esta depende el factor de seguridad del motor. Así, las diferencias entre los valores de presión máxima entre la malla fija y overset, entre la malla fija y datos experimentales, y entre la malla overset y datos experimentales, son de 2.3%, 7.6% y 5.2%, respectivamente. Una diferencia menor al 10% para la presión máxima al interior de la cámara de combustión constituye un resultado satisfactorio del modelo, por lo que ambos casos (malla fija y malla overset) cumplen con esto.

Las figuras 5.46b y 5.47b, en particular entre los $0 - 0.2$ s, permiten suponer que el uso de una malla overset conduce a una mayor inestabilidad de la solución ante la presencia de ondas de choque, en comparación con una simulación con una malla fija. Los picos de estas oscilaciones son de alta relevancia para la selección adecuada de la carga iniciadora, sin embargo, se necesitaría llevar a cabo simulaciones con distintos experimentos de referencia para corroborar o rechazar la suposición planteada.

La comparación del empuje generado es problemática para este análisis. Tanto por el cambio

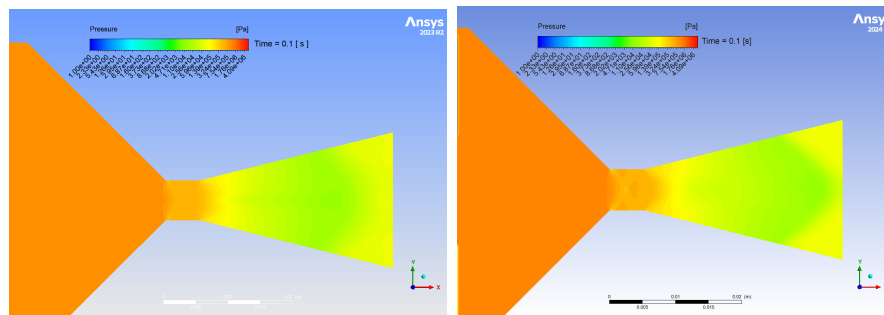
del valor de flujo másico que se debió hacer sobre el inlet del volumen de control al comienzo de la simulación, como por el resultado del empuje generado (Figura 5.47a), es posible concluir que la presión medida en el ensayo experimental no es la que realmente se alcanzó en la prueba, sino que es aproximadamente el doble de esta (11.7 MPa, aprox.). Esta observación limita la validación de los demás resultados y conclusiones sobre el diseño inadecuado del motor. A pesar de esto, la tendencia general de ambos casos simulados es de mantener un solo comportamiento, dando cuenta de la superioridad en eficiencia que supone realizar una simulación con malla fija en vez de overset.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

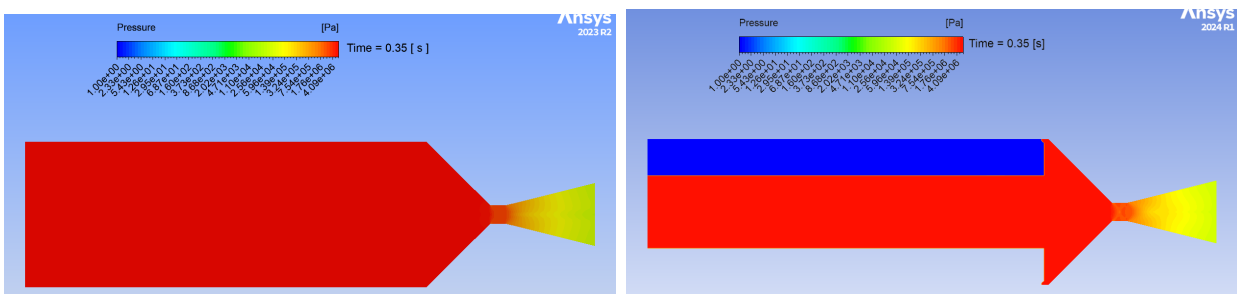
Figura 5.25 Contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.1$ s.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

Figura 5.26 Detalle de la tobera de los contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.1$ s.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

Figura 5.27 Contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.35$ s.

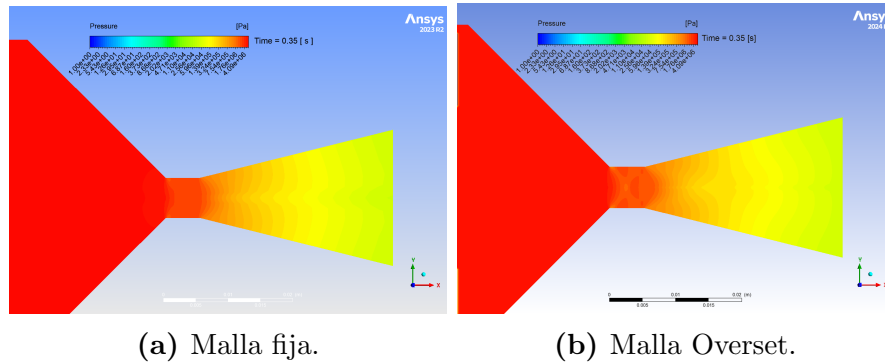


Figura 5.28 Detalle de la tobera de los contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.35$ s.

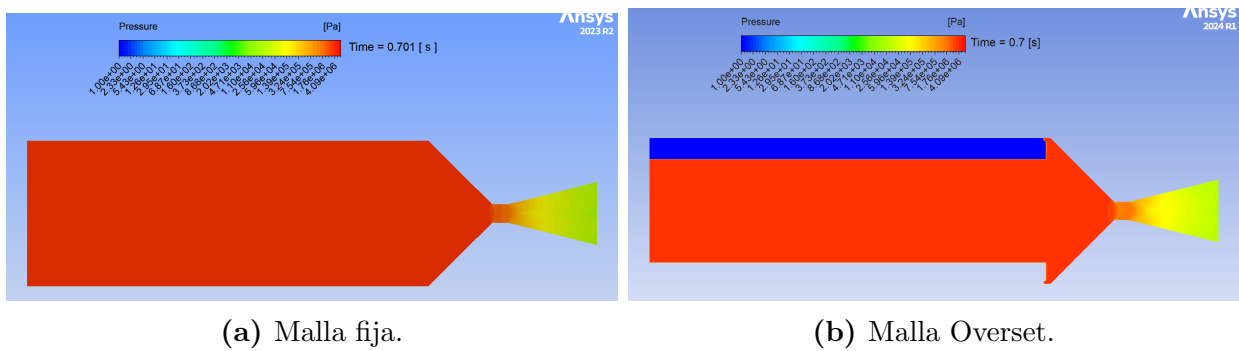


Figura 5.29 Contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.7$ s.

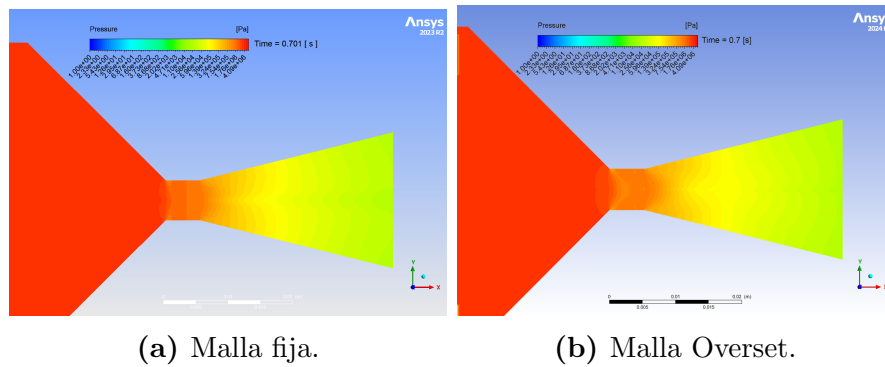


Figura 5.30 Detalle de la tobera de los contornos de presión estática al interior del motor en $t = 0.7$ s.

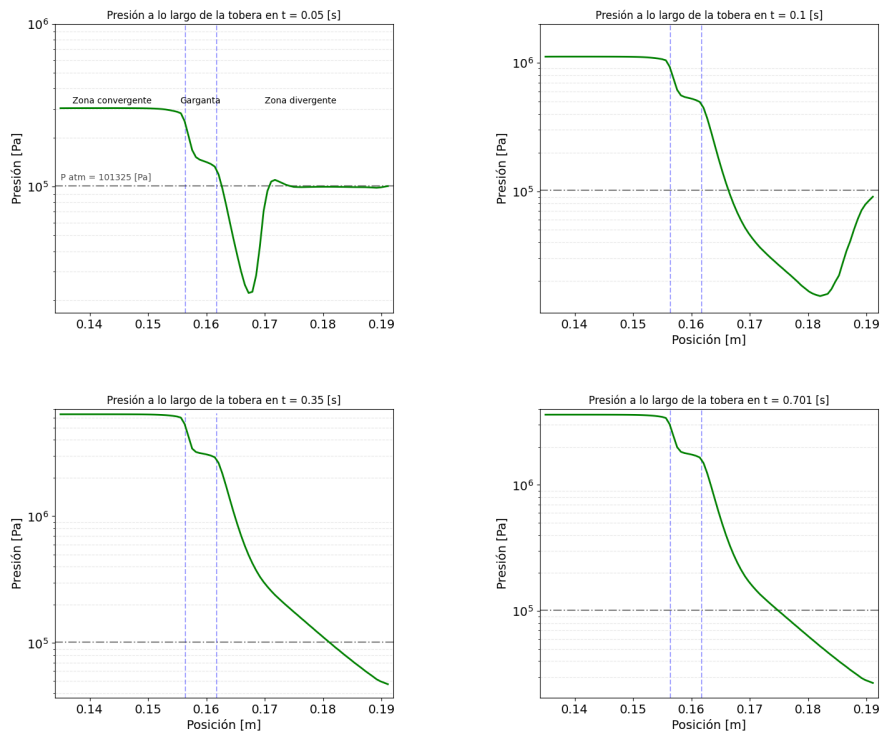


Figura 5.31 Presión a lo largo de la tobera en distintos instantes de tiempo en el caso de la malla fija.

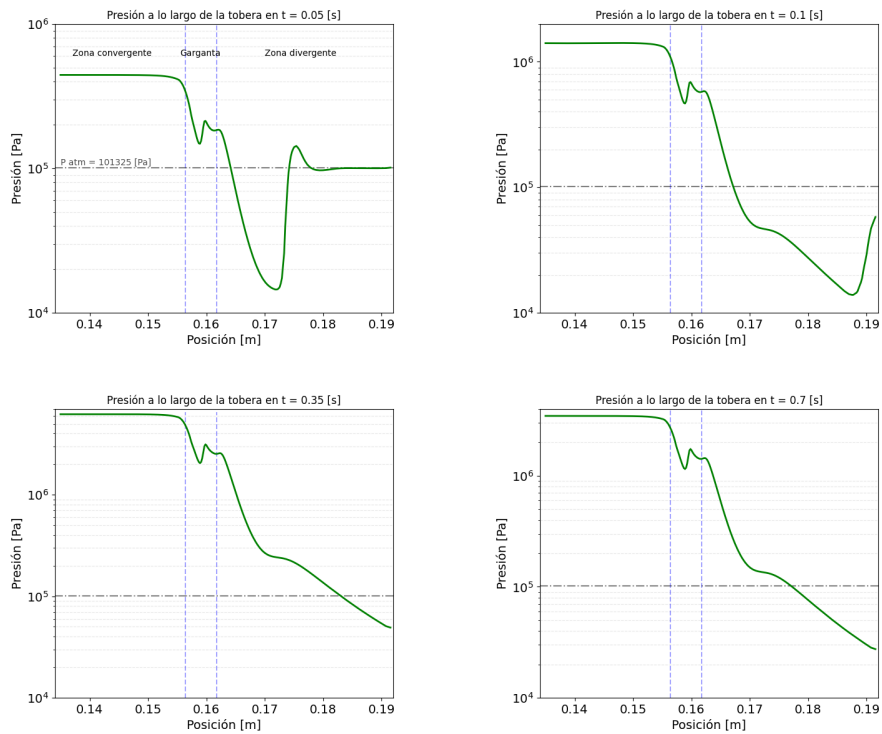


Figura 5.32 Presión a lo largo de la tobera en distintos instantes de tiempo en el caso de la malla overset.

