



**Escola Politècnica Superior
de Castelldefels**

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

TREBALL DE FI DE CARRERA

TÍTOL DEL TFC: Estudi numèric del flux dins la tovera d'un motor coet

TITULACIÓ: Enginyeria Tècnica Aeronàutica, especialitat Aeronavegació

**AUTORS: Abel Torren Larroya
Lluís Sergi Sarri i Camargo**

**DIRECTORS: Daniel Crespo Artiaga
Roger Jové Casulleras**

DATA: 20 de juliol de 2009

Títol: Estudi numèric del flux dins la tovera d'un motor coet

Autors: Abel Torren Larroya
Lluís Sergi Sarri i Camargo

Directors: Daniel Crespo Artiaga
Roger Jové Casulleras

Data: 20 de juliol de 2009

Resum

L'objectiu del treball és l'estudi del flux dins la tovera d'un motor coet i analitzar-ne les seves propietats i prestacions. S'aprofitarà aquest tema per a poder presentar i comparar els dos codis de dinàmica de fluids computacional que s'han utilitzat: Fluent.Inc i OpenFOAM.

Fluent és un programari comercial àmpliament usat a la indústria, que es fa servir també a la EPSC. Mentre OpenFOAM és un programari lliure i de codi obert de simulació de fluids (amb llicència GPL) que comença a ser implementat en diverses facultats d'aeronàutica d'Europa. En la comparativa, es desitja avaluar un mateix cas amb els dos programes i comparar el temps utilitzat, la dificultat d'aprenentatge, la flexibilitat dels programes i la possibilitat d'expandir els coneixements un cop s'ha assolit un nivell bàsic en el funcionament en cadascun dels codis.

El cas a estudiar és l'expansió dels gasos provinents d'una cambra de combustió a química congelada, és a dir, fent la hipòtesi que no hi ha més reaccions químiques un cop les molècules entren a la tovera. Tot i ser un cas a química congelada, s'estudia amb els dos programaris la influència de la c_p constant o variable en funció de la temperatura i diferents geometries de toveres: amb forma cònica i amb forma de campana.

Els darrers apartats del treball fan referència als fluxos reactius i la dissociació de les molècules, esment que s'acompanya de càlculs realitzats amb el programa *Chemical Equilibrium with Applications* que proporciona la NASA.

La major part de les diferents toveres emprades han estat dissenyades amb programari de Disseny Assistit per Ordinador (CAD) concretament ACAD 2008

Title: Numerical study of flow within the nozzle of a rocket-motor

Authors: Abel Torren Larroya
Lluís Sergi Sarri i Camargo

Directors: Daniel Crespo Artiaga
Roger Jové Casulleras

Date: July, 20th 2009

Overview

The aim of this project is to study the flow inside the nozzle of a rocket engine and analyze the properties and performance. This topic will be used to present and compare the two codes of computational fluid dynamics that have been used: Fluent.Inc and OpenFOAM.

Fluent is a commercial software widely used in the industry and is being used in the EPSC. In contrast, OpenFOAM is a free and open source software of fluid's simulation (GPL licensed) that is being implemented in some aeronautic faculties of Europe. The comparative between both softwares is done in order to evaluate the same case and compare the time used, the difficulty of learning, the flexibility of the programs and the possibility of expanding the knowledge once the user has achieved a basic level in each one of the codes.

The case's study is the expansion of gases from a combustion chamber in frozen chemistry, i.e. making the assumption that there are no chemical reactions once the molecules enter the nozzle. Although it is a case in frozen chemistry, both softwares are used to study the influence of the constant or variable specific heat depending on the temperature and the geometry of the nozzle: conical and bell-shaped.

The latest sections of the project refer to reactive flows and dissociation of molecules, accompanied by some calculations made with the program Chemical Equilibrium with Application provided by NASA.

Most of the different nozzles were used with software designed for Computer-Aided Design (CAD) specifically ACAD 2008.

A tots els que s'endinsen en la nit amb tan sols un llumí.

Agraïments:

A Daniel Crespo, director del TFC, per ajudar-nos en els primers passos i donar-nos la oportunitat de realitzar aquest projecte.

A Roger Jové, codirector del TFC, per la seva incansable ajuda i el bon ambient transmès al grup.

A la família, amics i companys per la seva estima, suport, consells i paciència.

ÍNDIX

INTRODUCCIÓ	1
CAPÍTOL 1. EL MOTOR COET.....	3
1.1. Breu història.....	3
1.2. Funcionament	6
CAPÍTOL 2. LA TOVERA	9
2.1. Geometria	9
2.2. Ones de xoc.....	11
2.2.1. Ona de xoc normal.....	13
2.2.2. Ona de xoc obliqua	15
2.3. Anàlisi del flux en una tovera C-D	17
2.3.1. Model del flux isentròpic	17
2.3.2. Influència de la pressió externa	19
2.3.2.1. La secció convergent.....	19
2.3.2.2. La secció divergent.....	20
CAPÍTOL 3. DEFINICIÓ DEL DISSENY.....	25
3.1. Presentació dels dissenys ideats	25
3.2. Millora del contorn mitjançant un programa de Matlab.....	28
CAPÍTOL 4. FLUENT VS OPENFOAM	31
4.1. Geometria i creació de la malla.....	31
4.1.1. Gambit	31
4.1.1.1. Cas particular.....	34
4.1.2. OpenFOAM.....	36
4.1.2.1. Cas particular.....	40
4.2. Simulació	42
4.2.1. Fluent.....	42
4.2.1.1. Cas particular.....	45
4.2.2. OpenFOAM.....	47
4.2.2.1. Cas particular.....	50
4.3. Comparativa.....	52
CAPÍTOL 5. ANÀLISI DELS RESULTATS	53
5.1. Fluent.....	54
5.1.1. Tovera nº1	54
5.1.1.1. Cas 1	54
5.1.1.2. Cas 2	55
5.1.1.3. Cas 3	55
5.1.2. Tovera nº3.....	57
5.1.2.1. Cas 1	58
5.1.2.2. Cas 2	58
5.1.2.3. Cas 3	59
5.1.2. Estacionari vs no estacionari	60
5.2. Campana vers Cònica.....	62

5.3.	OpenFOAM.....	64
5.4.	Fluent vs OpenFOAM	65
CAPÍTOL 6. DISSOCIACIÓ DE LES MOLÈCULES.....		67
6.1.	La influència del calor específic en les reaccions	67
6.2.	Dissociació.....	68
6.3.	Equilibri químic vs química congelada	71
CAPÍTOL 7. EL PROGRAMA CEA DE LA NASA		73
CONCLUSIONS.....		75
BIBLIOGRAFIA		77
ANNEX 1: SOBRE LA DINÀMICA DE FLUIDS		79
1.1.	Què és la Dinàmica de Fluids Computacional?	79
1.2.	Per a què serveix?	79
1.3.	Com s'ha aplicat?.....	79
1.4.	Les fórmules de Navier-Stokes	80
ANNEX 2: EQUACIONS DEL FLUX ISENTRÒPIC.....		83
ANNEX 3: ESQUEMES, VALORS I CODIS DE DISSENY		85
3.1.	Esquemes de disseny	85
3.2.	Valors de disseny de les geometries.....	86
3.3.	Codi del Programa de Matlab	87
3.3.1.	principal.m	87
3.3.2.	perfil.m	88
ANNEX 4: CODIS D'OPENFOAM		89
4.1.	BlockMeshDict de la tovera n ⁰⁵	89
4.2.	Exemples d'arxius de simulació d'OpenFOAM	92
4.2.1.	Exemple d'arxiu de la carpeta 0.....	92
4.2.2.	Exemple controlDict.....	93
4.2.3.	Creació del sonicDynTimeTurbFoam.....	94
4.2.4.	El codi janaf en Fortran.....	94
4.2.5.	Taula del codi Fortran	95
4.2.6.	Tipus de condicions de contorn utilitzades amb OpenFOAM	96
ANNEX 5: VALORS DE LA C_p I LA CONDUCTIVITAT TÈRMICA.....		97
ANNEX 6: Mescla H₂ + O₂ i CEA.....		101
6.1.	Cinètica química de la mescla H ₂ + O ₂	101
6.2.	Entalpia de reacció.....	102
6.3.	Característiques Vulcain 2	103
6.4.	Full de resultats del CEA.....	104

INTRODUCCIÓ

El 20 de juliol del 2009 farà quaranta anys de l'arribada de l'home a la Lluna amb la càpsula Apollo 11, propulsada de la Terra a l'espai pel coet Saturn V. Tot i haver passat molt de temps, els llançadors espacials segueixen estant dividits en diferents etapes, on cadascuna d'elles està dissenyada per a diferents fases del vol. Pel que fa a la propulsió de cada fase del vol, els sistemes propulsius es dissenyen per tal d'adaptar les seves prestacions a les necessitats del trajecte. Així, en el cas de l'Ariane 5, les dues primeres etapes són per assolir la velocitat mínima d'escapament de la Terra (11,2 km/s). On en la primera, s'encenen els coets de combustible sòlid i en la segona els de combustible líquid amb el motor Vulcain 2. La tercera etapa s'utilitza per posar en òrbita la càrrega i impulsar-la. I les toveres, com a part essencial del sistema motor coet, tenen una gran importància a l'hora d'obtenir les màximes prestacions de l'energia química que es desprèn de la combustió. Havent d'aconseguir, mitjançant l'expansió del fluid, la màxima velocitat d'ejecció dels gasos que permeti superar l'atracció gravitatòria de la Terra.

L'interès que pels autors desperta el món de l'espai, ha estat una de les principals motivacions a l'hora de realitzar aquest projecte. A més a més, es buscava fer un treball de fi de carrera analític, que realment suposés un repte, i d'aquí va sorgir l'estudi del flux d'una tovera de motor coet. El principal objectiu del qual és analitzar el flux i el seu procés d'expansió mitjançant dos programaris diferents de simulació de fluids: Fluent i OpenFOAM. El cas a estudiar és l'expansió dels gasos provinents d'una cambra de combustió a química congelada, és a dir, fent la hipòtesi que no hi ha més reaccions químiques un cop les molècules entren a la tovera. Tanmateix, tot i ser un cas a química congelada, s'estudia amb els dos programaris la influència de la c_p constant o variable en funció de la temperatura i diferents geometries de toveres: amb forma cònica i amb forma de campana. A més a més, aprofitant l'ús de programaris diferents s'ha considerat interessant comparar-los per avaluar la dificultat d'aprenentatge, la flexibilitat dels programes i la possibilitat d'expandir els coneixements un cop s'ha assolit un nivell bàsic en el funcionament en cadascun dels codis.

Obtinguts els resultats de les simulacions, s'ha pogut comprovar l'aproximació força exacta als càlculs teòrics pel cas del flux isentròpic. Així com la influència de la forma de les toveres a l'hora d'expandir el flux per a unes mateixes condicions. A més a més s'ha pogut constatar que, per un projecte d'aquestes característiques, és més viable l'ús del Fluent que el del OpenFOAM.

El treball s'ha estructurat en set capítols: en el primer es fa una petita immersió al motor coet, al segon es veu la teoria bàsica per entendre el funcionament de la tovera i els resultats posteriors de les simulacions; al tercer es presenten els prototips de disseny ideats; al quart es presenten els dos programaris i com s'han emprat per al cas particular de les toveres; al cinquè s'analitzen els resultats obtinguts de les simulacions; al sisè i al setè es veu la teoria de la dissociació de les molècules i s'explora el funcionament de l'aplicació CEA de la NASA. Per finalitzar, es resumeixen les conclusions extretes del projecte.

CAPÍTOL 1. EL MOTOR COET

Tot i que en aquest projecte s'estudiarà la importància de la tovera, s'ha cregut important dedicar un petit espai al sistema motor coet gràcies al qual les toveres han gaudit d'una forta evolució. L'únic sistema viable a dia d'avui per escapar de l'atracció gravitatòria terrestre d'una manera ràpida i eficaç. La idea del qual va néixer primerament en la ment d'escriptors com ara a Jules Verne amb "De la Terra a la Lluna", H.G.Wells amb "Els primers homes a la lluna" o Cyrano de Bergerac amb "La història còmica dels Estats i Imperis de la Lluna" on ja usà el coet de propulsió com a mètode per viatjar per l'espai.

1.1. Breu història

El motor coet és un motor de combustió interna que genera un impuls mitjançant l'expulsió dels gasos que provenen de la cambra de combustió, transformant l'energia química en energia mecànica.

El 1903 Konstantin Tsiolkovsky, el considerat pare de l'astronàutica, va presentar l'equació del coet, avui coneguda com l'equació ideal del coet, on demostrava que l'increment de velocitat venia de la velocitat d'ejecció dels gasos multiplicada per la diferència logarítmica de masses. En aquell moment, però, no se li feu gaire cas, donada la incomprensió de la gent del fet que el coet s'accelerés cap endavant impulsant-se sobre ell mateix. Tanmateix, anys més tard es va saber que la reial acadèmia militar de l'armada britànica ja havia desenvolupat noranta anys abans una equació del coet semblant a la que presentà Tsiolkovsky.