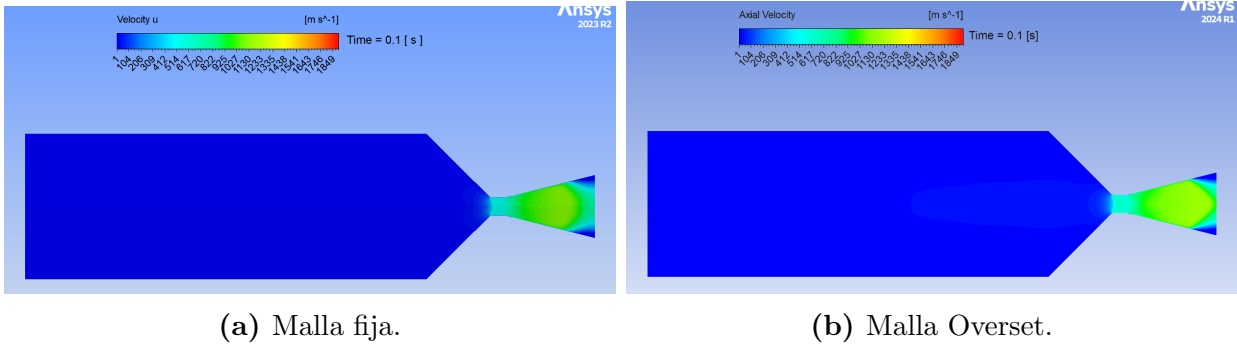


Figura 5.33 Contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.1$ s.

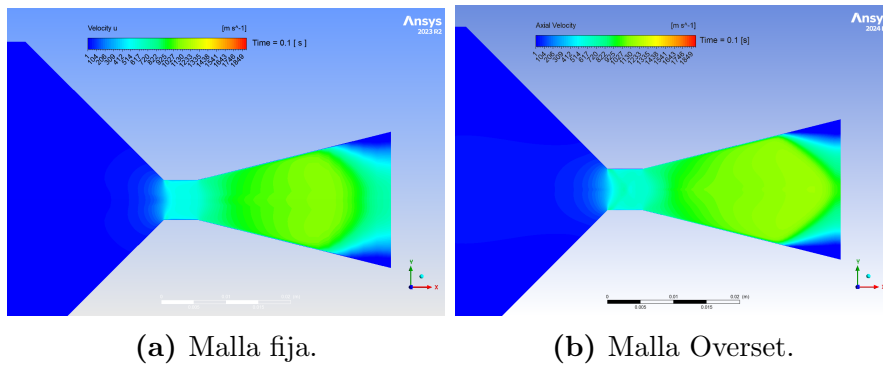


Figura 5.34 Detalle de la tobera de los contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.1$ s.

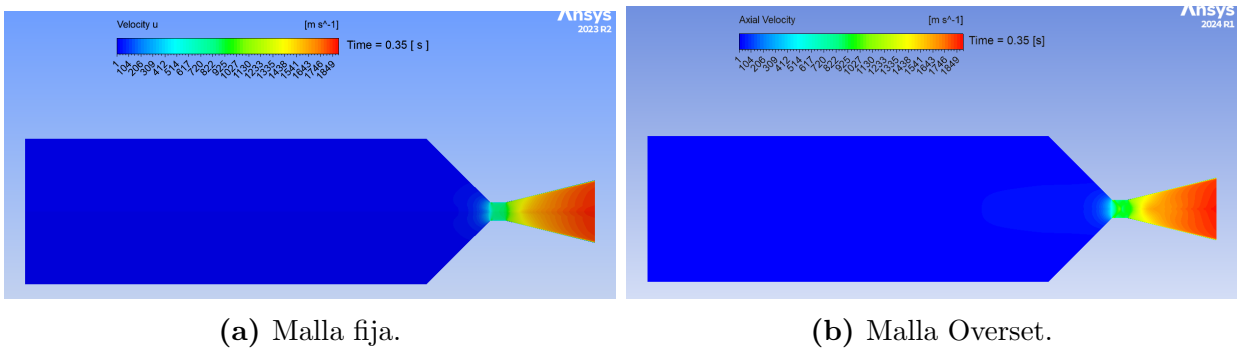


Figura 5.35 Contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.35$ s.

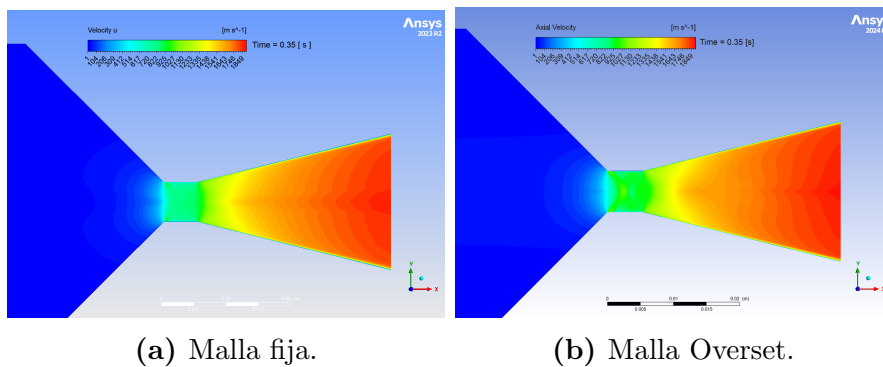
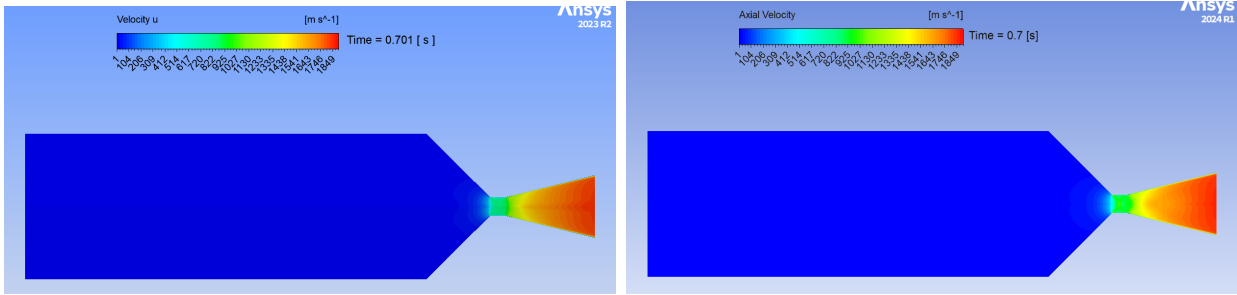


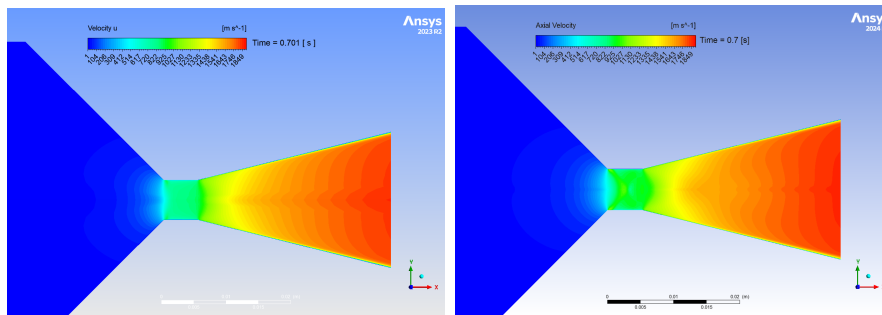
Figura 5.36 Detalle de la tobera de los contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.35$ s.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

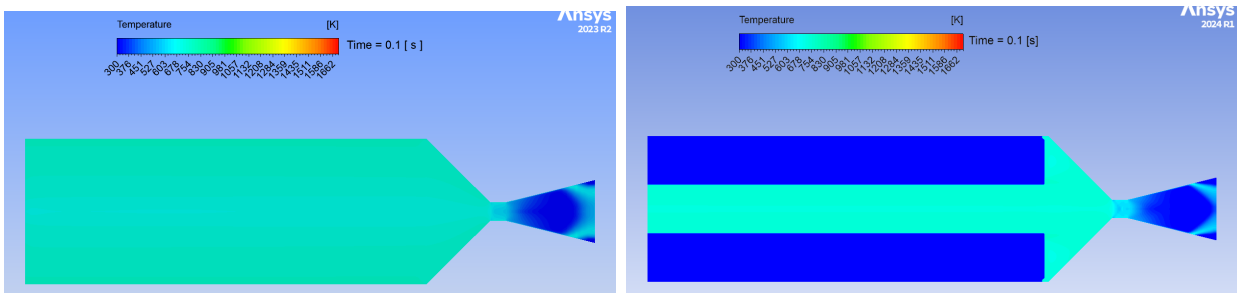
Figura 5.37 Contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.7$ s.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

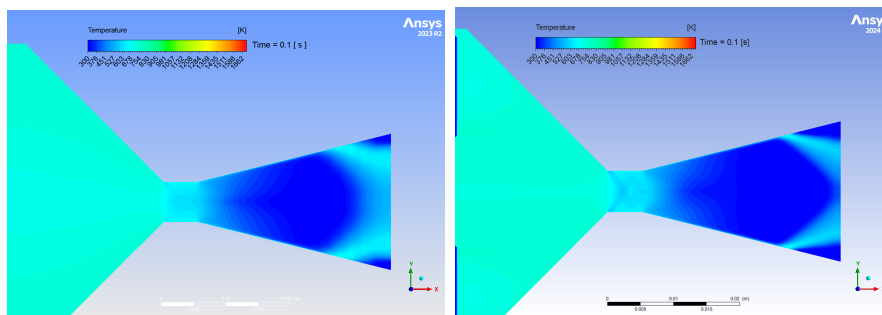
Figura 5.38 Detalle de la tobera de los contornos de velocidad axial al interior del motor en $t = 0.7$ s.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

Figura 5.39 Contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.1$ s.



(a) Malla fija.

(b) Malla Overset.

Figura 5.40 Detalle de la tobera de los contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.1$ s.

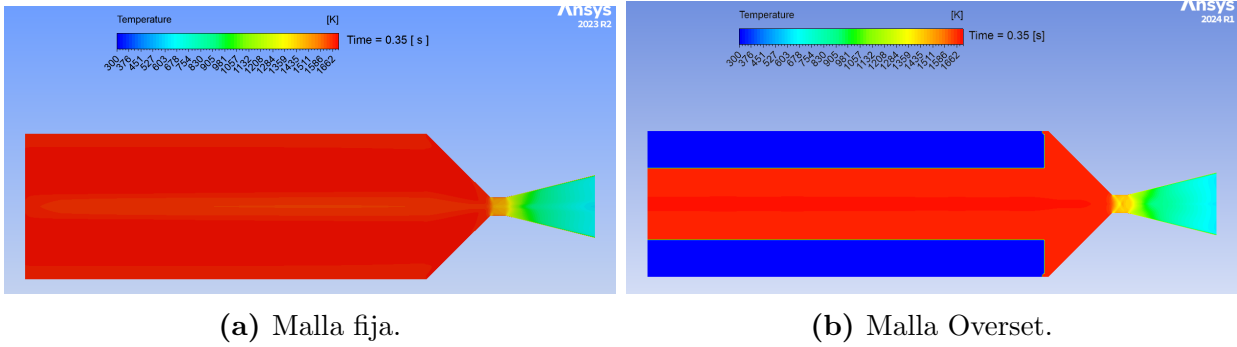


Figura 5.41 Contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.35$ s.

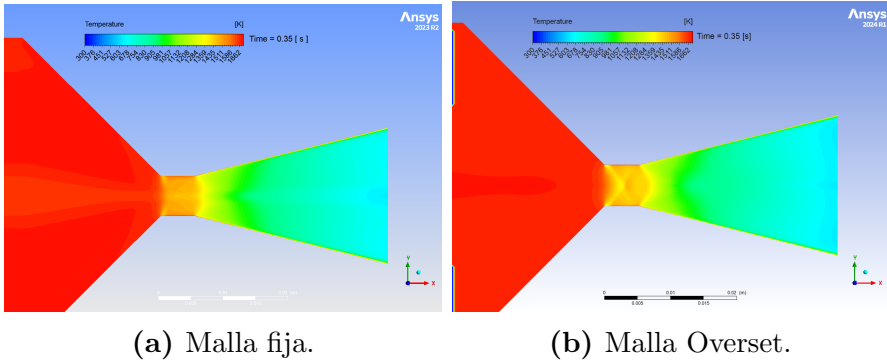


Figura 5.42 Detalle de la tobera de los contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.35$ s.