Equació del coet de Tsiolkovsky:

$$\Delta v = v_e \ln \frac{m_0}{m_1} \quad (1.1)$$

Els coets, però, no són un invent recent. Han estat usats des de fa centenars d'anys a la Xina, on s'inventà la pólvora, tant per ús bèl·lic per atacar l'enemic a distància, com per ús de festeig per enlluernar el cel nocturn, la coneguda pirotècnia. Fins i tot es diu que a la batalla de Waterloo, la que significà la desfeta de l'imperi de Napoleó, es feu servir aquest invent en el camp de batalla.

Al llarg dels últims cent anys, sobretot des de la 2a Guerra Mundial amb el famós V-2 de Wherner von Braun i la posterior Guerra Freda, els prototips dels motor coet han evolucionat molt. Principalment, gràcies a les aportacions que Robert H.Goddard feu a principis del s.XX, al redissenyar el concepte del coet

en tres eixos: el fuel havia d'ésser cremat en una petita cambra de combustió; els coets podien ser concebuts per etapes; la velocitat d'ejecció dels gasos podria arribar a nivells supersònics si s'usava la tovera De Laval.¹



Fig. 1.1. Robert Goddard amb el seu coet de combustible líquid

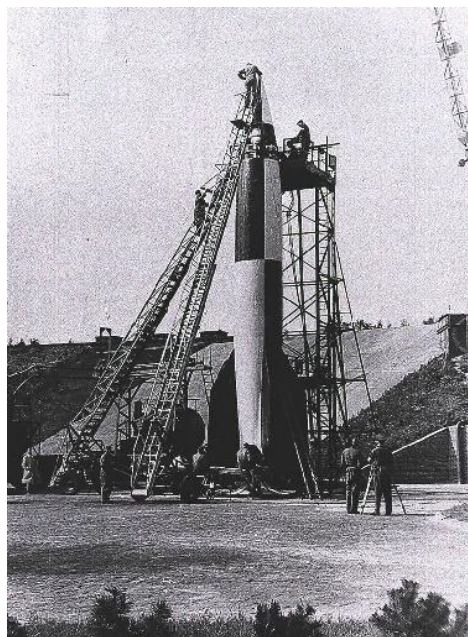


Fig.1.2. V-2 a punt de ser enlairat a principis dels anys 40

De tots els coets creats a la història, el més potent, tot i que hagi passat desapercebut, en fou un model rus anomenat Energia, que és el que havia d'impulsar el Buran, el transbordador espacial rus, fins a l'espai. Els pocs enlairaments que feu (tan sols dos), fan, però que a l'imaginari de la gent, el més potent mai creat continuï sent el Saturn V. Una obra mestra d'enginyeria. El coet que just fa quaranta anys permeté a l'Apollo 11 trepitjar per primer cop

¹ Veure Capítol 2.

la Lluna. I que durant gairebé set anys permeté dur amb èxit les successives missions Apollo, així com el projecte Skylab.



Fig.1.3. Imatge del Saturn V que portà l'Apollo 11 a la Lluna (16/7/1969)

A simple vista, doncs, sembla que hi ha hagut un estancament pel que fa a la innovació. I és que fins i tot els prototips que es preparen per un possible allunatge el 2020 s'estan basant amb els de les missions Apollo, ja que el disseny d'una nova càpsula no reutilitzable de reentrada no pot ser molt diferent de les antigues doncs estarà sotmès a les lleis i els efectes de l'aerodinàmica hipersònica. La causa d'aquest estancament no n'és una de sola. Els diners que abans s'invertien en els projectes espacials estan a anys llum dels pressupostos actuals. L'any 1969 la NASA, per exemple, en plena cursa aeroespacial al bell mig de la Guerra Freda, gaudia d'un pressupost de 6.000\$ milions (el 4,4% del pressupost Federal de l'època). En total durant el projecte Apollo es gastaren 30.000\$ milions. Quaranta anys més tard de l'allunatge, amb més fronts oberts que mai, el pressupost de la NASA és de 17.600\$ milions (<0,6% del pressupost Federal actual) i la seva plantilla s'ha vist reduïda tres quartes parts (de 400.000 a 90.000 persones).

A més a més, caldria afegir que les limitacions del cos humà pel que fa a la supervivència d'una possible exploració espacial són un factor clau d'aquest estancament, que ha dut la humanitat a una època de perfeccionament de la tècnica aeroespacial. És per això que fins que des de la genètica i la biologia humana no es faci un salt realment important, tampoc es podrà fer en la tècnica aeroespacial si aquesta s'enfoca a l'exploració amb éssers humans. Mentrestant, caldrà seguir innovant i potenciant la utilització dels robots d'exploració.

1.2. Funcionament

Els motor coet es basen en la tercera llei de Newton d'acció-reacció. La qual exposa que si un cos A efectua una força sobre un altre cos B, aquest reacciona exercint una força sobre el cos A d'igual magnitud i direcció que la primera, però de sentit oposat. I també en la conservació del moment linial, ja que a l'espai la presència d'una força externa neta pot considerar-se negligible.

Konstantin Tsiolkovsky va imaginar-se una experiència per tal de fer entendre als seus contemporanis el principi d'acció - reacció en els coets. En aquesta, restava sol en una barca al bell mig d'un llac. Si no es desitja utilitzar motor, ni rem, ni vela, ni servir-se de les mans per remar, què podia fer per avançar? Doncs aplicar la tercera llei de Newton expulsant els objectes que hi hagués al vaixell en sentit oposat al moviment desitjat, i el més ràpid possible. Començant pels més pesats.

Si s'analitza la figura 1.4, es pot veure que totes les forces del conjunt tovera-cambra de combustió s'anul·len excepte una: la que és deguda a la pressió sobre el fons de la cambra de combustió i sobre les parets de la tovera. Aquesta força resultant és la que permetrà impulsar el coet per cada diferencial de massa que vagi expulsant (fig.1.5), al crear una força en sentit contrari que l'accelerará.

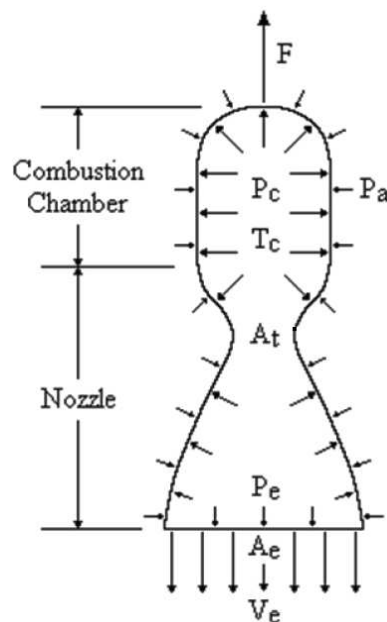


Fig. 1.4. Esquema de l'aplicació de les forces en el motor coet

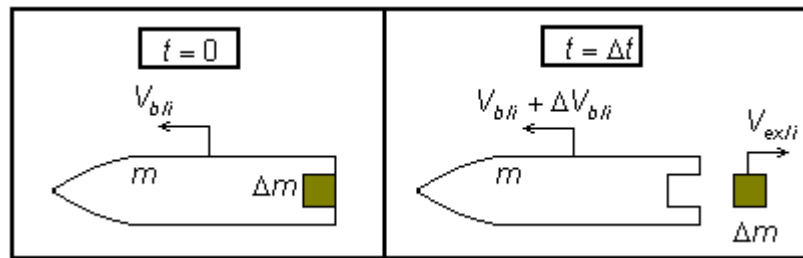


Fig.1.5. Esquema de la impulsió del coet

Els principals paràmetres per considerar l'eficiència dels motor coet són l'empenta (1.2) que són capaços de generar i l'impuls específic (1.3) que són capaços d'assolir.

$$T = \dot{m} \cdot v_{\text{gasos}} + (P_{\text{sortida}} - P_{\text{ambient}}) \cdot A_{\text{sortida}} \quad (1.2)$$

L'impuls específic es defineix com el període durant el qual un 1kg de massa de propel·lent ens proporcionarà un impuls de 1kilopond. I és un bon valor per mesurar l'eficiència que els motor coet són capaços de generar a l'hora d'accelerar la massa expulsada, i depèn bàsicament del sistema de propel·lent (oxidant i combustible) que utilitzaran.

$$I_{sp} = F / \dot{m} \cdot g \quad (1.3)$$

S'han creat varis sistemes per tal de propulsar els coets i donar-los l'impuls necessari en cada etapa de la missió: gas fred, combustible sòlid, combustible líquid monopropel·lent i bipropel·lent, motor iònic, etc.

I tot i que a l'actualitat s'utilitzen una mescla de totes elles depenent de les característiques de les missions especials, la que té més impuls específic i és el principal sistema per tal de sortir de l'atracció gravitatòria, és el sistema amb combustible líquid bipropel·lent, normalment Oxigen i Hidrogen. El precursor del qual en fou també Robert H. Goddard en un llunyà 1926, usant oxigen líquid i gasolina com a propel·lents (fig.1.1).

A la següent taula es pot observar l'impuls específic que donen les diferents combinacions de combustibles. Com es pot veure, els motors iònics són de llarg els que gaudeixen d'un impuls específic més elevat, però per contra es pot veure que l'empenta que són capaços de proporcionar és ben poca. El seu ús per tant es reserva bàsicament per a sondes en missions de reconeixement, per a què es vagin accelerant gradualment, ja que a l'espai petites acceleracions permeten assolir grans velocitats.

CAPÍTOL 2. LA TOVERA

La tovera convergent – divergent (C-D) és segurament l'element més important i imprescindible associat amb la propulsió i ejecció de gasos a alta velocitat. Fou creada per l'enginyer Carl de Laval, el 1890, a finals del segle XIX, per augmentar la velocitat del flux de vapor fins a velocitat supersònica i treure'n d'aquesta manera el treball (2.1) a partir de la seva energia cinètica, en lloc de la seva pressió.

$$W_{AB} = \Delta E_c = \frac{1}{2}mv_B^2 - \frac{1}{2}mv_A^2 \quad (2.1)$$

La tovera és un enginy bàsic del sistema motor coet, que es troba al capdavant del mateix. Com que es necessita que el motor coet assoleixi la màxima eficiència s'ha d'aconseguir una velocitat d'ejecció dels gasos molt elevada. I la tovera és un element estàtic que permet realitzar l'expansió del gas que passa pel seu interior. Aquesta expansió fa que el gas intercanviï pressió per velocitat i per tant aconsegueixi guanyar energia cinètica.

Segurament es tracta de la part més important, ja que és el que ha de permetre al coet gaudir d'una forta acceleració i ser capaç de superar l'atracció gravitatòria que exerceix la Terra.

2.1. Geometria

El fet de què el coet hagi d'assolir grans velocitats, fa que la geometria de la tovera tingui un paper molt important. I és per això que s'ha d'optimitzar bé la seva geometria per tal d'obtenir les millors prestacions possibles.

Per tant, un dels paràmetres que interessa obtenir és la relació de l'àrea en funció del Mach. Per treure-la, han de fer-se les següents consideracions:

Que el flux dels gasos a través de les toveres és isentròpic (adiabàtic i reversible), de manera que s'obté la següent relació entre pressió, densitat i temperatura:

$$\frac{p_2}{p_1} = \left(\frac{\rho_2}{\rho_1} \right)^\gamma = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\gamma/(\gamma-1)} \quad (2.2)$$

Que el flux que passa a través de la tovera és continu en el temps, per tant segons l'equació de la continuïtat es té el següent:

$$\rho \cdot A \cdot v = ct \quad (2.3)$$

La qual es pot reescriure així:

$$\ln(\rho) + \ln(A) + \ln(v) = K \quad (2.4)$$

Si d'aquí s'agafen diferencials es tindrà el següent:

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{dA}{A} + \frac{dv}{v} = 0 \quad (2.5)$$

I si s'utilitza l'equació del moment:

$$dp = -\rho \cdot v \cdot dv \quad (2.6)$$

Es pot reescriure l'equació anterior de la següent forma:

$$-\frac{d\rho \cdot v \cdot dv}{dp} + \frac{dA}{A} + \frac{dv}{v} = 0 \quad (2.7)$$

I usant que el flux és isentròpic, sent c la velocitat local del so:

$$\frac{d\rho}{dp} = \frac{1}{c^2} \quad (2.8)$$

Després d'unes simples operacions, s'obté la relació de l'àrea en funció del Mach, amb la qual es pot apreciar que Mach serà 1 quan el diferencial d'àrea tendeixi a 0.

$$\boxed{\frac{dA}{A} = (M^2 - 1) \frac{dv}{v}} \quad (2.9)$$

Les formes més típiques a l'hora d'optimitzar les toveres, són la cònica i la de campana. Una mostra d'elles en són la tercera i la sisena tovera dissenyades respectivament². La geometria cònica sol tenir un angle de divergència constant d'uns 15° i és utilitzada pels coets de combustible sòlid per raons d'economia i simplicitat en la seva construcció. Mentre que la tovera de campana sol tenir un angle de divergència gran immediatament després de la gola, d'entre 30 i 45° , però moderat a la secció de sortida. Aquesta última, és la usada pels coets de combustible líquid.