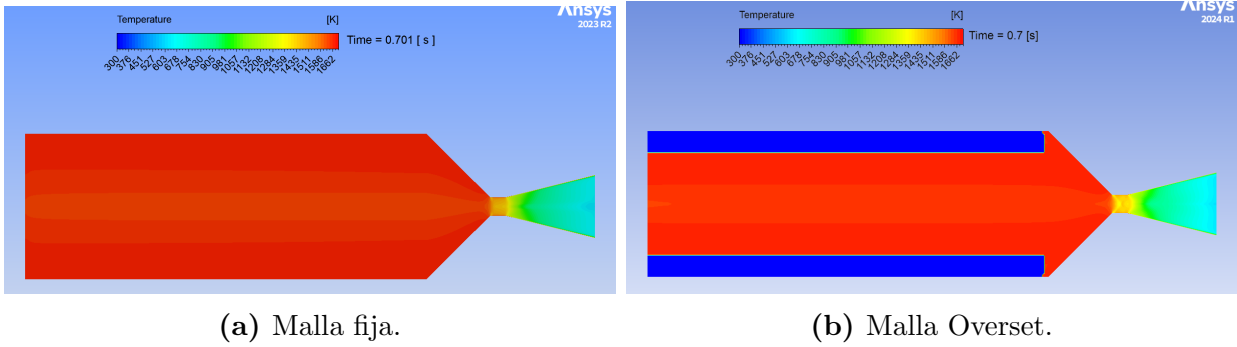


Figura 5.43 Contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.7$ s.

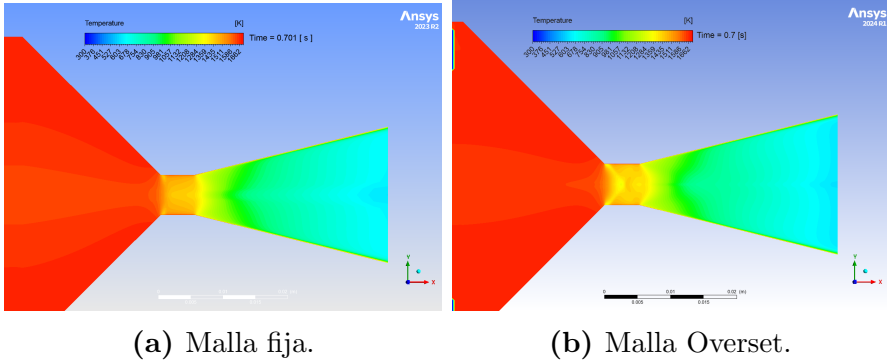
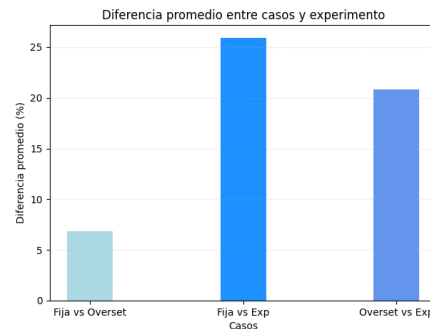
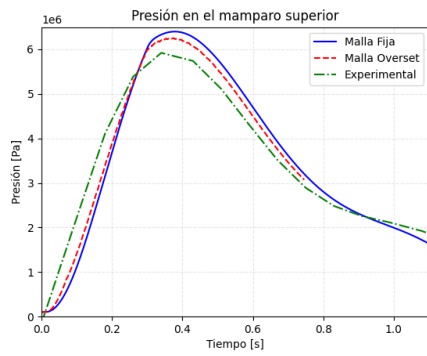
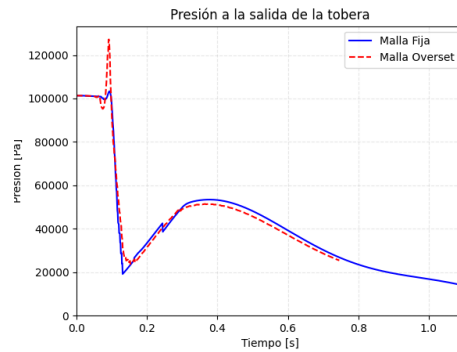
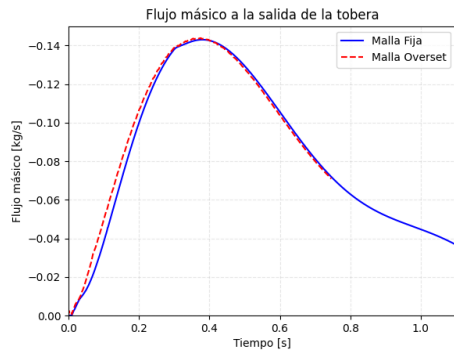


Figura 5.44 Detalle de la tobera de los contornos de temperatura al interior del motor en $t = 0.7$ s.



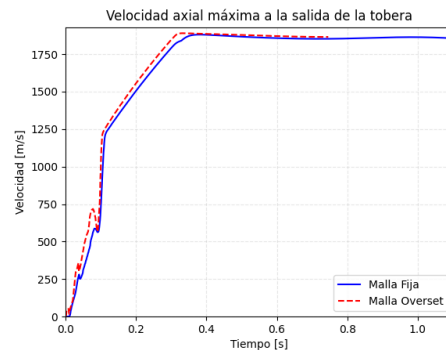
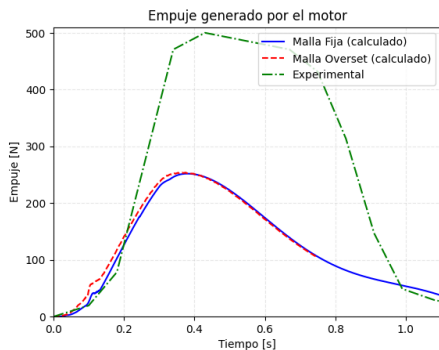
(a) Presión total en el mamparo superior. (b) Diferencia porcentual entre casos.

Figura 5.45 Evolución en el tiempo de la presión total en el mamparo superior del motor (cámara de combustión) y error asociado.



(a) Flujo másico a la salida de la tobera. (b) Presión estática a la salida de la tobera.

Figura 5.46 Evolución en el tiempo del flujo másico y presión estática a la salida de la tobera.



(a) Empuje generado por el motor. (b) Velocidad axial máxima a la salida de la tobera.

Figura 5.47 Evolución en el tiempo del empuje generado y la velocidad axial máxima a la salida de la tobera.

6 Modelo Computacional de Combustión de KNDX

Los modelos presentados en esta sección fueron desarrollados en Python únicamente debido a que el autor manejaba este lenguaje de programación. Se estaba al tanto al momento de desarrollar este modelo sobre la desventaja en cuanto a tiempo de cómputo que significa realizar operaciones en Python, en comparación con otros lenguajes (C++, por ejemplo).

Para desarrollar y validar los modelos, se tomó como volumen de control la mitad de la cámara de combustión del motor del ensayo estático de Rocha [8], que se presenta en el Anexo A. Además, se trabajó en 2D, de modo que el volumen de control fuese axisimétrico. Esto se presenta en la Figura 6.1, donde el volumen de control es la región achurada.

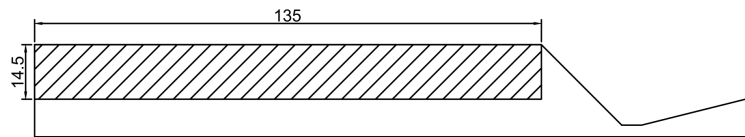


Figura 6.1 Extensión del volumen de control ocupado para modelar la combustión de KNDX.

6.1 Modelación de combustión de KNDX con modelo de composita

6.1.1 Reproducción de resultados de deflagración de AP

El modelo se probó primero con las condiciones planteadas por Cai [10] para la deflagración de AP. La información necesaria para replicar el trabajo de Cai usando la Ecuación 45 no es completamente provista por el autor, por lo que un ajuste manual fue necesario. Este ajuste se hizo modificando el coeficiente de quemado de la Ley de Arrhenius dentro de la misma ecuación (término D_i). Cada punto de la Figura 6.2 se obtuvo a 600, 635, 670 y 700 K de temperatura superficial (T_s) para las presiones de 40, 60, 80 y 100 atm, respectivamente, como se puede desprender de Cai [10]. La modificación hecha aquí del coeficiente de quemado para cada uno de los casos supone que existe una relación entre este, la presión y la temperatura.

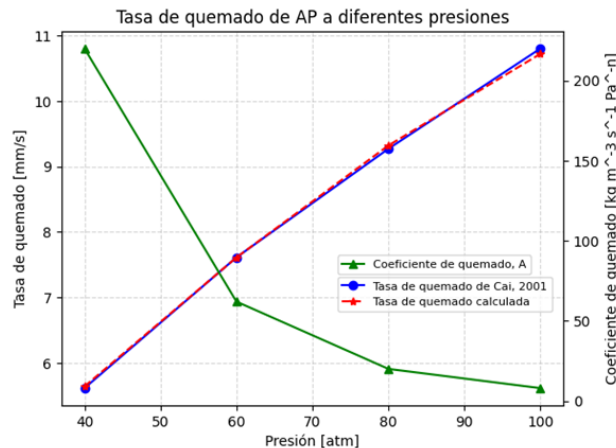


Figura 6.2 Tasa de quemado ajustada a datos experimentales de Cai [10].

6.1.2 Modelación de combustión de KNDX

Teniendo en cuenta el método que se siguió para reproducir los resultados de Cai [10], se prosiguió a modelar la tasa de quemado de KNDX, apuntando a obtener un resultado coherente con el ensayo descrito en la Sección 5.2.

Los valores de las variables empleadas para este modelo se presentan en la Tabla 6.1. Se empleó signo positivo para indicar reacciones exotérmicas y negativo para endotérmicas. El valor del calor de descomposición de la Dextrosa, Q_s , fue calculado como el cociente $E_a R_u / M_w$, con E_a y M_w de la Dextrosa. Similarmente, la energía de activación adimensional del Nitrato de Potasio, E_a / R_u , se obtuvo como $-Q_s M_w / R_u$ (el signo negativo es debido a la convención de signos empleada, ya que la descomposición de KNO_3 acelera a medida que aumenta la temperatura [27]). El valor de la temperatura de llama adiabática, T_f , y la conductividad térmica de los gases, λ_g , fueron obtenidos mediante el software CEA, los cuales son 1700 K y 0.183 W/mK, respectivamente. T_f fue definido como una función en el tiempo, de modo que se alcance aproximadamente el valor adiabático a los 0.3 s. Los coeficientes a y n se ajustaron hasta alcanzar una combustión completa del grano en el tiempo de quemado del ensayo (1.1 s). El tamaño de las partículas, d_p , se supuso en base a la experiencia del autor debido a que no se disponía de este dato al momento de la elaboración de la investigación.

Tabla 6.1 Parámetros empleados en el modelo de combustión de KNDX.

Parámetro	Valor	
	KNO3	DX
Y [-]	0.65	0.35
C_c [J/kg K]	952.23 [28]	1220
M_w [g/mol]	101.1032	180.156
λ_c [W/m K]	0.9 [29]	0.15
ρ_c [kg/m ³]	2100	1560
d_p [μ m]	300	200
α [m ² /s]	4.5e-7	7.88e-8
Q_g [J/kg]	1357377 [27]	1.556e+7
Q_s [J/kg]	-1274525 [27]	-650223
E_a / R_u [K]	15842	14090 [30]
n [-]	2.25	2.23
D [kg/m ³ s Pa ⁿ]	1325	970

Los resultados de la implementación del modelo de quemado en Python (Anexo B.3) se muestran en las Figuras 6.4 y 6.5. De ellas se puede notar la marcada diferencia entre la tasa de quemado de Nitrato de Potasio y la de la Dextrosa, que es la principal contribución a la tasa de quemado del propelente. En parte, esto se puede deber a que la energía de activación del Nitrato de Potasio es más alta que la de la Dextrosa, necesitando más energía para gatillar su descomposición térmica. Sin embargo, al comparar el calor que genera la combustión de la Dextrosa con el generado por la reacción de Nitrito de Potasio y Oxígeno (Q_g del KNO_3), la primera genera más de 10 veces el calor que genera la segunda al costo de la mitad de energía (Q_s). Por otro lado, la calibración de los coeficientes a y n del modelo no describe completamente el comportamiento teórico del quemado de KNDX, que es del tipo plateau [9] (ver Figura 6.3). Esto es en parte debido a que el ajuste de los coeficientes se hizo a través de prueba y error, y en el desarrollo del programa no se encontraron pares de

coeficientes que en conjunto describieran la totalidad de la tasa de quemado de referencia. La estrategia de obtención de los coeficientes se podría corregir con métodos de optimización, pero esto está fuera del alcance de este proyecto.