El fet de què la tovera de campana creixi amb un pendent més ràpid que les còniques, farà que per a una mateixa expansió faci falta menys distància de la gola a la sortida.



Fig.2.1. Motor Vulcain 2

2.2. Ones de xoc

Al llarg del projecte s'ha pogut comprovar que una de les causes de no arribar a obtenir una solució al final de moltes de les simulacions era la creació d'una ona de xoc.

Una ona de xoc és una discontinuïtat en un flux supersònic. És un procés que es realitza a escala molecular de caràcter clarament irreversible i adiabàtic, en el qual es produeix una compressió instantània del fluid que travessa la ona de xoc.

² Veure capítol 3.

Hi ha dos tipus diferents d'ones de xoc, depenent de l'angle que formin respecte l'eix longitudinal del flux: les ones normals, en les quals la direcció del flux no canvia ja que el xoc és perpendicular (normal) a la seva direcció; i les ones obliqües, les quals tenen una inclinació diferent a 90° respecte el flux. En ambdós casos que es presentaran tot seguit s'assumeix que l'equilibri local termodinàmic i químic es manté durant l'ona de xoc.

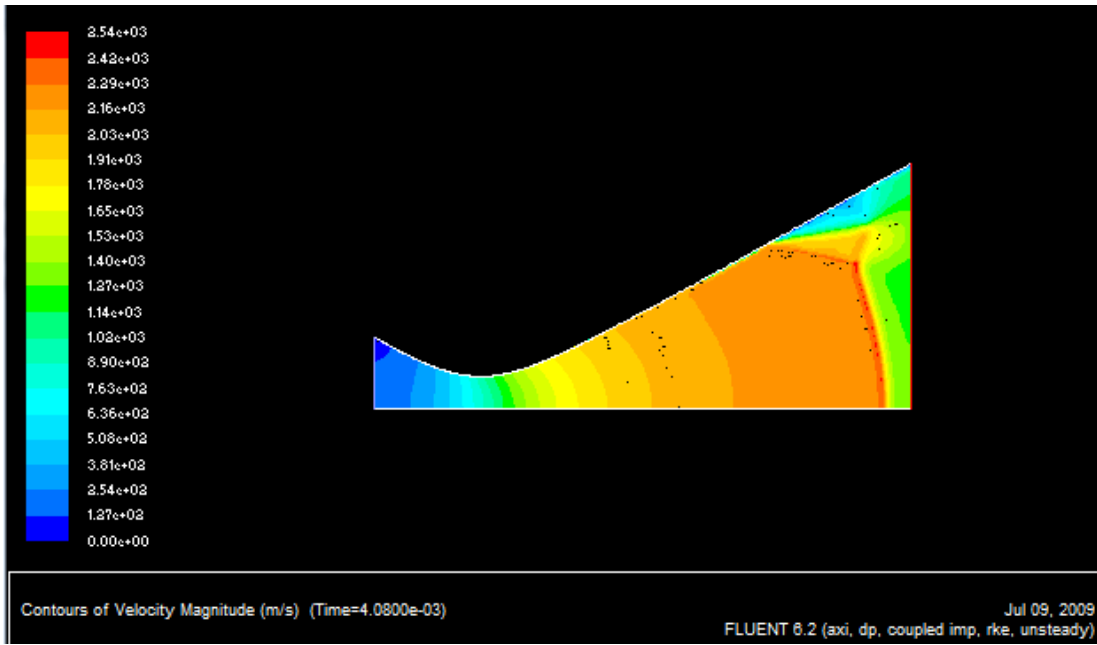


Fig.2.2. Ona de xoc simulada amb la tovera n^o3

La fig.2.2 mostra una ona de xoc simulada durant l'execució del treball. Com es pot apreciar hi ha dues ones de xoc obliqües (línies vermelles), tot i que una té una forma gairebé normal. La velocitat del flux decau just després de sobrepassar aquesta pertorbació que provocarà un augment local de la pressió.

2.2.1. Ona de xoc normal

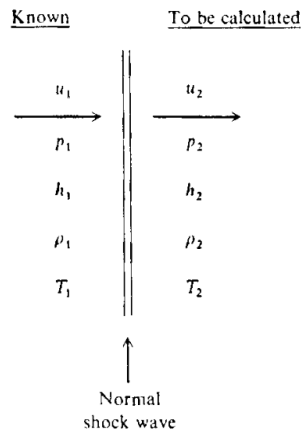


Fig. 2.3. Esquema d'una ona de xoc normal

Es considera que una ona de xoc normal estacionària és com la de la fig.2.3. Si es coneixen totes les propietats termodinàmiques del flux abans de l'ona, es pot determinar com es comportarà després. Utilitzant de nou les equacions de la continuïtat (2.9), el moment (2.10) i l'energia (2.11):

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (2.9)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (2.10)$$

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (2.11)$$

I considerant que la c_p és constant, es compleix la següent relació:

$$u_2 = \frac{\rho_1 u_1}{\rho_2} \quad (2.12)$$

Si es substitueix l'equació anterior a la fórmula del moment i a la de l'energia, s'obté el següent:

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 \left(\frac{\rho_1 u_1}{\rho_2} \right)^2 \quad (2.13)$$

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{\left(\frac{\rho_1 u_1}{\rho_2} \right)^2}{2} \quad (2.14)$$

I es soluciona l'equació per p_2 i h_2 :

$$p_2 = p_1 + \rho_1 u_1^2 \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \quad (2.15)$$

$$h_2 = h_1 + \frac{u_1^2}{2} \left[1 - \left(\frac{\rho_1}{\rho_2} \right)^2 \right] \quad (2.16)$$

Com que es coneixen totes les condicions d'abans del xoc, les úniques desconegudes són h_2 i p_2 que van en funció de la relació ρ_1/ρ_2 . Per conèixer els seus valors s'utilitzen solucions numèriques:

1. Se li dóna un valor a la relació de densitats ρ_1/ρ_2 (per començar 0.1 és normalment prou bo). I es calcula h_2 i p_2 .
2. Utilitzant les propietats d'equilibri termodinàmic per a un gas a altes temperatures (equacions d'estat) i sabent p_2 i h_2 , es calcula ρ_2 .
3. Amb la nova densitat, ρ_2 , es calcula de nou la relació de densitats ρ_1/ρ_2 .

I es van iterant aquests tres passos fins que convergeixi. Llavors utilitzant les equacions d'estat amb p_2 , h_2 i ρ_2 es calcula T_2 . I un cop es té T_2 es calcula la velocitat després del xoc, u_2 .

Però en realitat la c_p no és constant. I s'assumeix que el xoc és suficientment fort. Per tant la T_2 serà més alta i darrere del xoc es produirà moviment vibracional i reaccions químiques.

La diferència fonamental entre les funcions amb c_p constant o c_p variable amb reaccions químiques és que els ràtios de pressions (p_1/p_2) de densitat (ρ_1/ρ_2) i d'entalpia (h_1/h_2) en el primer cas varien amb el Mach i en el segon amb u_1 , p_1 i T_1 .

2.2.2. Ona de xoc obliqua

És una ona de xoc amb una inclinació diferent a 90° respecte el flux. La diferència respecte el xoc normal és que et canvia la direcció del flux.

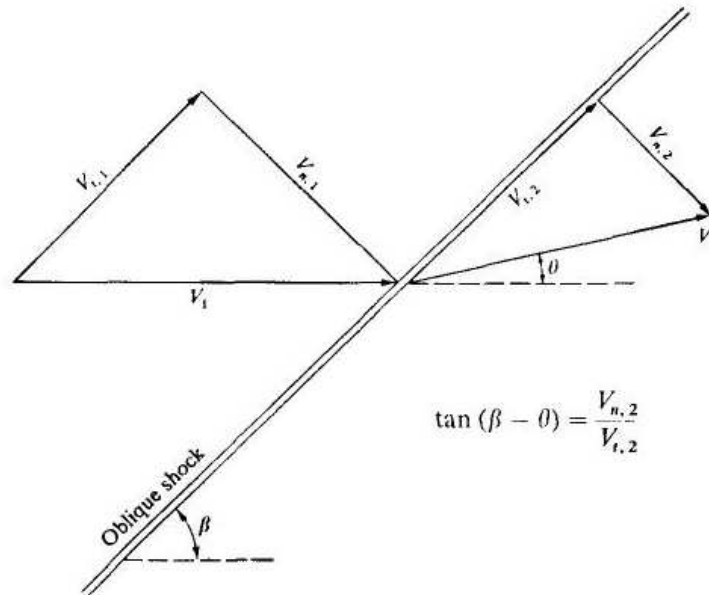


Fig. 2.4. Esquema de l'ona de xoc obliqua

Com es pot veure a la figura la diferència fonamental d'una ona de xoc obliqua respecte una normal és la variació en la direcció. Això és degut a què, a diferència de les ones de xoc normals, les obliqües tenen una component tangencial a la direcció del xoc que no es veu afectada. Així doncs, al disminuir la component perpendicular i no la paral·lela, el flux es desvia en direcció a l'ona de xoc un angle theta, θ , (angle de deflexió del flux) respecte l'angle de l'ona, β .

Sabent que la velocitat tangencial no varia es pot extreure que:

$$\tan(\beta - \theta) = \frac{v_{n,2}}{v_{t,2}} = \frac{v_{n,2}}{v_{n,1}} \cdot \frac{v_{n,1}}{v_{t,1}} \quad (2.17)$$

$$\tan(\beta - \theta) = \frac{v_{n,2}}{v_{n,1}} \tan \beta \quad (2.18)$$

I utilitzant les fórmules de l'ona de xoc normal amb aquesta última es poden conèixer les seves propietats. Si s'agafen diferents angles i velocitats es pot extreure un gràfic β - θ - V (fig.2.5).

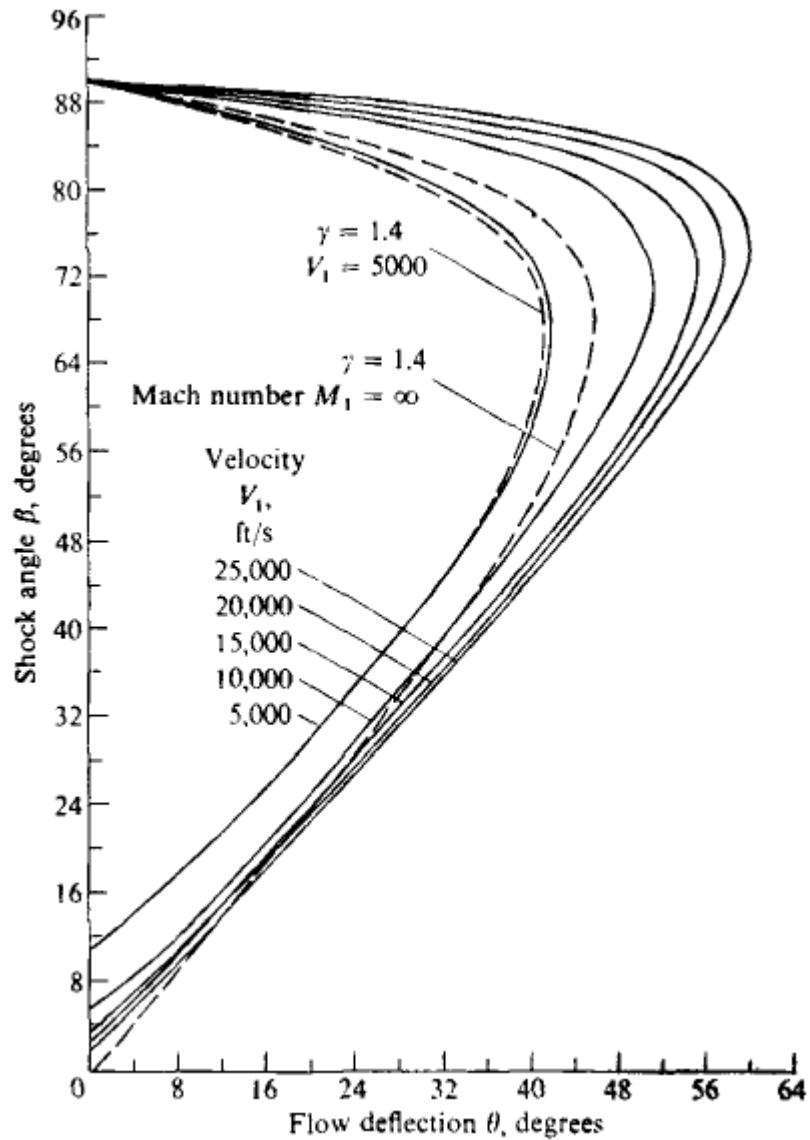


Fig. 2.5. Gràfic β - θ - V

La imatge mostra els resultats amb una p_1 i T_1 fixada a una alçada donada. Com es pot veure en cas que la c_p variï amb reaccions químiques (línia discontinua), amb una constant adiabàtica (γ) de 1,4 els valors del gràfic no varien massa entre una velocitat de 5000ft/s i un Mach molt alt. Així doncs, com en el cas de les ones de xoc normals, si la c_p no és constant el Mach no és un valor important, sinó la velocitat, junt amb la pressió i la temperatura

2.3. Anàlisi del flux en una tovera C-D

2.3.1. Model del flux isentròpic

A l'hora de comprovar l'efectivitat de la tovera De Laval, es farà la consideració de què el flux és isentròpic. El flux isentròpic es caracteritza per ser adiabàtic, ja que no hi ha transferència de calor, i tenir una entropia constant. Així mateix es considera que és un procés reversible.