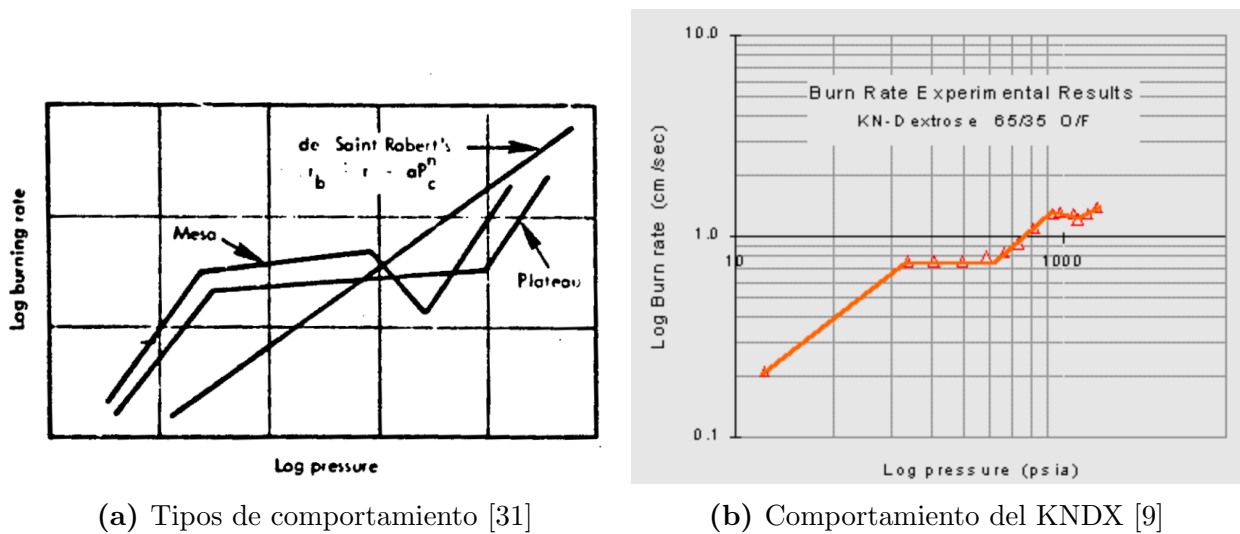


Figura 6.3 Comportamiento de la tasa de quemado.

En la práctica, la justificación de usar una razón O/F 65/35 es únicamente por razones de manufactura. Si bien usar una mayor razón O/F entregaría una mejor performance del motor (que también se desprende de estos resultados), la viscosidad del propelente derretido aumenta al punto de dificultar su colada en los moldes, por lo que es preferible mantener la razón 65/35. Por último, en la Figura 6.6 se presenta la evolución de la tasa de quemado y cómo se optó por visualizar. Más detalles sobre esto se entregan en la sección siguiente.

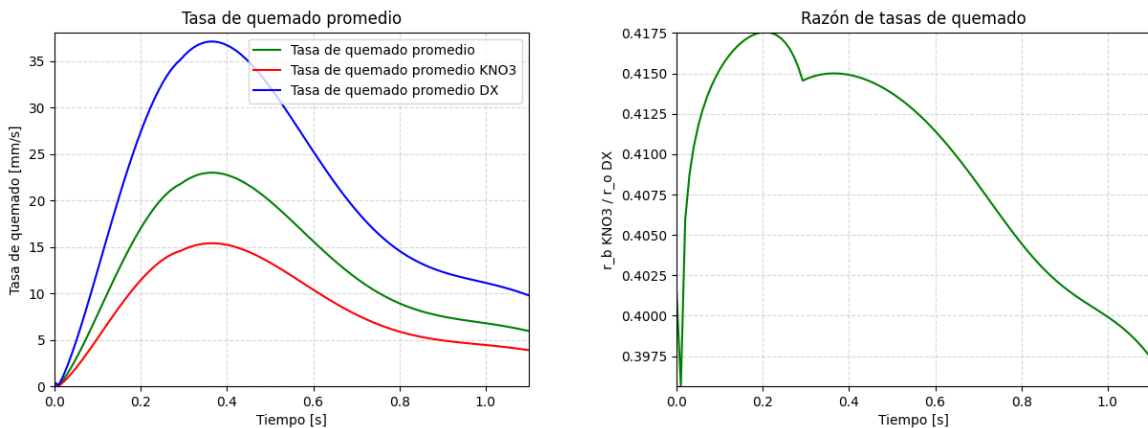
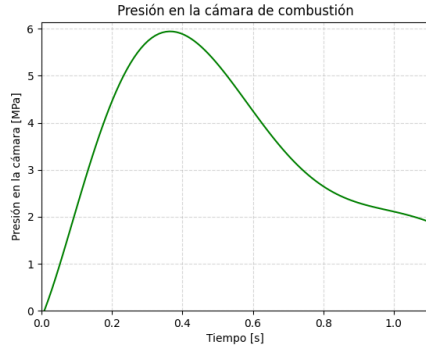


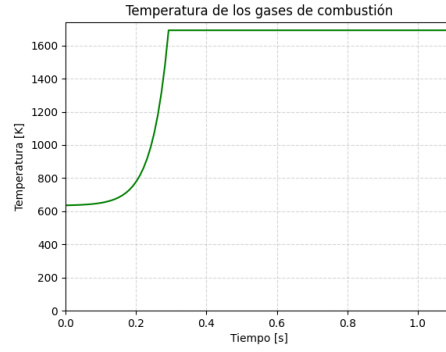
Figura 6.4 Tasa de quemado de KNDX calculada con el modelo de Cai et al. [6].

6.2 Modelación de combustión de KNDX con modelo de quemado erosivo

El modelo de Ma et al. [22] descrito en la Sección 4.2.1.2 se empleó también para modelar la quema de KNDX en el mismo volumen de control ya presentado. Este modelo supone el

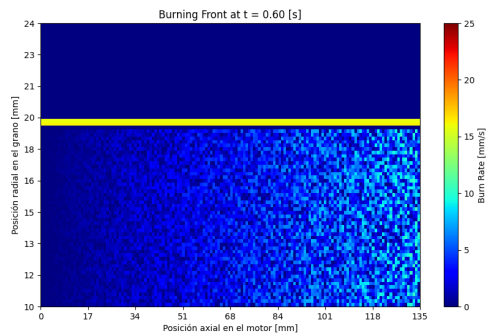


(a) Presión estática.

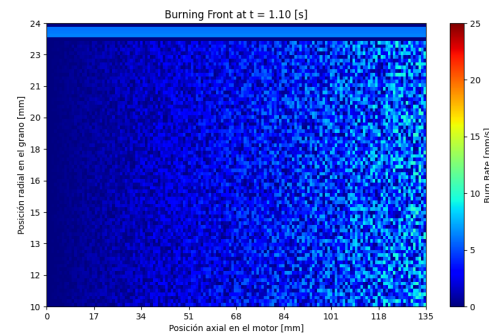


(b) Temperatura de gases.

Figura 6.5 Variables termodinámicas de los gases al interior de la cámara.



(a) Frente de quemado a los 0.6 s.



(b) Frente de quemado a los 1.1 s.

Figura 6.6 Combustión de KNDX con el modelo de Cai et al. [6], vista en 2D.

efecto del incremento en la tasa de quemado del propelente debido al flujo cruzado de los gases de combustión sobre el frente de quemado. Las propiedades que se usaron se presentan en la Tabla 6.2. El valor del calor específico del propelente fue calculado con el porcentaje de masa de cada agente multiplicado por su propio calor específico. Para el Nitrato de Potasio se tomó un valor de 952.2 J/kg K [28], mientras que para la Dextrosa se tomó el valor de 1213.4 J/kg K [32]. La densidad, número de Prandtl, conductividad térmica, calor específico y viscosidad dinámica de los gases fueron obtenidos con el software CEA para la presión de 5.839 MPa , que es la presión máxima registrada en el ensayo estático de Rocha. La temperatura de llama adiabática también fue obtenida con este software, pero se disminuyó a un valor levemente menor debido a problemas de convergencia en la iteración de la tasa de quemado.

La velocidad axial utilizada se definió como una función lineal, con 1 m/s en la tapa del motor ($L = 0$) y 60 m/s al final de la cámara de combustión ($L = 135 \text{ mm}$). Únicamente con el propósito de visualizar los resultados, se construyó una malla bidimensional que representa el volumen de control axi-simétrico descrito por el grano de propelente. Este volumen está limitado horizontalmente entre 0 y 135 mm , y verticalmente por 0 a 14.5 mm , que corresponden al radio efectivo de propelente dentro de la cámara (radio externo del grano menos radio del núcleo). La posición axial utilizada para el cálculo del número de Reynolds se permitió variar en cada elemento de la grilla, de acuerdo a la cantidad de elementos en la dirección axial del volumen de control. De esta forma, se visualiza la resolución unidimensional en varios segmentos del grano simultáneamente.

Tabla 6.2 Parámetros de combustión de KNDX empleados en el modelo.

Parámetro	Valor
$D_{p,i}$ (inicial)	20 mm
L	135 mm
t_{burn}	1.1 s
C_c	1043.6 J/kg K
C_g	1909.3 J/kg K
ρ_g	17.395 kg/m ³
ρ_c	1879 kg/m ³
μ_g	0.65547e-4 Pa s
λ_g	0.183 W/m K
Pr	0.68
T_f	1600 K
T_i	298.15 K
T_s	633.15 K [33]

En la Figura 6.7 se presenta la evolución del frente de quemado sin la inclusión de quemado erosivo, es decir, calculado con la expresión $r_o = ap^n$. Tanto el valor de a como de n para los distintos valores de presión fueron obtenidos de Nakka [9]. Se ajustó una función polinomial de orden 6 a los datos provistos por Nakka y se usó ese polinomio para obtener la tasa de quemado estacionaria en todo instante de tiempo. Estos polinomios se encuentran disponibles en el Anexo B.2. El paso de tiempo se fijó en 0.01 s, pero este valor podría haber sido cualquier otro, ya que su función es únicamente permitir conocer la evolución de la tasa de quemado de manera suave en el tiempo. Para mejorar la visualización de los resultados, se implementó una variación aleatoria de valores en la zona de fase gaseosa, en un intento de representar la liberación de los gases de combustión desde el frente de quemado.

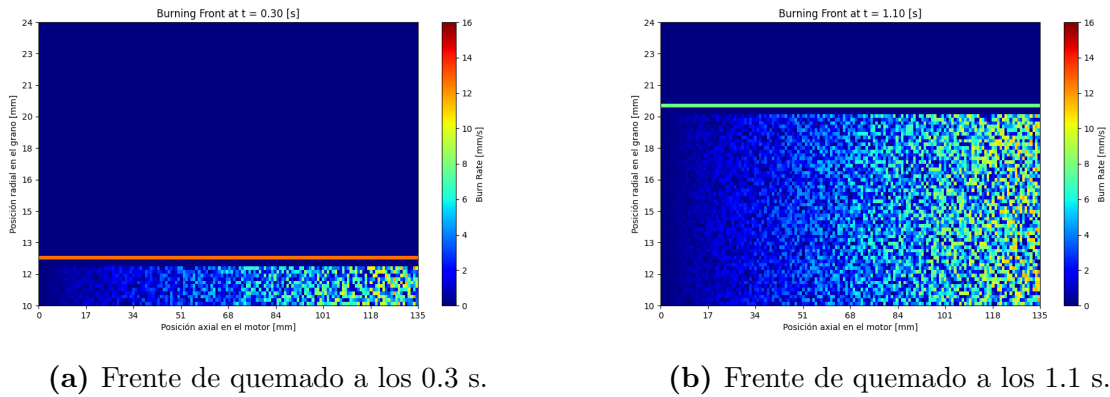
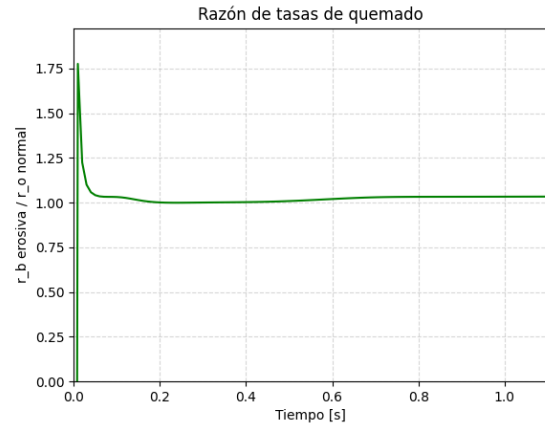
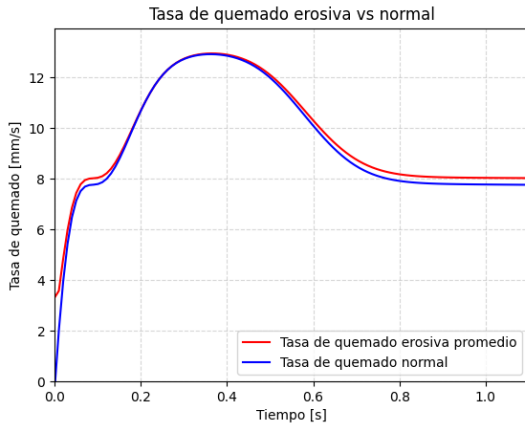


Figura 6.7 Combustión de KNDX sin inclusión de quemado erosivo.