Si es té una tovera De Laval (fig.2.6) per la qual hi passa un flux isentròpic estacionari³, aquest arriba a l'entrada des d'un dipòsit, que bé podria ser la cambra de combustió, amb una pressió i temperatura inicials determinades que es consideraran com a totals. A més a més, s'estima que l'àrea del dipòsit tendeix a l'infinit i per tant que la velocitat amb què el fluid arriba és aproximadament zero.

D'aquesta manera, el fluid és subsònic a la secció convergent de la tovera. Assolirà la velocitat del so a la gola, i s'expandirà isentròpicament per la secció divergent, assolint velocitats supersòniques.

Tot i que l'àrea de la tovera canvia en funció de la distància al llarg de la mateixa, i que per tant el flux és bidimensional, es farà la consideració de què les propietats del fluid només varien en la direcció x . I això és equivalent a suposar que les propietats del fluid són uniformes al llarg de la seva secció transversal. Aquest fluid, per tant, es defineix com a quasi unidimensional.

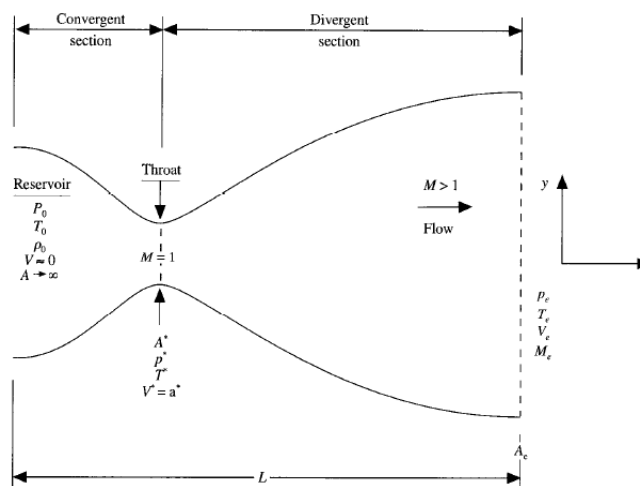


Fig.2.6. Esquema d'una tovera C-D

Els resultats previstos teòricament pel cas d'un flux isentròpic són els següents:

³ Les equacions que el descriuen a l'annex 2.

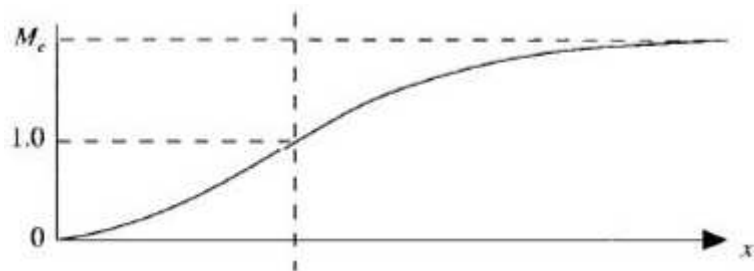


Fig.2.7. Relació del Mach

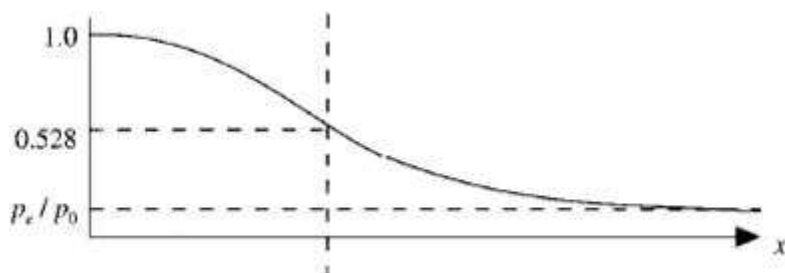


Fig.2.8. Relació de la pressió

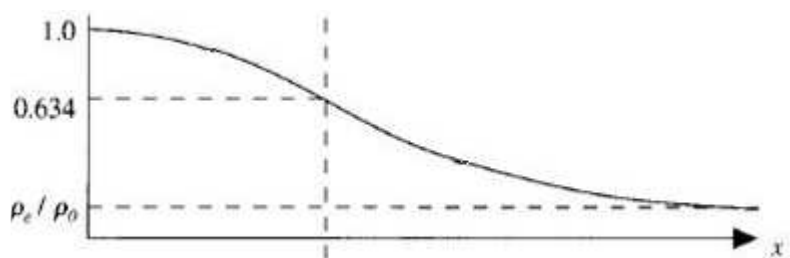


Fig. 2.9. Relació de la densitat

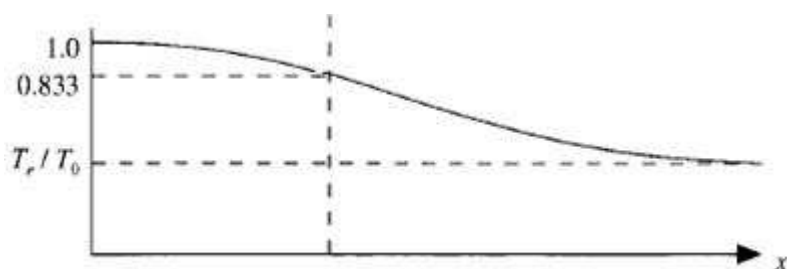


Fig. 2.10. Relació de la temperatura

En les quatre figures, la línia discontinua perpendicular a l'eix d'abscisses mostra el punt en què es troba la gola de la tovera. Com es pot veure en la fig.2.7 el flux assolix la velocitat sònica a la gola i s'expandeix fins a la sortida a velocitat supersònica. La resta de paràmetres, la pressió, densitat i

temperatura, decauen al llarg de l'expansió. Tots ells, però, tenen una relació de valors a la gola respecte els paràmetres inicials que es manté siguin quines siguin les condicions. Per tant si, per exemple, a l'entrada de la tovera la temperatura inicial del flux és de 1000K, quan el flux arribi a la gola haurà de tenir una temperatura de 833K. I el mateix amb la pressió i la densitat.

2.3.2. Influència de la pressió externa

Una manera fàcil de veure el funcionament de la tovera C-D és imaginar-se que es tenen dos cilindres amb diferents pressions units per aquesta tovera.

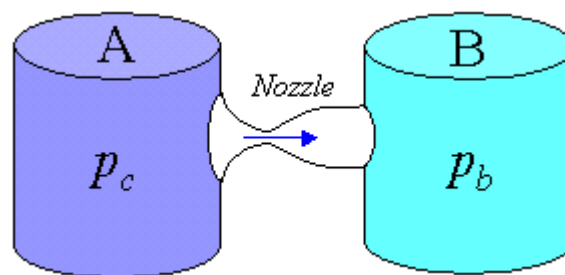


Fig. 2.11. Esquema mitjançant l'ús de cilindres amb diferents pressions

El cilindre A conté aire a alta pressió i fa el paper de la cambra de combustió. La tovera connecta ambdós cilindres i ejecta els gasos del cilindre A al B, que farà de dipòsit.

2.3.2.1. La secció convergent

Si un va controlant la pressió del cilindre B i va mesurant el flux màssic que passa a través de la tovera, el primer pensament que tindrà serà que com més baixa posi la pressió a B, més flux màssic hi passarà per la tovera. I és veritat, però només fins a un límit. A partir del qual, per molt baixa que sigui la pressió a B, no s'aconseguirà fer passar més flux màssic a través de la tovera. Quan s'arriba a aquest límit el flux ha assolit velocitat sònica.

Com es veu a la fig.2.12, si s'augmenta el radi de la gola es podria retardar aquest efecte, però tornaria a passar irremediament.

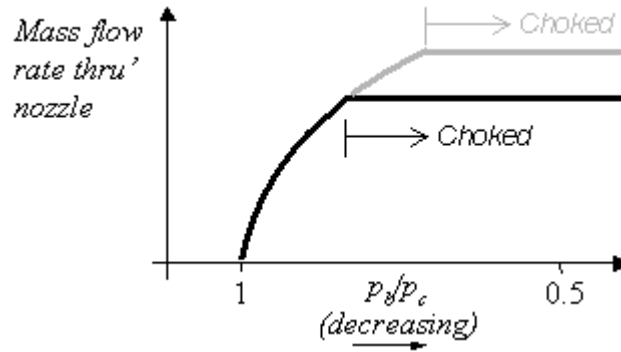


Fig. 2.12. Flux màssic vers relació de pressions

El motiu pel qual el flux té aquest comportament té relació en com es comporten els fluids a la velocitat del so, Mach 1. Tal com mostrava la fórmula 2.9 en una tovera C-D Mach 1 només pot ser assolit a la mínima secció d'àrea.

Quan el flux a través de la tovera no ha arribat a la velocitat sònica, aquest és únicament subsònic i es pot accelerar disminuint la pressió a la sortida, augmentant a la vegada el flux màssic. Però un cop assoleix Mach 1, per molt que es disminueixi la pressió no s'aconseguirà accelerar més el flux en la secció convergent, perquè s'hauria de moure el punt de Mach 1 més lluny de la gola, i això no pot ser perquè és el punt on l'àrea és mínima, i per tant el flux s'estanca.

D'altra banda, però, el model del flux de sortida de la secció divergent sí que pot canviar si es continua baixant la pressió. Tot i que el flux màssic estarà limitat per la restricció que s'acaba de veure, la velocitat d'ejecció que es pot assolir aniria en augment, i en consegüent, l'impuls del nostre coet.

2.3.2.2. La secció divergent

A la figura 2.13, es pot veure el flux a través de la tovera C-D quan és completament subsònic, sense que el flux arribi a estancar-se. Aquest assoleix la seva màxima velocitat a la gola, i llavors es desaccelera a través de la secció divergent fins que surt a fora en règim subsònic.

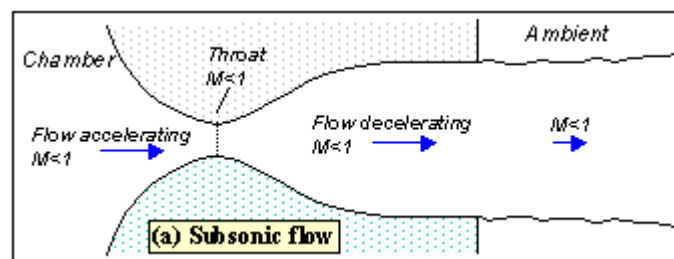


Fig.2.13. Flux subsònic

Si es baixés la pressió de l'ambient només fins al punt en què fos Mach 1 a la gola, el flux aniria més ràpid que a la fig. 2.13, però continuaria estant en règim subsònic.

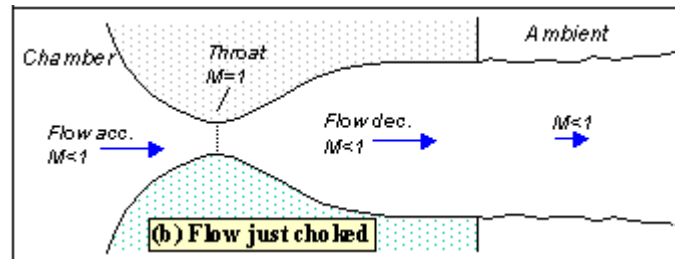


Fig. 2.14. Flux subsònic amb Mach 1 a la gola

Un cop s'ha assolit Mach 1 a la gola, fig.2.14, a mesura que es va baixant la pressió de l'ambient s'anirà augmentant la zona de règim supersònic. Al final de la qual apareixerà una ona de xoc normal que farà baixar de nou al règim sònic, desaccelerant el flux.

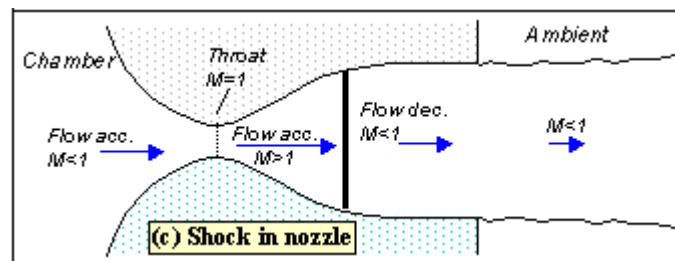


Fig.2.15. Xoc normal a la part divergent

En el cas de la figura 2.16, es pot veure com respecte la 2.15, s'ha disminuït encara més el valor de la pressió de sortida fins al punt de deixar l'ona de xoc just quan finalitza la tovera. Cosa que fa que continuï sortint en règim subsònic cap a l'exterior.

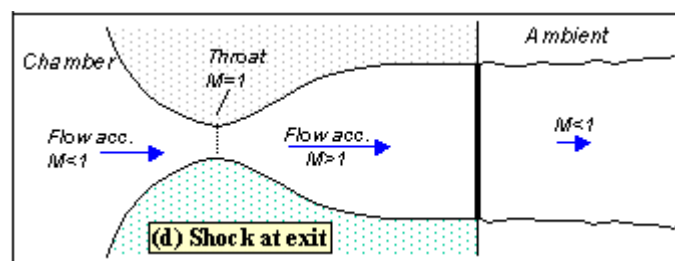


Fig. 2.16. Xoc normal a la sortida

Si es segueix disminuint el valor de la pressió de l'ambient, l'ona de xoc s'encorba, i es genera un esquema complex de xocs i refraccions que inclouen una mescla de flux subsònic i supersònic, a menys que la pressió de l'ambient

sigui prou baixa perquè només hi hagi flux supersònic. Com que el xoc que es produeix ja no és normal, sinó que es corba cap endins, es produeix una contracció del flux a la sortida. I això és degut a què la pressió a la sortida de la tovera és menor que la pressió ambient. D'aquí que en aquest cas se l'anomeni de sobreexpansió, ja que l'expansió del flux dins la tovera ha estat excessiva.

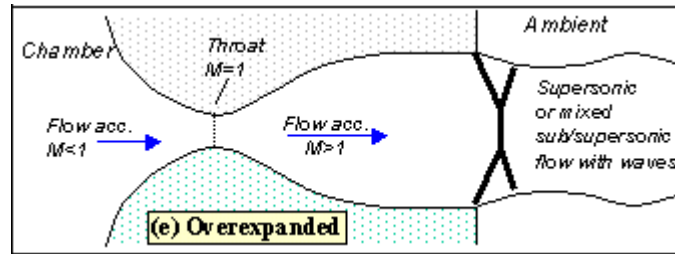


Fig. 2.17. Flux sobreexpansionat

Si es disminueix encara més la pressió ambient, es podria canviar i fer desaparèixer l'ona de xoc. En el cas que la pressió de sortida fos igual a la pressió ambient, condició de disseny, s'hauria aconseguit un flux uniformement supersònic.

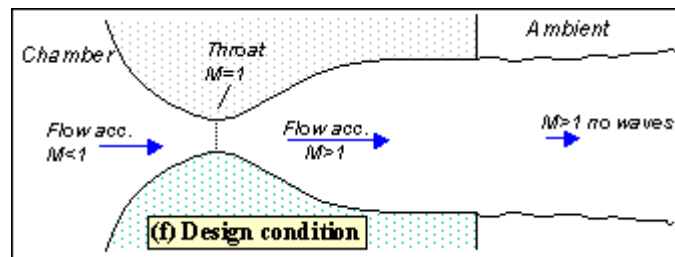


Fig.2.18. Condició de disseny

Finalment, si es disminueix encara més la pressió a l'ambient, fent-la més petita que la de sortida de la tovera, es produiria un nou desequilibri de pressions. En aquest cas s'anomenarà sota-expansió. Les ones d'expansió es formaran a la sortida de la tovera fent girar els extrems del flux gasós de manera que es formi una espècie de plumall, creant un nou tipus complex d'ona.

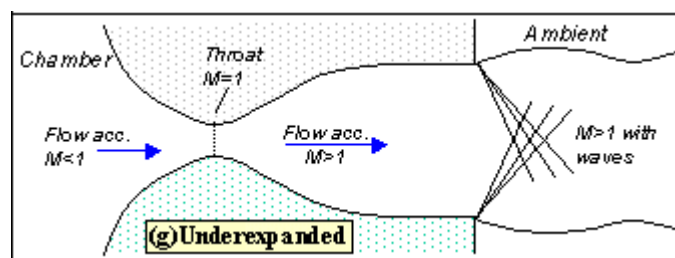


Fig.2.19. Flux sota-expansionat

A la fig. 2.20 es pot veure la relació de pressions al llarg de la tovera pels diferents casos esmentats a dalt. Com s'observa, un cop el flux s'estanca a la gola, la distribució de pressions a la secció convergent no canvia del tot amb la pressió ambient. I si com en els dos primers casos, el flux no arriba a velocitat supersònica, torna a augmentar gradualment la relació de pressions. En canvi, quan hi ha una ona de xoc al bell mig de la tovera, o just a la sortida, podem veure com l'augment de pressió es dona de forma abrupte. En els casos de la sobreexpansió i sotaexpansió del flux, es pot observar com augmenta o disminueix abruptament la pressió del flux un cop fora de la tovera.

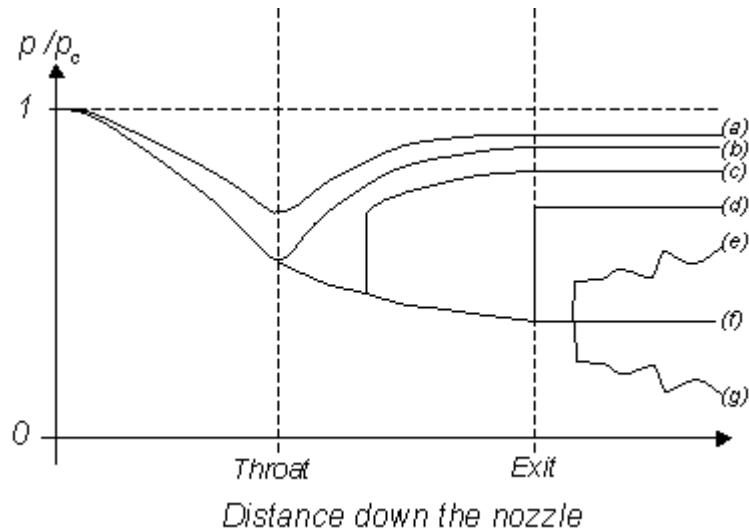


Fig. 2.20. Distribució de pressions al llarg de la tovera pels casos esmentats

CAPÍTOL 3. DEFINICIÓ DEL DISSENY

Definir el disseny d'una tovera des del no res pot ser realment complicat. Així que s'ha optat per agafar models de diferents llibres i del cas real del motor Vulcain 2 de l'Ariane 5. D'aquesta manera s'han obtingut uns prototips⁴ de dimensions aproximadament reals i unes relacions d'àrea determinades per a unes condicions de pressió fixades, per a saber amb certesa que a la realitat funcionaven.

3.1. Presentació dels dissenys ideats

Primer de tot s'ha agafat el disseny d'una tovera C-D que es pot trobar al capítol 7 del llibre *Computational Fluid Dynamics* [1] i s'ha reproduït mitjançant AutoCAD 2008. Com es pot apreciar a la fig. 3.1 la tovera té un ràtio d'àrea d'entrada i sortida idèntic. I la seva forma segueix la següent equació:

$$A = 1 + 2.2(x - 1.5)^2 \quad 0 \leq x \leq 3 \quad (3.1)$$

A partir d'aquesta equació s'ha passat a modificar-la, utilitzant l'àrea de la gola del Vulcain 2, el primer terme de l'equació 3.2, i canviant el factor multiplicador de 2.2, per a què la pendent fos més suau⁵.

$$A = 0.05468 + (x - 1.5)^2 \quad 0 \leq x \leq 3 \quad (3.2)$$

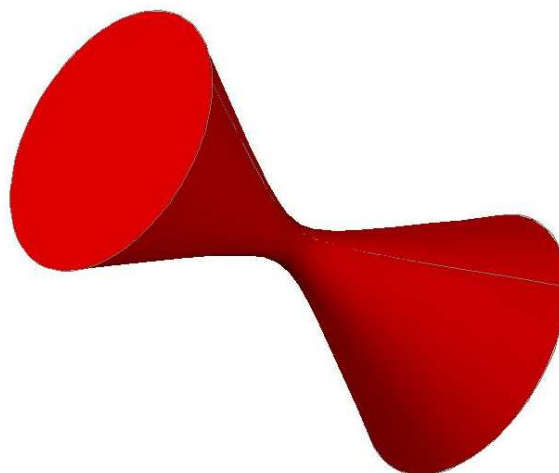


Fig.3.1. Disseny 3D de la primera tovera

⁴ Veure annex 3, taula 3.1: valors de la geometria.

⁵ Veure annex 3, figura 3.1: gràfic comparatiu d'ambdós contorns.

La segona tovera que s'ha reproduït, fou una que s'ha trobat a la pàgina web Richard's Nakka [11] en què es detalla la seva forma i angles en un esquema⁶ per a la seva posterior construcció.

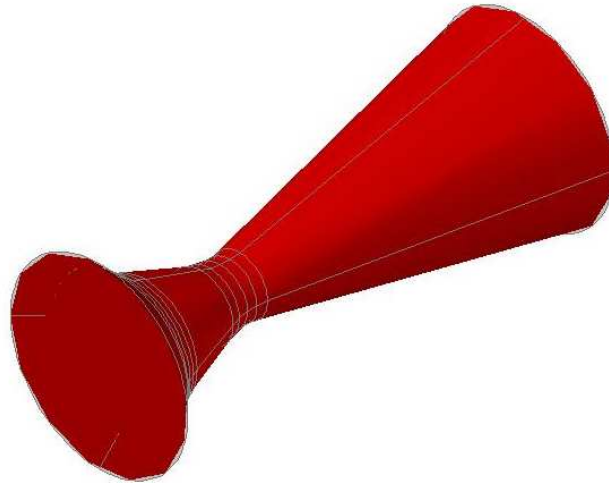


Fig. 3.2 Disseny 3D de la segona tovera

La tercera tovera que s'ha dissenyat, és una adaptació de la primera tovera per tal de què complís amb els ràtios d'àrea del motor Vulcain 2⁷ que equipa el llançador europeu Ariane 5.

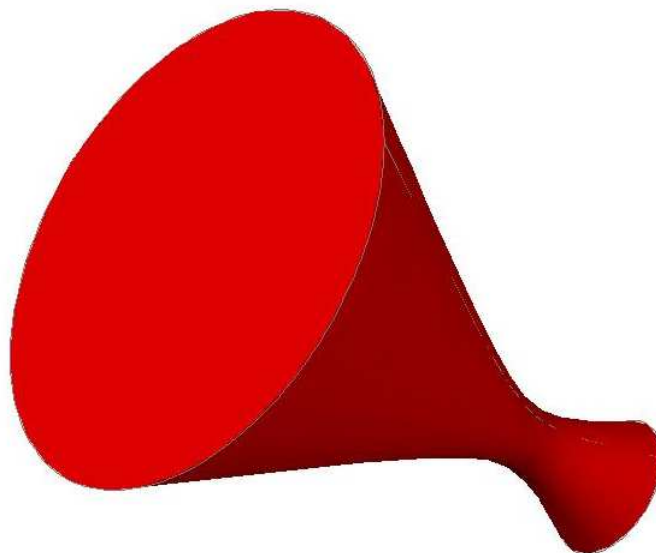


Fig. 3.3. Disseny 3D de la tercera tovera

⁶ Veure annex 3, figura 2.1.