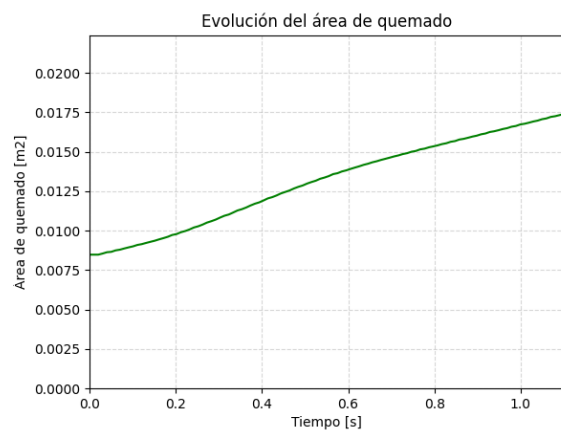
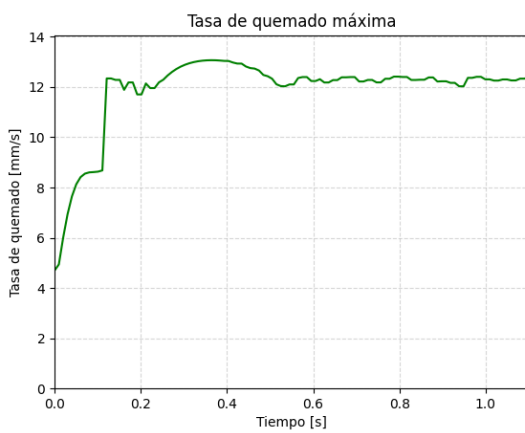
Como es de ver, modelar la tasa de quemado del KNDX en el ambiente de cámara de combustión del ensayo realizado por Rocha [8] usando únicamente la expresión estacionaria $r = ap^n$ no es suficiente para captar la regresión total del grano. Notando esto, se continuó a incluir el quemado erosivo dentro del modelo, cuyos resultados se presentan en las Figuras 6.8 y 6.9. Adicionalmente, se compararon ambas tasas de quemado, se obtuvo la tasa máxima de quemado erosivo y la razón entre las tasas de quemado (r_b/r_o). Estos resultados se presentan en las Figuras 6.10 y 6.11.



(a) Comparación entre tasas de quemado en el tiempo.

(b) Razón entre las tasas de quemado.

Figura 6.10 Tasas de quemado erosiva y normal.



(a) Tasa de quemado máxima.

(b) Área de quemado.

Figura 6.11 Tasa de quemado máxima y área de quemado.

7 Conclusiones

Esta investigación fue concebida como una oportunidad para mejorar la metodología actual de modelación de combustión de propelente sólido que tiene el DIM. Para lograr el salto de un modelo desacoplado a uno acoplado, se recorrió un camino lleno de diversas dificultades que se fueron sorteando lentamente hasta la obtención del modelo que se presentó.

A lo largo de la investigación se alcanzaron hitos relevantes que permitieron cumplir casi todos los objetivos propuestos inicialmente. Si bien se logró generar un modelo CFD que describe la dinámica interna de gases liberados producto de la combustión de propelente sólido al interior de un motor de cohete, la optimización del modelo redujo considerable, pero no suficientemente, el tiempo de cómputo del modelo inicial (80-90 días), cuya iteración final para el caso de la malla fija produjo resultados en 20 días, aproximadamente. Para el caso de malla Overset, que se estimó un tiempo necesario de 45 días para simular el total del tiempo de quemado del caso de referencia, se considera insuficiente la optimización hecha hasta aquí puesto que no se cumple con generar una herramienta cuya rapidez permita iterabilidad en el diseño de un motor de cohete. A pesar de esto, una vez simulado el caso de referencia en ambas mallas se da cuenta de una tendencia en los resultados de ambas. Simular con una malla fija la dinámica de gases al interior de un motor de cohete es una estrategia que no solo es más rápida, sino que además entrega resultados con menos oscilaciones. Las curvas de empuje generado sugieren que los datos experimentales no fueron correctamente medidos, por lo que su comparación con las simulaciones es inconclusa.

El tercer y último objetivo específico se considera que fue alcanzado totalmente, ya que se programaron dos modelos de combustión para buscar describir la combustión de KNDX, un propelente sólido empleado por el GIP. Los modelos diferían en la forma de incorporar los efectos de quemado erosivo a la tasa de quemado y se notó que el modelo de combustión de composita, que considera el efecto de quemado erosivo por medio de una ley multiplicativa, es el que mejor representa la combustión de KNDX; sin embargo, requiere tener conocimiento de la cinética química de la reacción, que no siempre está disponible debido a la dificultad y alto costo que supone la realización de los experimentos necesarios para medir las variables requeridas.

Un aspecto fundamental que impacta la confiabilidad de los resultados obtenidos en esta investigación es la casi nula disponibilidad de datos de mediciones en pruebas estáticas, teniendo que apoyarse en la extrapolación de los datos disponibles para seguir adelante. Para una investigación futura es necesario hacer un plan de trabajo que considere la ejecución de pruebas estáticas rigurosas que permitan validar los modelos que se construyan.

Los modelos con malla fija y malla Overset, en el estado en que aquí se terminan de presentar, no constituyen aún el modelo óptimo. Para llegar a uno con esta característica se requerirá uno o varios trabajos adicionales que se escapen de las recomendaciones de simulación e indaguen en métodos alternativos que tengan reconocimiento dentro de la literatura por ser más eficientes computacionalmente.

Con esto, se cree con seguridad que el modelo desarrollado y aquí expuesto es un avance para la modelación de combustión de propelente sólido en el DIM, no tan solo por la directa inclusión de la cámara de combustión al volumen de control, sino que por la posibilidad de conocer el estado termodinámico de los gases durante la transiente de ignición y posterior combustión estable en todo punto del volumen de control, contribuyendo a facilitar el diseño adecuado del motor.

Esta investigación marca un precedente en cuanto a estrategias de simulación de la dinámica de gases en motores de propelente sólido. No se encontró registro dentro de la literatura de un trabajo que proponga simular la totalidad del tiempo de quemado de una prueba estática usando CFD, por lo que las conclusiones que pueda obtener el lector de esta investigación tendrán la capacidad de ser usadas como punto de partida para un trabajo de mayor complejidad y consideraciones.

Referencias

- [1] Kenneth A. Flores. Mejora de la performance de un cohete balístico con alcance de 1 kilómetro de altura utilizando propelente sólido tipo candy. Proyecto de Ingeniería Aeroespacial, 2019.
- [2] Fernando M. Torres. Análisis de sensibilidad para modelo cfd de tobera de motores balísticos de evaluación tipo bem. Proyecto de Ingeniería Aeroespacial, 2020.
- [3] Fernando M. Torres. Análisis de conceptos para un cohete sonda de propelente sólido a través de modelado de sistema apoyado por cfd de la aerodinámica interna. Memoria de Título, 2021.
- [4] Naminosuke Kubota. *Propellants and Explosives: Thermochemical Aspects of Combustion*. Wiley-VCH, 3 edition, 2015.
- [5] Kenneth Kuo & Martin Summerfield. *Fundamentals of Solid-Propellant Combustion*, volume 90. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 3 edition, 1984.
- [6] Weidong Cai, Piyush Thakre, and Vigor Yang. A model of ap/htpb composite propellant combustion in rocket-motor environments. *Combustion Science and Technology*, 180:2143–2169, 2008.
- [7] Y.J. Cao, Y.G. Yu, and R. Ye. Numerical analysis of ap/htpb composite propellant combustion under rapid depressurization. *Applied Thermal Engineering*, 75:145–153, 2015.
- [8] Ignacio E. Rocha. Propuesta de instrumentación banco estático para motores de cohete sólidos del laboratorio de técnicas aeroespaciales (lta). Proyecto de Ingeniería Aeroespacial, 2021.
- [9] Richard Nakka. Solid rocket motor design, 2023.
- [10] Weidong Cai. *Two-phase Flow Interactions And Combustion Of Ap/Htpb Composite Propellant In Rocket Motors With Acoustic Oscillations*. PhD thesis, The Pennsylvania State University, 2001.
- [11] I. Shih Tseng & Vigor Yang. Combustion of a double-base homogeneous propellant in a rocket motor. *COMBUSTION AND FLAME*, 96:325–342, 1994.
- [12] A. Peretz, K. K. Kuo, L. H. Cavenvy, and M. Summerfield. Starting transient of solid-propellant rocket motors with high internal gas velocities. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 11:1719–1727, 1973.
- [13] Matías Quintana Rebolledo. Revisión de modelos numéricos para la simulación de una cámara de combustión de propelente sólido. Proyecto de Ingeniería Aeroespacial, 2024.
- [14] Cármen López Muñoz. *Combustion Modelling of Solid Propellants*. PhD thesis, Technical University of Cartagena, 2019.
- [15] Laurent Francois. *Multiphysical modelling and simulation of the ignition transient of complete solid rocket motors*. PhD thesis, Institut Polytechnique de Paris, 2022.
- [16] Herman Krier. Solid propellant burning rate during a pressure transient. *Combustion Science and Technology*, 5:69–73, 1972.

- [17] Herman Krier, J. S. T'ien, W. A. Sirignano, and M. Summerfield. Nonsteady burning phenomena of solid propellants: Theory and experiments. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 6:69–73, 1968.
- [18] D. P Mishra. *Fundamentals of Rocket Propulsion*. CRC Press, 1 edition, 2017.
- [19] George P. Sutton and Oscar Biblarz. *Rocket Propulsion Elements*. John Wiley & Sons, Inc, 9 edition, 2017.
- [20] J. M. Lenoir and G. Robillard. A mathematical method to predict the effects of erosive burning in solid-propellant rockets. *Symposium (International) on Combustion*, 6:663–667, 1957.
- [21] E.M Landsbaum. Erosive burning revisited. In *39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*. American Institute of Aeronautics and Astronautics Inc., 2003.
- [22] Yanjie Ma, Futing Bao, Lin Sun, Yang Liu, and Weihua Hui. A new erosive burning model of solid propellant based on heat transfer equilibrium at propellant surface. *International Journal of Aerospace Engineering*, 2020.
- [23] C F COLEBROOK. Turbulent flow in pipes, with particular reference to the transition region between the smooth and rough pipe laws. *Journal of the Institution of Civil Engineers*, 11(4):133–156, 1939.
- [24] S. E. Haaland. Simple and explicit formulas for the friction factor in turbulent pipe flow. *Journal of Fluids Engineering*, 105(1):89–90, 03 1983.
- [25] Kaixuan Chen, Xiaochun Xue, and Yonggang Yu. Modeling transient combustion and regression behavior of nepe propellant based on random particle packing. *Applied Mathematical Modelling*, 126:85–104, 2024.
- [26] Dave Cooper. *ProPep Manual*. NASA, 2017.
- [27] Eli S. Freeman. The kinetics of the thermal decomposition of potassium nitrate and of the reaction between potassium nitrite and oxygen. *Journal of the American Chemical Society*, 79(4):838–842, 1957.
- [28] National Bureau of Standards. *Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties: Circular 500*. U.S. Department of Commerce, 1952.
- [29] Ikushi Yoshida and Shozo Sawada. Thermal conductivity of KNO_3 . *Journal of the Physical Society of Japan*, 15(1):199–200, 1960.
- [30] F. örsi. Kinetic studies on the thermal decomposition of glucose and fructose. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 5(2-3):329 – 335, 1973.
- [31] National Aeronautics and Space Administration. Solid rocket motor performance analysis and prediction. Technical report, NASA, 1971.
- [32] Juliana Boerio-Goates. Heat-capacity measurements and thermodynamic functions of crystalline α -d-glucose at temperatures from 10 k to 340 k. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 23(5):403–409, 1991.
- [33] ALEJANDRO LOPEZ-TELGIE, JHONATHAN O. MURCIA PIÑEROS, and CESAR MORALES-VERDEJO. Characterization of potassium nitrate/dextrose solid rocket propellant using calorimetry. *J. Chil. Chem. Soc.*, 68:5762–5766, 2023.

A Planos del BEM

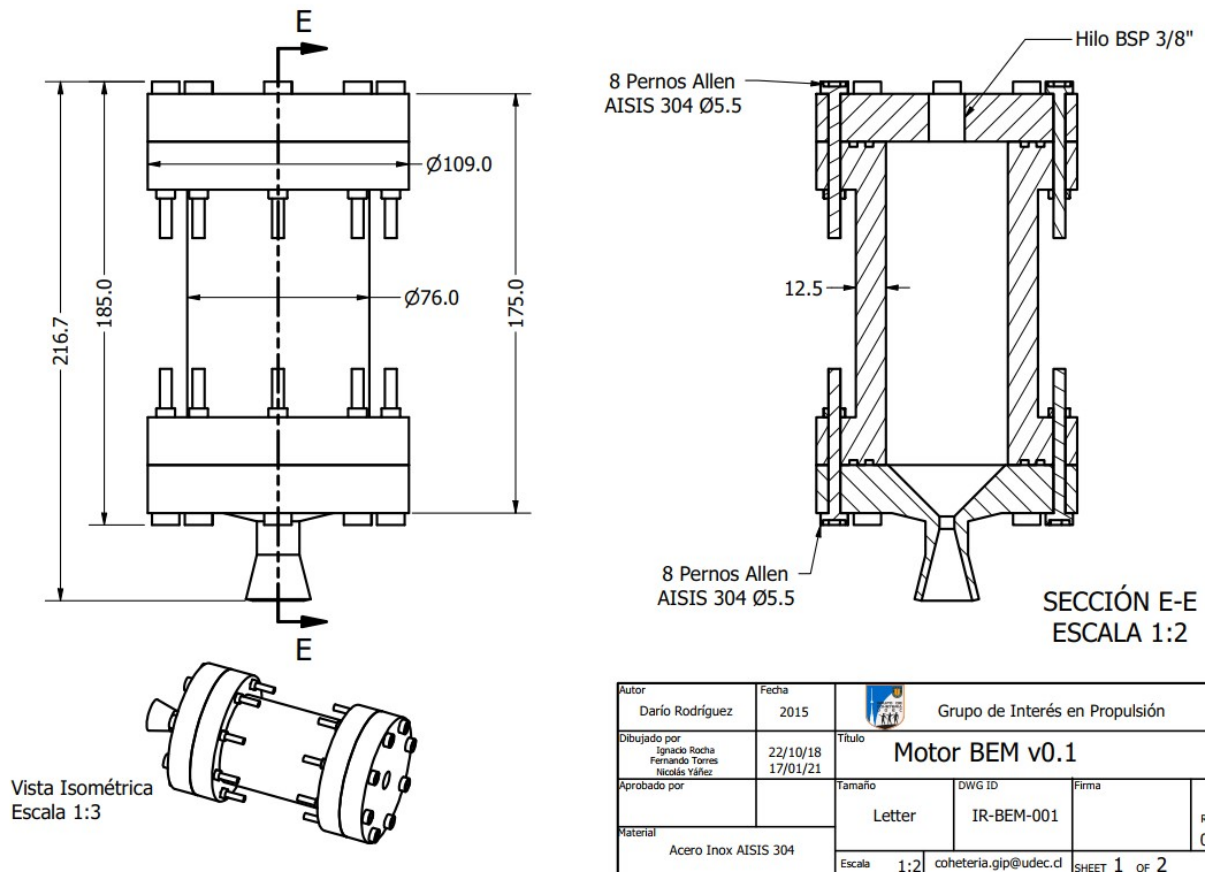


Figura A.1 Vista general del motor BEM del GIP.

B Códigos de Python

B.1 Adición de propelentes a la base de datos de CEA

```
from rocketcea.cea_obj import CEA_Obj, add_new_fuel, add_new_oxidizer
from rocketcea.cea_obj import add_new_propellant

card_str = """
oxid KNO3   K 1.0 N 1.0 O 3.0   wt%=100
h,cal=-117989.924   t(k)=298.15 rho=2.1
"""
add_new_oxidizer( 'KNO3', card_str )

# =====
card_str = """
fuel C6H12O6 C 6.0   H 12.0   O 6.0   wt%=100.00
h,cal=-304416.352   t(k)=298.15   rho=1.569
"""
add_new_fuel( 'DX', card_str )

C = CEA_Obj(oxName="KNO3", fuelName="DX")

s = C.get_full_cea_output(Pc=857,
                          MR=1.857,
                          eps=[3.54, 11.58],
                          subar=[19.82],
                          fac_CR=62.46,
                          output='siunits',
                          short_output=0)

print( s )
```

B.2 Aproximaciones polinómicas

B.2.1 Presión registrada en la prueba estática de Rocha

$$p(t) = 115.55 * t ** 6 - 481.29 * t ** 5 + 739.72 * t ** 4 - \dots \\ 485.75 * t ** 3 + 95.726 * t ** 2 + 18.286 * t - 0.1485$$

B.2.2 Tasa de quemado estacionaria de Nakka para KNDX

$$r_o(p(t)) = -7.86492199e-04 * p ** 6 + 2.86963764e-02 * p ** 5 - \dots \\ 3.96660464e-01 * p ** 4 + 2.57341883e+00 * p ** 3 - \dots \\ 7.92611199e+00 * p ** 2 + 1.14258435e+01 * p + 1.51237438e+00$$

B.3 Implementación del modelo de combustión de Cai et al., 2008

```
import numpy as np
```

```

import matplotlib.pyplot as plt
import math
from functions import r_p, p_t

# Geometry
grainRadius = 14.5/1000 # (effective) Grain Radius, m
chamberLength = 135/1000 # Combustion chamber total length, m
chamberDiameter = 49 / 1000 # Combustion chamber diameter, m
portDiameter = 20e-3 # (initial) Diameter of the port, m

reactantMassFrac = np.array([0.65, 0.35])

# Reaction rate function (as in Cai 2001 and Cai 2008)
def reaction_rate(gasPress, surfaceTemp, gasTemp, specie):
    # Parameters
    R_U = 8.134 # J/(mol * K)
    gasThermalCond = 0.183 # W/(m*K)
    reactantMolWeight = np.array([101.1032, 180.156]) # g/mol
    reactantThermalCond = np.array([0.9, 0.15]) # W/(m*K)
    reactantDensity = np.array([2100, 1560]) # kg/m^3
    reactantParticleDiam = np.array([300e-6, 200e-6]) # m
    reactantSpecHeat = np.array([952.23, 1220]) # J/(kg*K)
    reactantThermalDiffus = reactantThermalCond /
    (reactantDensity * reactantSpecHeat) # m^2/s
    HeatOfCombustion = np.array([1357377, 1.556e+7]) # J/kg
    HeatOfDecompos = np.array([-1274525, -650223]) # J/kg
    preExpFactor = np.array([1325, 970]) # kg/(m^3 * s * Pa^n)
    n = np.array([2.24, 2.2])
    E = np.array([(-HeatOfDecompos[0] * reactantMolWeight[0]/1000)/R_U, 14090]) # K

    if specie == "0x":
        k = int(0)
    else:
        k = int(1)
    A = HeatOfCombustion[k] / (2 * reactantSpecHeat[k] * surfaceTemp) # [-]
    B = gasThermalCond * (gasTemp - surfaceTemp) /
    (reactantParticleDiam[k] * reactantDensity[k]
    * reactantSpecHeat[k] * surfaceTemp) # m/s
    C = reactantThermalDiffus[k] / reactantDensity[k] # m^5/(kg*s)
    F = preExpFactor[k] * gasPress ** n[k] *
    math.exp(-E[k] / surfaceTemp) / (E[k] / surfaceTemp) # kg/(m^3 * s)
    G = HeatOfCombustion[k] / HeatOfDecompos[k] # [-]

    rx_rate = np.zeros(2)
    rx_rate[0] = -B + np.sqrt(B ** 2 - 4 * A * C * F * G) / (2 * A)
    rx_rate[1] = -B - np.sqrt(B ** 2 - 4 * A * C * F * G) / (2 * A)

    if B ** 2 - 4 * A * C * F * G < 0: # No real roots
        print("No real roots for", specie, "burn rate calculation")

```

```

    if rx_rate[0] > 0:
        rx_rate = rx_rate[0]
    elif specie == "Ox" and (rx_rate[0] < 0 and rx_rate[1] < 0):
        print("WARNING: Oxydizer negative reaction rate")
        rx_rate = 0
    elif k == int(1) and (rx_rate[0] < 0 and rx_rate[1] < 0):
        print("WARNING: Fuel negative reaction rate")
        rx_rate = 0
    elif rx_rate[1] > 0:
        rx_rate = rx_rate[1]
    return rx_rate

# Discretisation
burnTime = 1.1 # Time, s
xNodes = 80 # Number of radius nodes
yNodes = 150 # Number of axial nodes
dx = grainRadius / xNodes # Grid size in x (radial) direction, m
dy = chamberLength / yNodes # Grid size in y (axial) direction, m
dt = 1e-2 # Time step, s

# Initial conditions
surfaceTemperature = 633 # Solid temperature, K
gasTemperature = 634 # Gas temperature, K
gasPressure = 101325 # Pressure, Pa
burnRate = np.zeros((xNodes,yNodes)) # Burn rate, m/s
distance = np.zeros(yNodes)

# Visualization
fig, axis = plt.subplots()
fig.set_figheight(6)
fig.set_figwidth(10)
pcm = axis.pcolormesh(burnRate, cmap=plt.cm.jet)
cbar = plt.colorbar(pcm, ax=axis)
cbar.set_label('Burn Rate [mm/s]')
axis.set_xticks(np.linspace(0, yNodes, 9))
axis.set_xticklabels([ "{:.0f}".format(i) for i in np.linspace(0,
chamberLength * 1000, 9)])
axis.set_xlabel("Posición axial en el motor [mm]")
axis.set_yticks(np.linspace(0, xNodes, 10))
axis.set_yticklabels([ "{:.0f}".format(i) for i in
np.linspace(portDiameter*1000 / 2, chamberDiameter * 1000 / 2, 10)])
axis.set_ylabel("Posición radial en el grano [mm]")

# Simulation
count = 0
avg_burnRate = np.array([])
avg_OxBurnRate = np.array([])
avg_FuBurnRate = np.array([])
avg_gasTemperature = np.array([])

```

```

max_burnRate = np.array([])
max_OxBurnRate = np.array([])
max_FuBurnRate = np.array([])
acc_avg_burnRate = np.array([])
acc_avg_OxBurnRate = np.array([])
acc_max_OxBurnRate = np.array([])
acc_avg_FuBurnRate = np.array([])
acc_max_FuBurnRate = np.array([])
acc_temperature = np.array([])
acc_pressure = np.array([])

# Main loop
i = [0 for k in range(0,yNodes)]
position = np.zeros(yNodes)

while count < burnTime:
    gasPressure = p_t(count) * 1e6
    if gasPressure < 0:
        gasPressure = 101325
    if count < 0.3:
        gasTemperature = 634 + np.exp(count * 21.8) * 1.9
    avg_gasTemperature = np.append(avg_gasTemperature, gasTemperature)

    for j in range(0, yNodes):
        burnRate[i[j],j] =
            reaction_rate(gasPressure, surfaceTemperature, gasTemperature, "Ox") *
            reactantMassFrac[0] +
            reaction_rate(gasPressure, surfaceTemperature, gasTemperature, "F") *
            reactantMassFrac[1]
        distance[j] += burnRate[i[j],j] * dt # m
        if burnRate[i[j],j] > 0:
            avg_burnRate = np.append(avg_burnRate, burnRate[i[j],j])
            avg_OxBurnRate = np.append(avg_OxBurnRate,
                reaction_rate(gasPressure, surfaceTemperature, gasTemperature, "Ox"))
            avg_FuBurnRate = np.append(avg_FuBurnRate,
                reaction_rate(gasPressure, surfaceTemperature, gasTemperature, "F"))
            if distance[j] >= dx and i[j] < xNodes-(distance[j] // dx):
                position[j] += distance[j] // dx
                distance[j] = distance[j] - distance[j] // dx * dx
                if position[j] >= xNodes-1:
                    position[j] = xNodes-1
                i[j] = int(position[j])
                if i[j] <= 4:
                    burnRate[0:(i[j]-2),j] = 0
                else:
                    burnRate[(i[j]-3):(i[j]-2),j] = 0
                    burnRate[0:(i[j]-3),j] = np.random.uniform(0,
                        1e-3, i[j] - 3) * j / 14
            elif burnRate[i[j],j] == 0:

```

```

        print("WARNING: Zero burn rate at t = {:.2f} [s] in
              cells [{:.f}, {:.f}] ".format(count, i[j], j))

portDiameter = 20e-3 + 2 * np.mean(position) * dx
if np.mean(avg_burnRate) > 0:
    print("Time: {:.2f} [s]".format(count))
    print("Average burn rate: {:.1f} [mm/s]. {:.1f} [mm/s] from
          Oxydizer and {:.1f} [mm/s] from Fuel".format(np.mean(avg_burnRate) * 1000,
              np.mean(avg_OxBurnRate)*1000, np.mean(avg_FuBurnRate)*1000))
    print("Max burn rate: {:.2f} [mm/s]".format(
          np.max(burnRate[int(np.mean(position))-3:], :) * 1000))
if np.mean(position) >= xNodes-1:
    print("Grain burned out at t = {:.2f} [s]".format(count))
    break
print("Grain core diameter: {:.2f} [mm]".format(portDiameter * 1000))
print("-----")

max_burnRate = np.append(max_burnRate,
    np.max(burnRate[int(np.mean(position))-3:, :]))
acc_avg_burnRate = np.append(acc_avg_burnRate, np.mean(avg_burnRate))
acc_avg_OxBurnRate = np.append(acc_avg_OxBurnRate, np.mean(avg_OxBurnRate))
acc_max_OxBurnRate = np.append(acc_max_OxBurnRate, np.max(avg_OxBurnRate))
acc_avg_FuBurnRate = np.append(acc_avg_FuBurnRate, np.mean(avg_FuBurnRate))
acc_max_FuBurnRate = np.append(acc_max_FuBurnRate, np.max(avg_FuBurnRate))
acc_temperature = np.append(acc_temperature, np.mean(avg_gasTemperature))
acc_pressure = np.append(acc_pressure, p_t(count))
avg_burnRate = np.array([])
avg_OxBurnRate = np.array([])
avg_FuBurnRate = np.array([])
avg_gasTemperature = np.array([])
count += dt
pcm.set_array(burnRate * 1000)
pcm.set_clim(vmin=0, vmax=22)
axis.set_title("Burning Front at t = {:.2f} [s]".format(count))
plt.pause(0.001)

# Updating the plot
plt.show()

t_n = np.linspace(0, count, len(acc_avg_burnRate))

an = input("Show plots? [Yes/No]: ")
if an == "Yes" or an == "yes":
    an2 = input("Select how to show the plots [All/Individual]: ")
    if an2 == "All" or an2 == "all":
        fig, axs = plt.subplots(2, 3, figsize=(18, 9))

        axs[0, 0].plot(t_n, acc_avg_burnRate * 1000, 'g',
            label='Tasa de quemado promedio')

```

```

axs[0, 0].plot(t_n, acc_avg_OxBurnRate * 1000, 'r',
label='Tasa de quemado promedio KNO3')
axs[0, 0].plot(t_n, acc_avg_FuBurnRate * 1000, 'b',
label='Tasa de quemado promedio DX')
axs[0, 0].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
axs[0, 0].legend(loc='upper right')
axs[0, 0].set_xlabel('Tiempo [s]')
axs[0, 0].set_ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
axs[0, 0].set_title('Tasa de quemado promedio')
axs[0, 0].set_xlim(0, t_n[-1])
axs[0, 0].set_ylim(0, np.max([np.max(acc_avg_burnRate),
np.max(acc_avg_OxBurnRate), np.max(acc_avg_FuBurnRate)]) * 1000 + 1)

axs[0, 1].plot(t_n, max_burnRate * 1000, 'g',
label='Tasa de quemado máxima')
axs[0, 1].plot(t_n, acc_max_OxBurnRate * 1000, 'r',
label='Tasa de quemado máxima KNO3')
axs[0, 1].plot(t_n, acc_max_FuBurnRate * 1000, 'b',
label='Tasa de quemado máxima DX')
axs[0, 1].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
axs[0, 1].legend(loc='upper right')
axs[0, 1].set_xlabel('Tiempo [s]')
axs[0, 1].set_ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
axs[0, 1].set_title('Tasa de quemado máxima')
axs[0, 1].set_xlim(0, t_n[-1])
axs[0, 1].set_ylim(0, np.max([np.max(max_burnRate),
np.max(acc_max_OxBurnRate), np.max(acc_max_FuBurnRate)]) * 1000 + 1)

axs[0, 2].plot(t_n, acc_avg_OxBurnRate / acc_avg_FuBurnRate, 'g',
label='Razón de tasas de quemado')
axs[0, 2].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
axs[0, 2].set_xlabel('Tiempo [s]')
axs[0, 2].set_ylabel('r_b KNO3 / r_o DX')
axs[0, 2].set_title('Razón de tasas de quemado')
axs[0, 2].set_xlim(0, t_n[-1])
axs[0, 2].set_ylim(np.min(acc_avg_OxBurnRate / acc_avg_FuBurnRate),
np.max(acc_avg_OxBurnRate / acc_avg_FuBurnRate))

axs[1, 0].plot(t_n, acc_temperature, 'g')
axs[1, 0].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
axs[1, 0].set_xlabel('Tiempo [s]')
axs[1, 0].set_ylabel('Temperatura [K]')
axs[1, 0].set_title('Temperatura de los gases de combustión')
axs[1, 0].set_xlim(0, t_n[-1])
axs[1, 0].set_ylim(0, np.max(acc_temperature) + 50)

axs[1, 1].plot(t_n, acc_pressure, 'g')
axs[1, 1].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
axs[1, 1].set_xlabel('Tiempo [s]')

```

```

    axs[1, 1].set_ylabel('Presión en la cámara [MPa]')
    axs[1, 1].set_title('Presión en la cámara de combustión')
    axs[1, 1].set_xlim(0, t_n[-1])
    axs[1, 1].set_ylim(0, np.max(acc_pressure) + 0.2)

plt.tight_layout()
plt.show()
else:
    plt.plot(t_n, acc_avg_burnRate * 1000, 'g',
             label='Tasa de quemado promedio')
    plt.plot(t_n, acc_avg_OxBurnRate * 1000, 'r',
             label='Tasa de quemado promedio KNO3')
    plt.plot(t_n, acc_avg_FuBurnRate * 1000, 'b',
             label='Tasa de quemado promedio DX')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.legend(loc='upper right')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
    plt.title('Tasa de quemado promedio')
    plt.xlim(0, t_n[-1])
    plt.ylim(0, np.max([np.max(acc_avg_burnRate),
                        np.max(acc_avg_OxBurnRate), np.max(acc_avg_FuBurnRate)]) * 1000 + 1)
    plt.show()

    plt.plot(t_n, max_burnRate * 1000, 'g')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
    plt.title('Tasa de quemado máxima')
    plt.xlim(0, t_n[-1])
    plt.ylim(0, np.max(max_burnRate) * 1000 + 1)
    plt.show()

    plt.plot(t_n, acc_avg_burnRate * 1000 / r_p(p_t(t_n)), 'g',
             label='Razón de tasas de quemado')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('burnRate erosiva / r_o normal')
    plt.title('Razón de tasas de quemado')
    plt.xlim(0, t_n[-1])
    plt.ylim(0, np.max(acc_avg_burnRate * 1000 / r_p(p_t(t_n)) + 0.2))
    plt.show()

    plt.plot(t_n, acc_temperature, 'g')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('Área de quemado [m2]')
    plt.title('Evolución del área de quemado')
    plt.xlim(0, t_n[-1])

```

```

plt.ylim(0, np.max(acc_temperature) + 50)
plt.show()

plt.plot(t_n, acc_pressure, 'g')
plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
plt.xlabel('Tiempo [s]')
plt.ylabel('Presión en la cámara [MPa]')
plt.title('Presión en la cámara de combustión')
plt.xlim(0, t_n[-1])
plt.ylim(0, np.max(acc_pressure) + 0.2)
plt.show()
else:
    print("--Simulation finished--")

```

B.4 Implementación del modelo de combustión de Ma et al., 2020

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import math
import random
from functions import r_p, p_t

# Geometry
De = 14.5/1000 # Grain Radius, m
L_tot = 135/1000 # Combustion chamber total length, m

# Parameters
k_g = 0.183 # Thermal conductivity of gas phase, W/(m*K)
rho_c = 1879 # kg/m^3
rho_g = 17.395 # kg/m^3
C_ps = 1043.6 # Specific heat of solid phase, J/(kg*K)
C_pg = 1909.3 # J/kg K
D = 0.02 # m (diameter of the port)
Pr = 0.68
T_f = 1600 # K
T_i = 298.15 # K
T_s = 360 + 273.15 # K
mu = 0.65547e-4 # kg/m s

# DISCRETISATION
t = 1.1 # Time, s
Nx = 80 # Number of radius nodes
Ny = 150 # Number of axial nodes
dx = De/Nx # Grid size in x (radial) direction, m
dy = L_tot/Ny # Grid size in y (axial) direction, m
dt = 1e-2 # Time step, s
print(dx,dy,Nx,Ny)

```

```

# Initial conditions
p = np.zeros((Nx,Ny)) + 101325 # Pressure, Pa
r_b = np.zeros((Nx,Ny)) + 1e-5 # Burn rate, m/s
dist = np.zeros((Nx,Ny))

# Visualization
fig, axis = plt.subplots()
fig.set_figheight(6)
fig.set_figwidth(10)
pcm = axis.pcolormesh(r_b, cmap=plt.cm.jet)
cbar = plt.colorbar(pcm, ax=axis)
cbar.set_label('Burn Rate [mm/s]')
axis.set_xticks(np.linspace(0, Ny, 9))
axis.set_xticklabels(["{:0f}".format(i) for i in np.linspace(0,
L_tot * 1000, 9)])
axis.set_xlabel("Posición axial en el motor [mm]")
axis.set_yticks(np.linspace(0, Nx, 10))
axis.set_yticklabels(["{:0f}".format(i) for i in np.linspace(D*1000 / 2,
49 / 2, 10)])
axis.set_ylabel("Posición radial en el grano [mm]")

def pressure_chamber(a0, n, gamma, Rg, T0, dt, denp, b_area):
    """
    Arguments:
    a1: coefficient for Vielle Law [mm/(s.MPa^n)]
    n: exponent for Vielle Law
    gamma: isentropic gas constant
    Rg: Ideal gas constant (SI)
    T0: Temperature at the inlet of the chamber [K]
    dt: Throttle diameter [m]
    denp: propellant density [kg/m3]
    b_area: burning area [m2]

    Returns:
    Pcam: Chamber pressure [Pa]
    """
    cd = np.sqrt((gamma/(Rg*T0))*((2/(gamma+1))**((gamma+1)/(gamma-1))))
    At=0.25*np.pi*dt**2
    a=a0/10**(3+6*n) #[m/(s.Pa^n)]
    Pcam=(a*denp*b_area/(cd*At))**(1/(1-n))

    return Pcam

def Nu_laminar(Re, col):
    Nu1 = 3.66
    Nu2 = 1.615 * (Re * Pr * D / L[col]) ** (1/3)
    Nu3 = (2 / (1 + 22 * Pr)) ** (1/6) * (Re * Pr * D / L[col]) ** 0.5
    return (Nu1 ** 3 + 0.7 ** 3 + (Nu2 - 0.7) ** 3 + Nu3 ** 3) ** (1/3)

```

```

def Nu_turbulent(Re, col):
    f = 1 / (1.8 * math.log10(Re/6.9)) ** 2
    kappa = 0.45
    K = (T_f / T_s) ** kappa
    return (f / 8 * (Re - 1000) * Pr) / (1 +
    12.7 * (f / 8) ** 0.5 * (Pr ** (2/3) - 1)) * (1 +
    (D / L[col]) ** (2/3)) * K