⁷ Veure annex 6, taula 6.1: característiques del Vulcain 2

La quarta tovera que dissenyada ha estat extreta d'un esquema⁸ del llibre *Mechanics and thermodynamics of propulsion* [2]

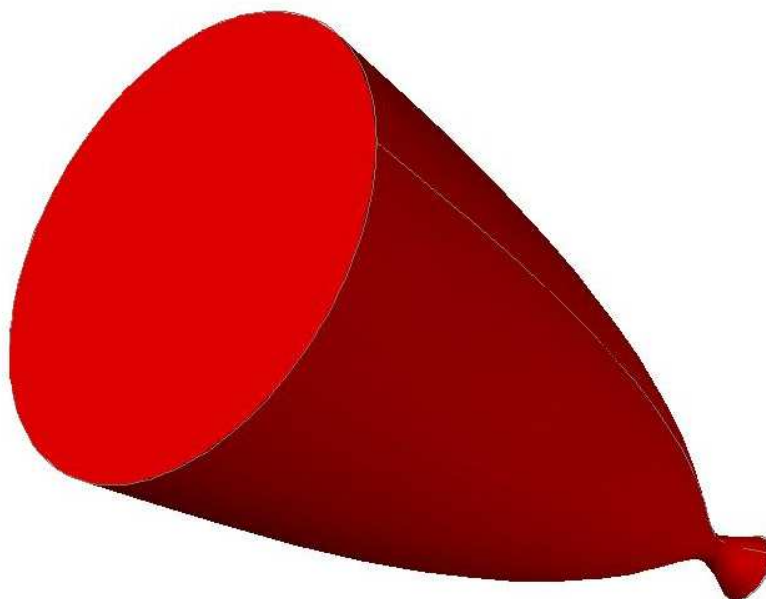


Fig. 3.4. Disseny 3D de la quarta tovera

La cinquena tovera, a diferència de les demés, ha estat realitzada íntegrament en OpenFOAM, per tal de provar la viabilitat del *blockMeshDict*⁹ per aquest tipus de geometries.

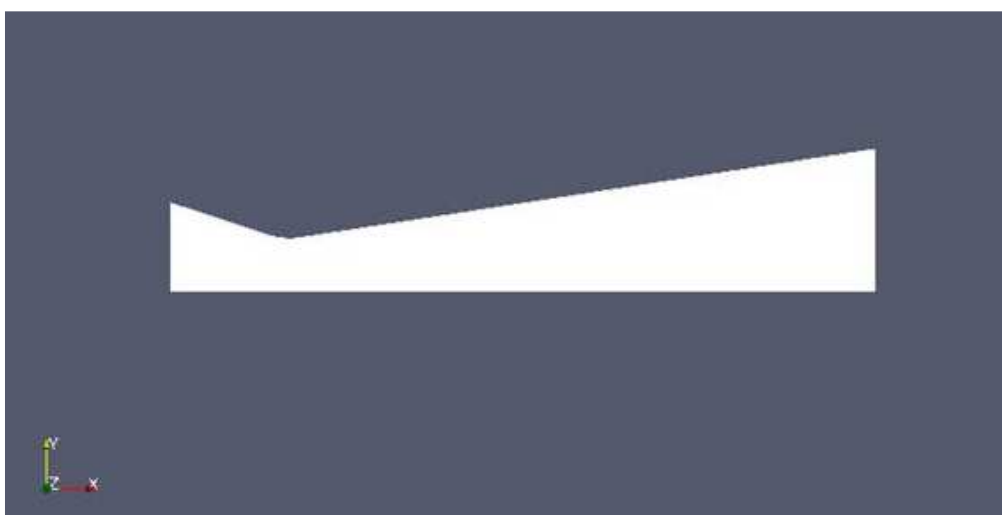


Fig.3.5. Disseny 2D axisimètric de la cinquena tovera

⁸ Veure annex 3, figura 3.2.

⁹ Veure apartat 4.1.2.

De tots aquests dissenys, tant la segona tovera com la quarta no han donat cap solució ni per a un cas estacionari o no estacionari. Ni per Fluent, ni per OpenFOAM després de varies simulacions amb diferents mallats, i per tant han estat descartades.

3.2. Millora del contorn mitjançant un programa de Matlab

Al veure que la tercera tovera funciona correctament pel cas del flux isentròpic, se l'ha volgut dotar d'una forma de campana, més aproximada a la forma de la tovera Vulcain 2, que no pas el disseny de forma cònica.

Per a això s'ha creat un programa¹⁰ amb Matlab que divideix la tovera en dues parts: abans de la gola i després d'aquesta. El programa necessita els valors de les àrees d'entrada, de sortida de la gola i les seves posicions. A més a més en cadascuna d'aquestes posicions es considera que les pendents són nul·les.

Cadascuna de les divisions defineix una àrea que segueix la següent fórmula:

$$A = k_1 \cdot x^3 + k_2 \cdot x^2 + k_3 \cdot x + k_4 \quad (3.3)$$

A cada divisió el programa agafa quatre valors. Per a la part convergent de la tovera agafa les posicions de l'entrada i la gola i les seves respectives àrees. I per la part divergent torna a agafar la posició i àrea de la gola, però agafant la sortida en aquest cas.

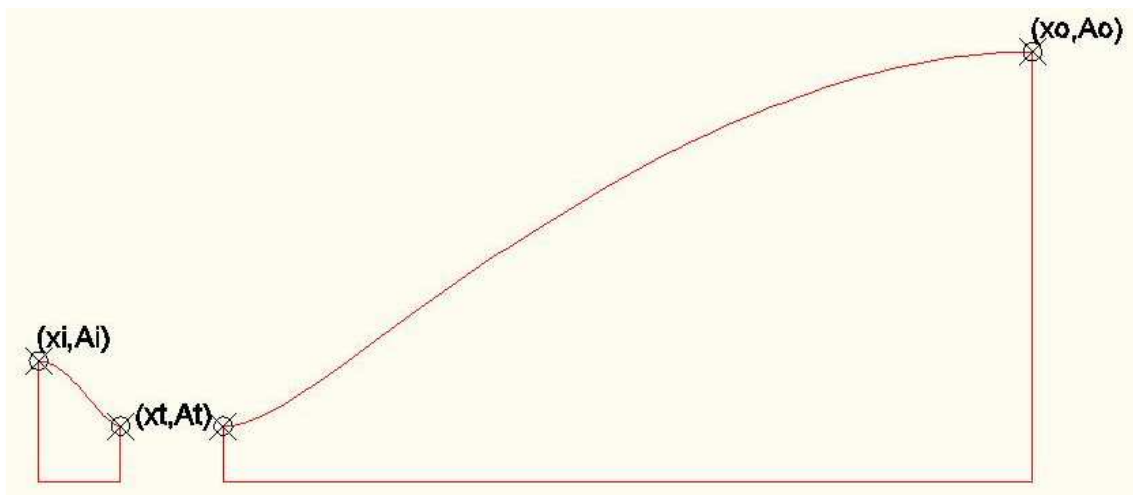


Fig. 3.6. Esquema de la posició dels diferents valors agafats

¹⁰ Veure annex 3, apartat 3.

A partir de l'equació 3.3 sabent el valor de l'àrea en unes posicions concretes i sabent que en aquestes "x" la pendent és nul·la es poden trobar (substituint i derivant) les constants. Així doncs, a partir de la fórmula 3.3, es calculen N punts que conformen la forma de la tovera.

La part convergent i divergent estan separades, per tant es pot modificar la forma d'una sense que el resultat afecti a l'altra. Així mateix, el nombre de punts que es vulguin determinar per cada zona són completament independents.

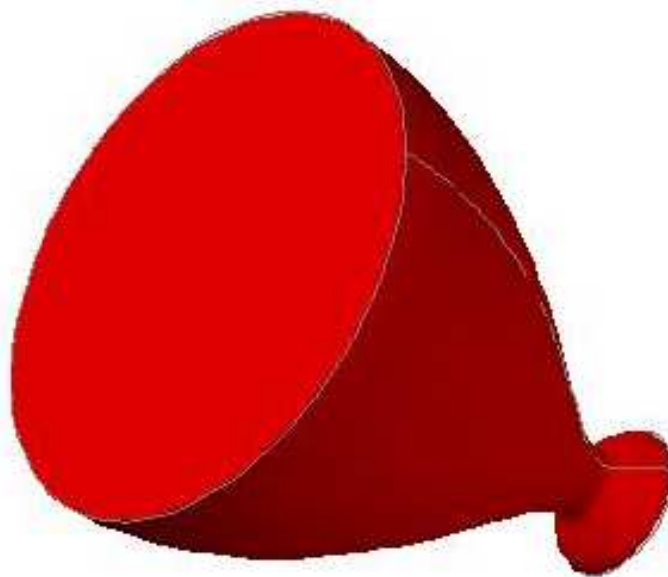


Figura 3.6. Tovera nº3 modificada amb el programa de Matlab

CAPÍTOL 4. FLUENT VS OPENFOAM

Es té la percepció generalitzada de què els productes comercials, pels quals es paga una quantitat de diners per a gaudir del seu ús són millors que pels que o no es paga res o simplement es fa una aportació simbòlica. Sembla, però, que dins el món de la informàtica aquesta idea no pot ésser més allunyada de la realitat. Des de la irrupció del programari lliure i de codi obert, impulsat pel sorgiment del Linux, el número de programes col·laboratius i sense ànim de lucre ha anat creixent any rere any. La majoria amb res a envejar als comercials, els quals fins i tot s'han vist superats i han quedat enrere de l'avantguarda. Com seria el cas del Internet Explorer (Microsoft) vers el Firefox (Mozilla).

Dins el món de la dinàmica de fluids també es poden trobar programes en les dues vessants, tot i que els comercials són de llarg els més emprats. I es va creure interessant, per tant, poder comparar les funcionalitats que oferia un programa comercial amb el d'un programa de codi obert.

D'entre els programaris que es dediquen a la simulació dels fluids es va triar el programa Fluent que desenvolupa l'empresa Ansys, un software comercial amb molt de renom dins de la indústria. L'altre programa que es trià, fou l'OpenFOAM, un software de simulació de fluids de codi obert que està sent incorporat cada cop més a diferents universitats aeronàutiques. I es va creure que era un bon candidat per a què poguessin ésser comparats, i veure els seus pros i contres. Tot i que per a ser precisos s'hauria de pensar en l'OpenFOAM més com una llibreria de diferents programes, dels quals se'n agafen i compilen els necessaris, o se'n modifiquen i creen de nous per tal d'aconseguir una aproximació més exacta del model que es pretén simular.

En aquest punt per tant es pretén posar de manifest les respectives diferències a l'hora de fer-los servir, i les eines més rellevants que s'han hagut d'emprar per a realitzar una tovera.

4.1. Geometria i creació de la malla

4.1.1. Gambit

Per tal de realitzar la geometria de la tovera, així com el mallat del objecte a analitzar, el fluent incorpora un programa adicional anomenat Gambit.

Orientar-se dins del Gambit és relativament senzill. La interfície està dividida en dues parts ben diferenciades: la part esquerra (pantalla negra) on el programa va dibuixant les diferents operacions que se li van manant, i la columna gris d'operacions, al marge dret.

Just a sota de la finestra de dibuix hi ha una petita pantalla blanca on va apareixent l'estat de les operacions realitzades, i una línia per escriure comandos directament.

La columna d'operacions té un esquema molt ben jerarquitzat com es pot veure a la fig.4.1. Depèn del tipus d'operació a realitzar es desplegarà un sub-menú o un altre.

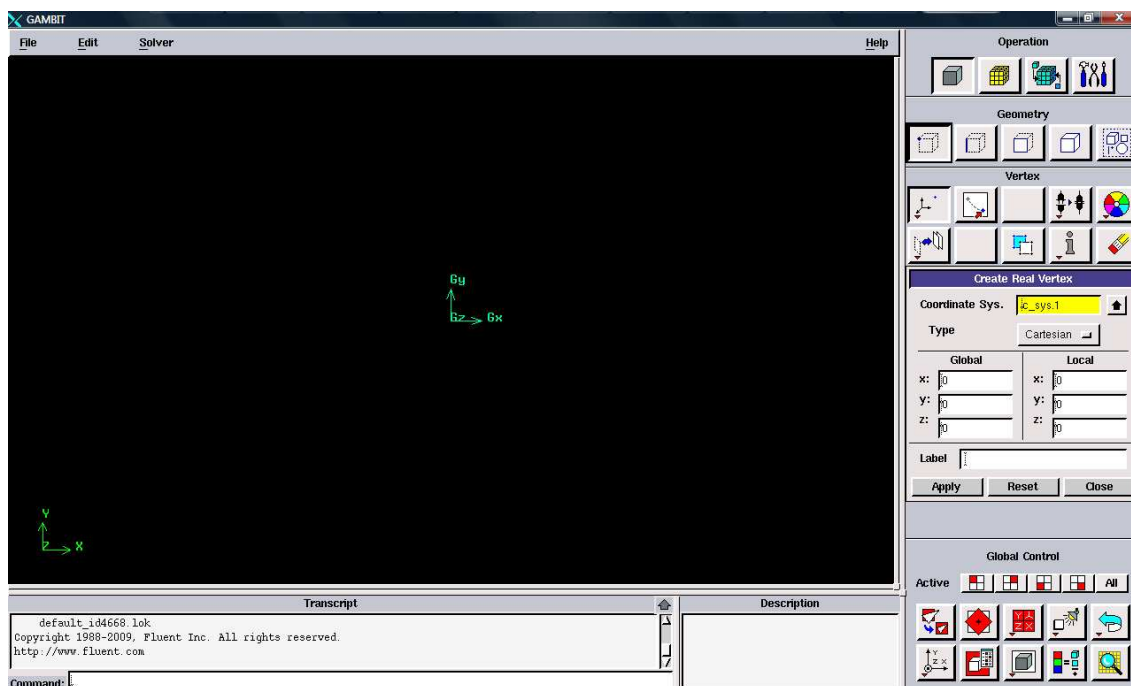


Fig. 4.1. Interfície del Gambit

A l'hora de conformar la geometria cal prémer la primera casella de la fila *operation*, que permet crear-ne una de nova o modificar-ne una existent. Un cop fet això apareixerà el submenú geometria on hi ha la opció d'anar dibuixant punts (vèrtexs), línies (eixos), superfícies (cares) i volums, respectivament. Dins de cadascun d'ells apareixerà un altre submenú on s'escriuran els punts que conformin la geometria buscada, per agrupar-los primer en eixos i aquests posteriorment en cares i/o volums, si conformen una regió tancada.

Cal dir que com més punts es creïn a l'hora de fer la geometria, sobretot en les zones amb arcs, més acurada i precisa podrà ser més tard la malla. I tot i que es faran servir les coordenades cartesianes, el gambit permet dibuixar també en coordenades esfèriques i cilíndriques, fent la conversió a cartesianes (anomenada global) al instant tal com mostra la fig. 4.2.

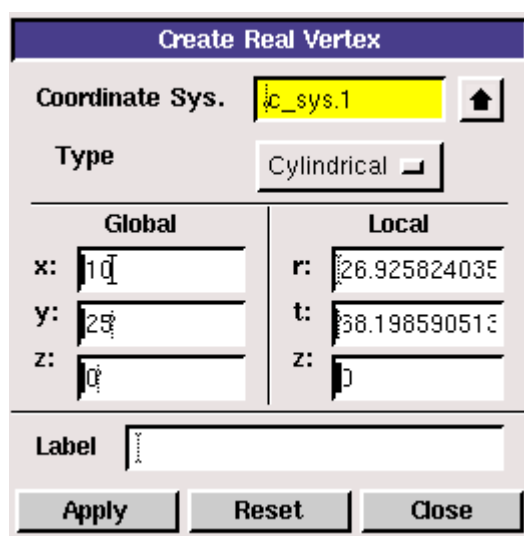


Fig. 4.2. Creació dels punts

Tot i que el Fluent a través del Gambit ofereix aquest sistema per a la creació de geometries, s'ha considerat per a una major rapidesa del disseny utilitzar ACAD. Primerament perquè es tracta d'un sistema més familiar, i segon perquè comparat amb l'ACAD les funcionalitats del Gambit són limitades i un pèl rudimentàries pel que fa a la creació de geometries.

ACIS: És el format que ens permet exportar una geometria feta en ACAD al Gambit per a realitzar el posterior mallat.

A l'hora de fer la malla hi ha dues opcions: fer-la directament o preparar-la abans mitjançant la *sizing function*. Aquesta última opció que es troba a l'últim botó, el quart, de la fila d'operacions, ens permetrà fer una malla més acurada assignant les zones des d'on es vol fer créixer la malla, amb el corresponent valor d'inici, la seva taxa de creixement, i un valor final o límit.

En cas de què no s'hagin triat els paràmetres adients en algun dels passos, es pot modificar sense necessitat d'esborrar-la mitjançant l'eina *modify sizing function*.

Tan si s'ha preparat la malla, com si no, per a mallar el cas cal seleccionar el segon botó que hi ha a la fila d'operacions. Tot i que es recomana mallar les diferents parts per separat (eixos, cares i/o volums), pot fer-se tot d'una vegada directament.

Durant el procés s'haurà de seleccionar quin tipus de geometria es vol per a fer el mallat, entre les quals es troben la triangular equilàter i la quadrilàter.

Tot seguit s'establirà l'espaiat que es vol que hi hagi entre els diferents nodes de la malla. Abans de donar l'ordre de creació de la malla, si s'ha creat amb anterioritat una *size function* es mantindrà desactivada la casella per a què la ignori.

El Gambit ofereix una opció per guardar totes les comandes que s'han anat executant en la creació de la geometria i/o malla en un arxiu anomenat *journal*. Executant-lo a posteriori, el Gambit permet a l'usuari refer tots els passos que va dur a terme i modificar-los si es vol. És una eina ben útil i interessant.

4.1.1.1. Cas particular

A l'hora de fer la geometria d'una tovera s'ha utilitzat AutoCAD per a dibuixar-la com s'ha comentat a l'apartat anterior. I mitjançant el format ACIS s'ha exportat a Gambit per al seu posterior mallat.

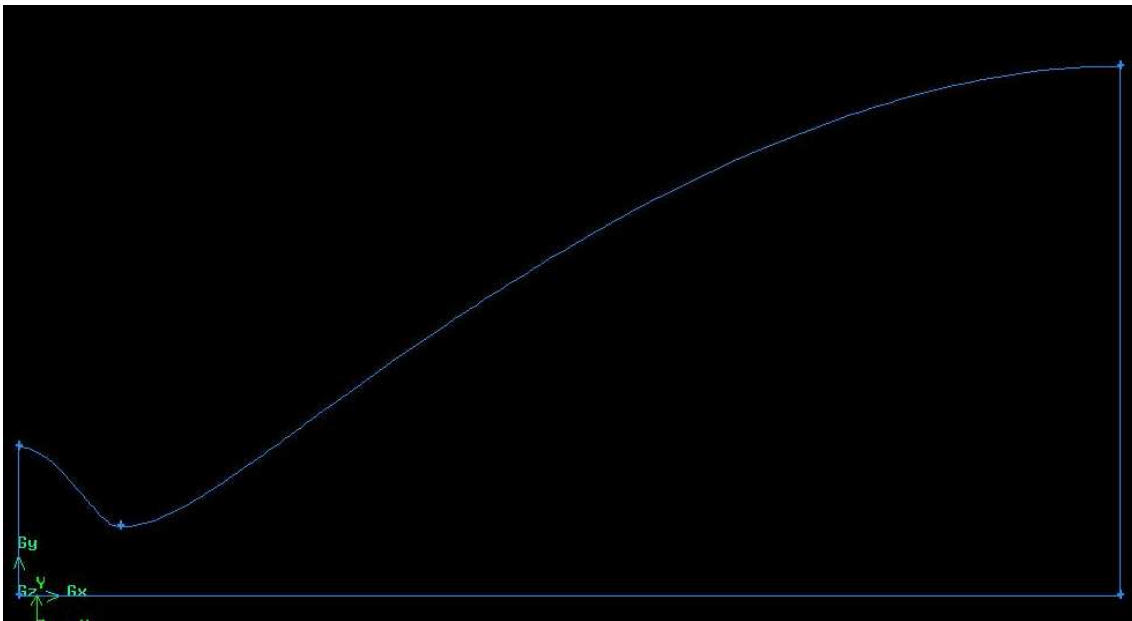


Fig. 4.3. Imatge del ACIS exportat amb Gambit

S'ha creat una malla per dins de la tovera, ja que el volum de control que ens interessa és el flux que passa per dins. Com que a la paret de la tovera és on hi haurà la capa límit del flux, és important que la resolució de la malla sigui major en aquella zona. Per tant s'ha creat una *sizing function* per la qual el mallat prop de la paret és ben petit i va creixent proporcionalment cap endins. Així mateix, s'ha triat una geometria quadrilàter per la malla ja que és la més òptima a l'hora de fer passar un flux, degut a què els triangles i els seus acabaments en punxa podrien donar lloc a més imperfeccions.

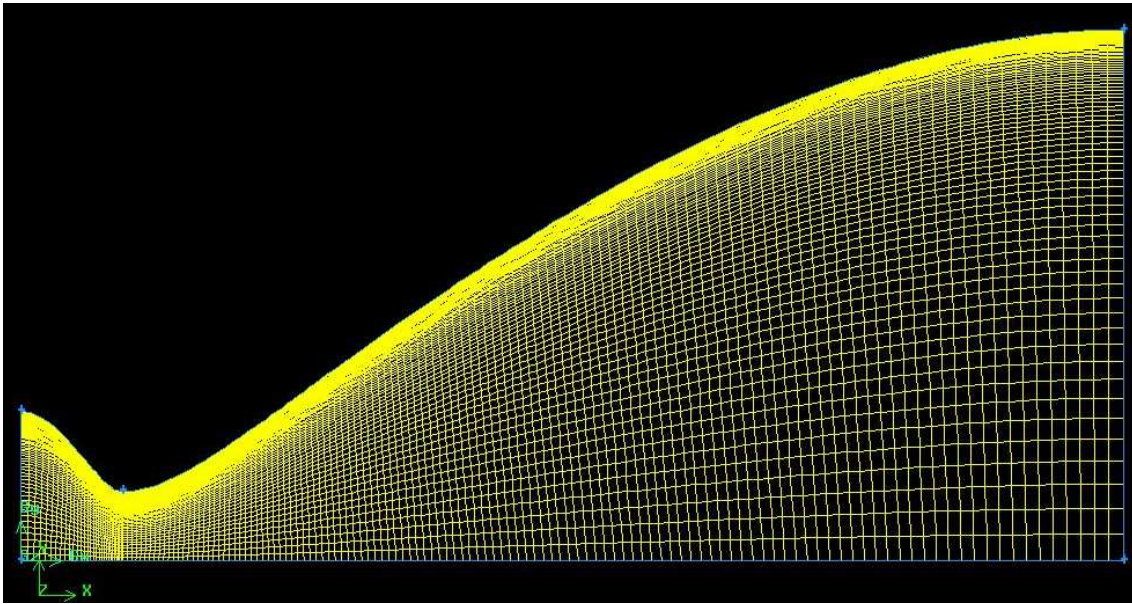


Fig.4.4. Geometria mallada

Per a uns càlculs més acurats també es pot afegir una capa límit al llarg de la paret, que serà el punt crític del flux. Perquè la capa límit surti millor és convenient separar en dos la paret. Abans i després de la gola, perquè la forma i direcció sigui la desitjada. Tot i això, després de contrastar la simulació d'una mateixa tovera amb i sense capa límit (contorn blanc fig. 4.5), s'ha arribat a la conclusió que si es fa una *size function* ben acurada com la de la imatge, no és necessari definir una capa límit ja que els resultats no milloren.

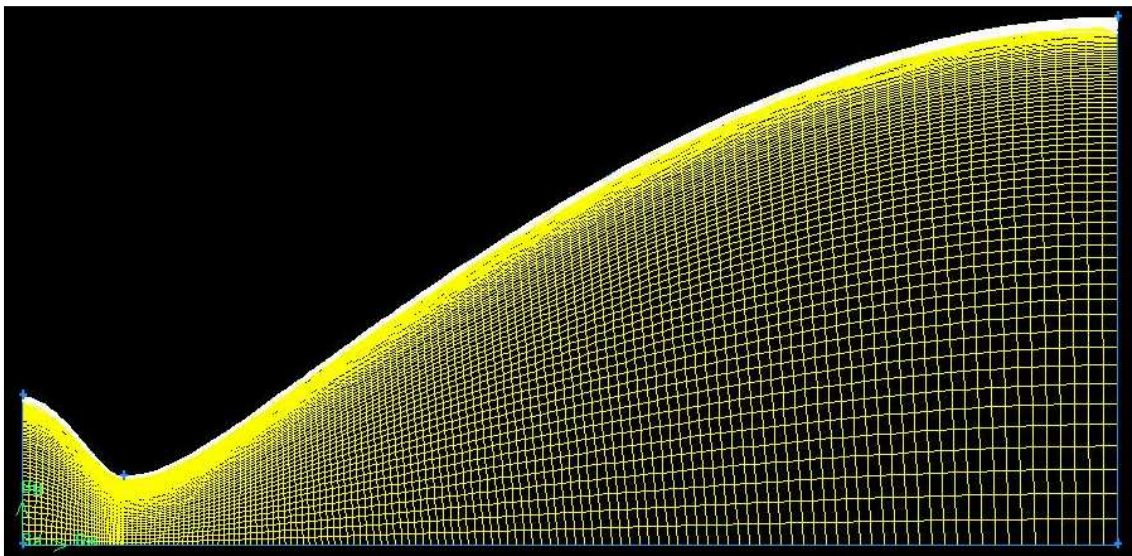


Fig.4.5. Geometria mallada amb capa límit.

Un cop realitzada la malla se'n ha comprovat la seva qualitat. El rang de colors que utilitza el Gambit va del blau al vermell, sent aquest últim el que indica una pitjor qualitat. La part que es veu encara de color groc de la fig. 4.6 és perquè

les cel·les de la malla són ben petites: si s'amplia la imatge es pot veure clarament si la zona tendeix al blau o al vermell.