# Simulation
count = 0
avg_rb = np.array([])
avg_dist = np.array([])
tol = 1e-7
r_b_it = 0
max_rb = np.array([])
core_diam = np.zeros(Ny)
disc_Ab = np.zeros(Ny)
Ab = np.array([])
cham_press = np.array([])

# Main loop
i = [0 for k in range(0,Ny)]
pos = np.zeros(Ny)
L = np.linspace(dy, L_tot, Ny) #np.zeros((Ny)) + L_tot
u_g = np.linspace(1, 60, Ny)
temp = np.array([])
erosive = input("Account for erosive effects? [Yes/No]: ")
while count < t:
    for j in range(0, Ny):
        p[i[j],j] = p_t(count)
        if p[i[j],j] < 0:
            p[i[j],j] = 0
        #T_s[i[j],j] = np.random.uniform(700, 701)
        #T_g[i[j],j] = np.random.uniform(1359, 1361)
        r_o = r_p(p[i[j],j]) / 1000 # m/s
        if r_o < 0:
            r_o = 0

    if erosive == "Yes":
        while abs(r_b[i[j],j] - r_b_it) > tol:
            r_b_it = r_b[i[j],j]
            Re = rho_g * u_g[j] * D / mu
            if Re < 2300:
                Nu = Nu_laminar(Re,j)
            elif Re > 4000:
                Nu = Nu_turbulent(Re,j)
            else:
                Y = (Re - 2300) / (4000 - 2300)

```

```

        Nu = (1 - Y) * Nu_laminar(2300,j) +
            Nu_turbulent(4000,j) * Y
        h_0 = Nu * k_g / D
        beta = rho_c * r_b_it * C_pg / h_0
        h = rho_c * r_b_it * C_pg / (math.exp(beta) - 1)
        r_e = (T_f - T_s) * h / (rho_c * C_ps * (T_s - T_i))
        r_b[i[j],j] = r_o + r_e
    else:
        r_b[i[j],j] = r_o

    dist[i[j],j] += r_b[i[j],j] * dt
    avg_dist = np.append(avg_dist, dist[i[j],j])
    if r_b[i[j],j] > 0:
        avg_rb = np.append(avg_rb, r_b[i[j],j])
    if dist[i[j],j] >= dx and i[j] < Nx-(dist[i[j],j] // dx):
        pos[j] += dist[i[j],j] // dx
        i[j] = int(pos[j])
        dist[i[j],j] = dist[i[j] - 1, j] - dx
        r_b[0:(i[j]-1),j] = 0
        if i[j] > 4:
            r_b[0:(i[j]-3),j] = np.random.uniform(0, 1e-3,
                i[j] - 3) * j / 12
        core_diam[j] = 20e-3 + 2 * pos[j] * dx
        disc_Ab[j] = math.pi * core_diam[j] * dy
    if np.mean(avg_rb) > 0:
        if erosive == "Yes":
            print("Average burn rate: {:.1f} [mm/s] ({:.1f} [mm/s] are
                from \"normal\" burn rate and {:.1f} [mm/s] are from erosive
                burn rate)".format(np.mean(avg_rb)*1000, r_o*1000, r_e*1000))
            print("Max burn rate: {:.1f} [mm/s]".format(np.max(avg_rb)
                *1000))
        else:
            print("Average burn rate: {:.1f} [mm/s]".format(np.mean(avg_rb)*1000))
    if np.all(i) >= Nx-1:
        print("Grain burned out")
        break
    temp = np.append(temp, np.mean(avg_rb))
    D = 20e-3 + 2 * np.mean(pos) * dx
    Ab = np.append(Ab, np.sum(disc_Ab))
    cham_press = np.append(cham_press,
        pressure_chamber(3, 0.5, 1.1216, 222, 1680, 6.2e-3, 1879,
            np.mean(Ab)) / 1e6)
    print("Grain core diameter: {:.2f} [mm]".format(D*1000))
    print("Chamber pressure at t = {:.2f} [s]: {:.2f} [MPa]".format(count,
        pressure_chamber(3, 0.5, 1.1216, 222, 1680, 6.2e-3, 1879,
            np.mean(Ab)) / 1e6))
    print("-----")
    avg_rb = np.array([])
    avg_dist = np.array([])

```

```

max_rb = np.append(max_rb, np.max(r_b))
count += dt
pcm.set_array(r_b * 1000)
pcm.set_clim(vmin=0, vmax=16)
axis.set_title("Burning Front at t = {:.2f} [s]".format(count))
plt.pause(0.001)

# Updating the plot
plt.show()

t_n = np.linspace(0, t, len(temp))
an = input("Show plots? [Yes/No]: ")
if an == "Yes":
    an2 = input("Select how to show the plots [All/Individual]: ")
    if an2 == "All":
        fig, axs = plt.subplots(2, 3, figsize=(14, 9))

        axs[0, 0].plot(t_n, temp * 1000, 'ro-', label='Tasa de quemado
erosiva promedio')
        axs[0, 0].plot(t_n, r_p(p_t(t_n)), 'bo-', label='Tasa de quemado
normal')
        axs[0, 0].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
        axs[0, 0].legend(loc='lower right')
        axs[0, 0].set_xlabel('Tiempo [s]')
        axs[0, 0].set_ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
        axs[0, 0].set_title('Tasa de quemado erosiva vs normal')
        axs[0, 0].set_xlim(0, t)
        axs[0, 0].set_ylim(0, np.max(temp) * 1000 + 1)

        axs[0, 1].plot(t_n, max_rb * 1000, 'go-')
        axs[0, 1].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
        axs[0, 1].set_xlabel('Tiempo [s]')
        axs[0, 1].set_ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
        axs[0, 1].set_title('Tasa de quemado máxima')
        axs[0, 1].set_xlim(0, t)
        axs[0, 1].set_ylim(0, np.max(max_rb) * 1000 + 1)

        axs[0, 2].plot(t_n, temp * 1000 / r_p(p_t(t_n)), 'ro-', label='Razón
de tasas de quemado')
        axs[0, 2].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
        axs[0, 2].set_xlabel('Tiempo [s]')
        axs[0, 2].set_ylabel('r_b erosiva / r_o normal')
        axs[0, 2].set_title('Razón de tasas de quemado')
        axs[0, 2].set_xlim(0, t)
        axs[0, 2].set_ylim(0, np.max(temp * 1000 / r_p(p_t(t_n))) + 0.2))

        axs[1, 0].plot(t_n, Ab, 'ro-')
        axs[1, 0].grid(alpha=0.5, linestyle='--')

```

```

    axs[1, 0].set_xlabel('Tiempo [s]')
    axs[1, 0].set_ylabel('Área de quemado [m2]')
    axs[1, 0].set_title('Evolución del área de quemado')
    axs[1, 0].set_xlim(0, t)
    axs[1, 0].set_ylim(0, np.max(Ab) + 5e-3)

    axs[1, 1].plot(t_n, cham_press, 'ro-')
    axs[1, 1].grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    axs[1, 1].set_xlabel('Tiempo [s]')
    axs[1, 1].set_ylabel('Presión en la cámara [MPa]')
    axs[1, 1].set_title('Presión en la cámara de combustión')
    axs[1, 1].set_xlim(0, t)
    axs[1, 1].set_ylim(0, np.max(cham_press) + 0.5)

plt.tight_layout()
plt.show()
else:
    plt.plot(t_n, temp * 1000, 'r', label='Tasa de quemado erosiva
    promedio')
    plt.plot(t_n, r_p(p_t(t_n)), 'b', label='Tasa de quemado normal')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.legend(loc='lower right')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
    plt.title('Tasa de quemado erosiva vs normal')
    plt.xlim(0, t)
    plt.ylim(0, np.max(temp) * 1000 + 1)
    plt.show()

    plt.plot(t_n, max_rb * 1000, 'g')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('Tasa de quemado [mm/s]')
    plt.title('Tasa de quemado máxima')
    plt.xlim(0, t)
    plt.ylim(0, np.max(max_rb) * 1000 + 1)
    plt.show()

    plt.plot(t_n, temp * 1000 / r_p(p_t(t_n)), 'g', label='Razón
    de tasas de quemado')
    plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
    plt.xlabel('Tiempo [s]')
    plt.ylabel('r_b erosiva / r_o normal')
    plt.title('Razón de tasas de quemado')
    plt.xlim(0, t)
    plt.ylim(0, np.max(temp * 1000 / r_p(p_t(t_n))) + 0.2))
    plt.show()

    plt.plot(t_n, Ab, 'g')

```

```

plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
plt.xlabel('Tiempo [s]')
plt.ylabel('Área de quemado [m2]')
plt.title('Evolución del área de quemado')
plt.xlim(0, t)
plt.ylim(0, np.max(Ab) + 5e-3)
plt.show()

plt.plot(t_n, cham_press, 'g')
plt.grid(alpha=0.5, linestyle='--')
plt.xlabel('Tiempo [s]')
plt.ylabel('Presión en la cámara [MPa]')
plt.title('Presión en la cámara de combustión')
plt.xlim(0, t)
plt.ylim(0, np.max(cham_press) + 0.5)
plt.show()
else:
    print("--Simulation finished--")

```

C Especies Modeladas en Fluent

C.1 Fracciones molares en el modelo anterior

Tabla C.1 Especies químicas modeladas.

Especie	Fracción molar gaseosa
CO	0.1896
CO ₂	0.1743
H ₂ O	0.3716
N ₂	0.1363
H ₂	0.1172

C.2 Fracciones molares en el modelo final

Tabla C.2 Especies químicas modeladas.

Especie	Fracción molar gaseosa
CO	0.1917
CO ₂	0.1762
H ₂ O	0.3757
N ₂	0.1378
H ₂	0.1185

D Expresiones de Fluent

D.1 Flujo másico en modelo anterior

$\text{IF}(t \leq 0.73[\text{s}], t^2 * 0.53[\text{kg s}^{-3}] + 0.4[\text{kg s}^{-2}] * t,$
 $\text{IF}(t \leq 1.1[\text{s}], -0.15[\text{kg s}^{-2}] * t + 0.68[\text{kg s}^{-1}], 0[\text{kg/s}]))$

D.2 Flujo másico en modelo final

$\text{IF}(t \leq 0.008[\text{s}], 2.79208524[\text{kg s}^{-7}] * t^6 - 1.16296210\text{e}+01[\text{kg s}^{-6}] * t^5 +$
 $1.78741782\text{e}+01[\text{kg s}^{-5}] * t^4 - 1.17373899\text{e}+01[\text{kg s}^{-4}] * t^3 +$
 $2.31306925[\text{kg s}^{-3}] * t^2 + 4.41852624\text{e}-01[\text{kg s}^{-2}] * t - 3.58827052\text{e}-03[\text{kg s}^{-1}])$

D.3 Temperatura

$\text{IF}(t \leq 0.3[\text{s}], 4500[\text{K s}^{-1}] * t + 300[\text{K}], \text{IF}(t \leq 1.1[\text{s}], 1680[\text{K}], 300[\text{K}]))$

D.4 Movimiento de la malla Overset en modelo anterior

$\text{IF}(t \leq 0.41[\text{s}], t^2 * 65[\text{mm s}^{-3}] + 19[\text{mm s}^{-2}] * t,$
 $\text{IF}(t \leq 1.1[\text{s}], \sin(3.67[\text{s}^{-1}] * t) * 5.5[\text{mm s}^{-1}] + 0.0143[\text{m/s}], 0[\text{m/s}]))$

D.5 Movimiento de la malla Overset en modelo final

$2.36223173\text{e}+04[\text{mm s}^{-10}] * t^9 - 1.24284905\text{e}+05[\text{mm s}^{-9}] * t^8 +$
 $2.77095038\text{e}+05[\text{mm s}^{-8}] * t^7 - 3.40390810\text{e}+05[\text{mm s}^{-7}] * t^6 +$
 $2.50370115\text{e}+05[\text{mm s}^{-6}] * t^5 - 1.11897696\text{e}+05[\text{mm s}^{-5}] * t^4 +$
 $2.94345897\text{e}+04[\text{mm s}^{-4}] * t^3 - 4.27393708\text{e}+03[\text{mm s}^{-3}] * t^2 +$
 $3.36204370\text{e}+02[\text{mm s}^{-2}] * t + 7.91825439\text{e}-02[\text{mm s}^{-1}]$