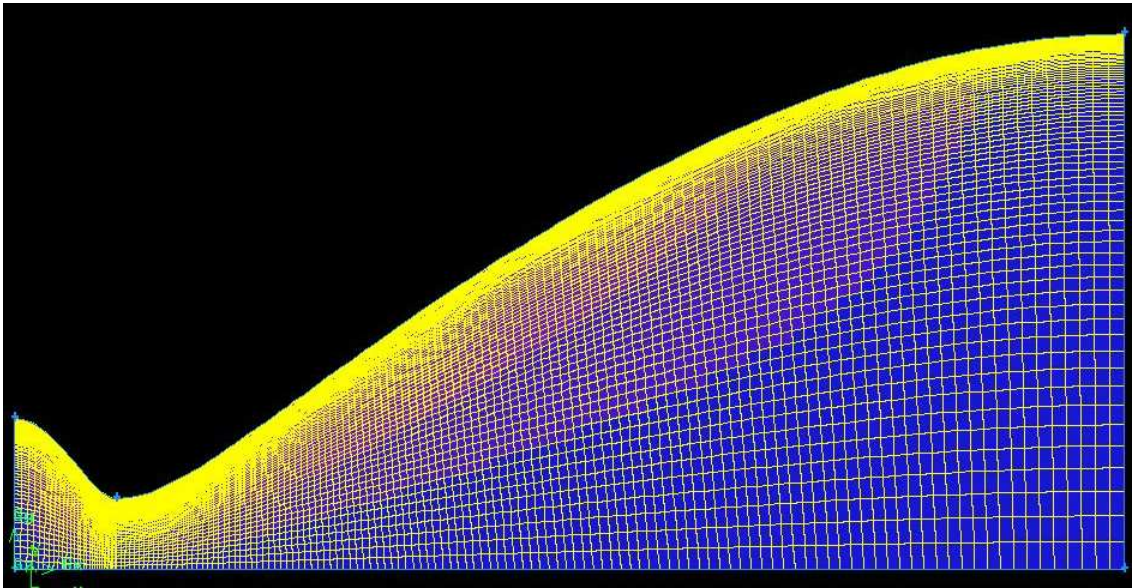


Fig.4.6. Examinant la malla

Un cop comprovat que la malla és bona, cal definir les condicions de contorn de la tovera. L'entrada de la tovera es designarà com a *pressure inlet*, la sortida com a *pressure outlet*, la paret com a *wall*, i l'eix longitudinal es designarà com a *axis*.

Les toveres que s'han emprat per a Fluent han estat en 2D axisimètric per a una major agilitat en els càlculs. D'aquesta manera el programa analitza la secció de la tovera com si hi fos completa i en 3D, però mostrant-nos només els resultats d'una secció unidimensional.

4.1.2. OpenFOAM

Per a fer la geometria s'ha de crear un arxiu anomenat *blockMeshDict*, que és un arxiu de text que conté una sèrie de paraules clau. Com el nom indica, aquest arxiu permet dibuixar la geometria i alhora descriure com serà la malla. OpenFOAM defineix la malla per blocs, i encara que representi el cas a estudiar en 2D, la malla serà analitzada com si fos en 3D ja que el programa de post-processatge, ParaView, només llegeix en tres dimensions. OpenFOAM només treballa amb malla 3D i per tant, per a realitzar un estudi 2D, la direcció que no interessa no es malla.

Exemple d'un *blockMeshDict* (fig.4.7):

```

convertToMeters 0.1;

vertices
(
    (0 0 0)//0
    (1 0 0)//1
    (1 1 0)//2
    (0 1 0)//3
    (0 0 0.1)//4
    (1 0 0.1)//5
    (1 1 0.1)//6
    (0 1 0.1)//7
);

blocks
(
    hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (20 20 1)
    simpleGrading (1 0.1 1)
);

edges
(
);

patches
(
    wall movingWall
    (
        (3 7 6 2)
    )
    wall fixedWalls
    (
        (0 4 7 3)
        (2 6 5 1)
        (1 5 4 0)
    )
    empty frontAndBack
    (
        (0 3 2 1)
        (4 5 6 7)
    )
);

mergePatchPairs
(
);

```

La primera paraula clau que hi ha és el *convertToMeters*, que serveix per escalar la geometria. Si es vol que aquesta sigui en mil·límetres s'haurà d'escriure un factor 10^{-3} , si es vol en metres, un factor 1.

La següent paraula clau és *vertices*, aquí s'ha d'anar definint un per un, i per ordre, en cadascun dels plans coordinats, tots els vèrtexs de què estarà composta la nostra geometria.

La tercera és *edges*. Si la geometria no conté zones corbes, es pot deixar en blanc, ja que per defecte els vèrtexs s'uneixen en línia recta. Si no, s'opta per unir els vèrtexs amb una o diferents opcions: *arc*, *simpleSpline* (*spline*), *polyLine* (vàries línies), *polySpline* (vàries *splines*), *line* (la opció per defecte). Totes, excepte 'arc', demanaran més d'un punt d'interpolació.

La quarta paraula clau és *blocks*. OpenFOAM defineix la malla unint diferents blocs hexaèdrics. Per definir un hexaedre es defineixen les dues cares que els formen mitjançant els vèrtexs. El número de vèrtexs que el conformen han d'anar ordenats d'esquerra a dreta, seguint la regla de la mà dreta amb el vector superfície cap enfora. També ha de definir-se el número de cel·les que contindrà cada bloc en cada respectiva direcció x , y , z . A més a més és important que les cares que fan contacte estiguin dividides amb el mateix nombre de cel·les i que les cel·les límit coincideixin amb la posició exacta de les del bloc següent. Per acabar, cal indicar amb el *simpleGrading* com s'expandirà el tamany d'aquestes cel·les al llarg del bloc. Aquesta funcionalitat dóna la relació entre la mida de l'última cel·la respecte la primera.

L'última paraula clau és *patches*. I és on es defineixen els contorns de la malla. El nom amb què es denomini cada 'contorn/zona' serà clau per després identificar-les ràpid i poder establir les seves condicions.

Al *blockMeshDict* d'exemple hi ha una última funció anomenada *mergePatchPairs* que no s'ha fet servir i serveix per unir diferents blocs que es superposen.

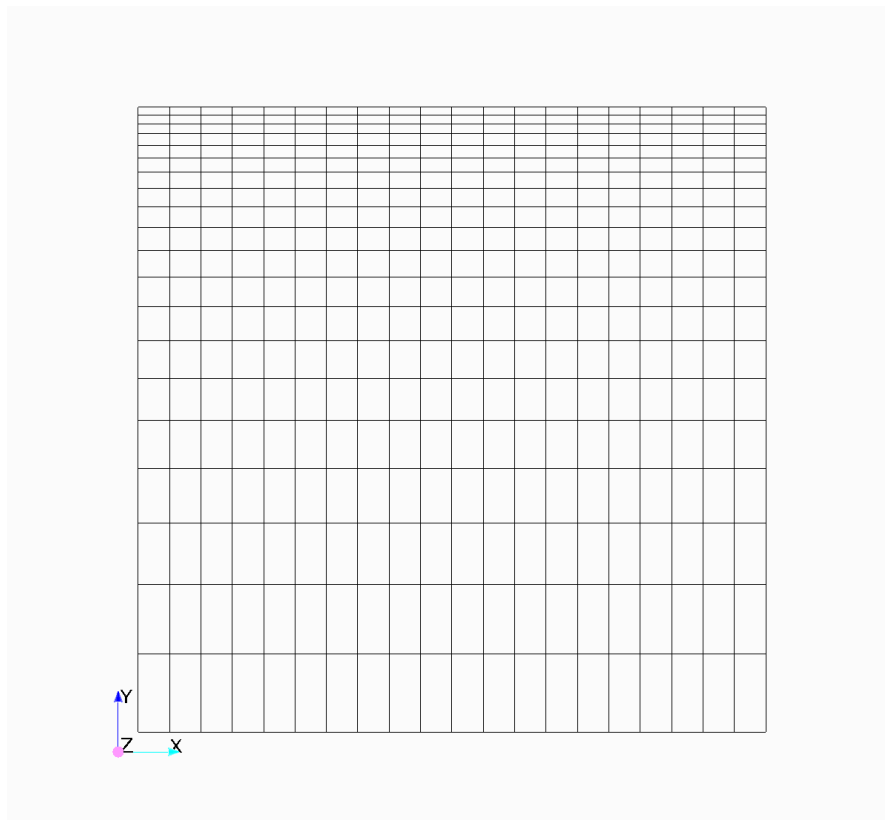


Fig.4.7. Malla visualitzada amb Paraview

Un cop es tenen tots els punts de la malla definits, s'executa des de la consola l'aplicació *blockMesh*. Si la geometria que s'ha creat és coherent i es tanca bé, OpenFOAM crearà la malla. En cas contrari, apareixeran unes línies de codi

dient aproximadament on està l'error. I aquest és un dels punts més difícils del seu ús, i és que OpenFOAM t'obliga a revisar de dalt a baix i minuciosament la geometria proposada, fins que aquesta pot unir-se i crear la malla sense cap tipus de problema.

Un dels objectius del treball és poder comparar els resultats d'una geometria idèntica en ambdós programes. I vistes les dificultats de crear una malla amb OpenFOAM, sobretot si conté més d'una part corba, per tal d'acomplir l'objectiu, el més adient ha estat crear una malla que pogués ser emprada tant per Fluent com per OpenFOAM. Una possibilitat que OpenFOAM ofereix mitjançant l'eina *fluentMeshToFoam*. Amb ella OpenFOAM permet convertir els .msh creats amb Gambit, per a ser utilitzats amb Fluent, en arxius OpenFOAM.

El fet de què s'aconsegueixi el mallat sense passar pel *blockMeshDict*, fa que sigui impossible canviar qualsevol aspecte referent a la geometria. Tan sols es podrà modificar l'assignació de les diferents condicions de contorn.

Tot i això, el principal problema del *fluentMeshToFoam* és que no pot passar directament una malla axisimètrica. Quan es passa la malla 2D realitzada amb Gambit al OpenFOAM, aquest la converteix en una malla 3D d'amplada unitària, i per molt que estiguin definits els diferents contorns no la converteix directament en la falca que es necessita. Per a poder obtenir-la cal una aplicació creada per usuaris anomenada *makeAxialMesh*.

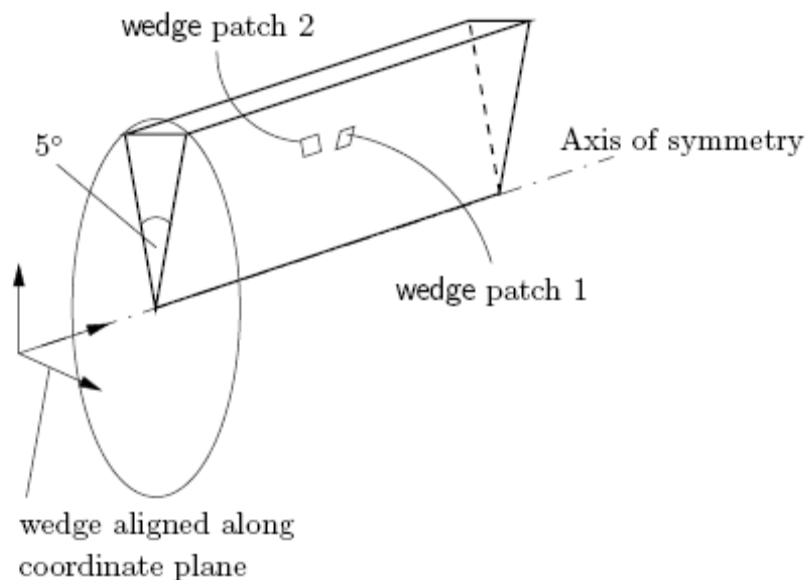


Fig.4.8. Esquema de la falca de 5°

Amb aquesta aplicació el que es fa és rotar els plans que es defineixen com a *wedges* respecte el que s'anomena *axis*, que és un eix de rotació. Això es realitza modificant un document dins de la carpeta *system* o directament escrivint '*makeAxialMesh -axis -wedge -wedgeAngle*'. On *axis* serà l'axis que l'usuari hagi definit; *wedge* seran els *frontAndBackPlanes* en cas de què s'hagi exportat la malla d'una en 2D amb Gambit; i *wedgeAngle*, l'angle que se li vol

donar. En aquest cas ha d'ésser 5° , però com que és el valor predeterminat no farà falta canviar-lo.

Tot seguit s'usa l'eina *collapseEdges* que serveix per acabar en punta les cares en cas de què sigui necessari.

Quina diferència hi ha entre una malla axisimètrica en Fluent respecte OpenFOAM?

Per Fluent una malla axisimètrica és una malla en 2D on es defineix un axis respecte on es fa la simetria axial. En canvi OpenFOAM defineix la malla axisimètrica com una falca de 5° , o sigui, en 3D. On els plans que al fer la revolució desapareixen s'anomenen *wedges*, i es considera l'axis com a pla de simetria (*symmetryPlane*).

OpenFOAM també permet exportar la seva malla cap a Fluent. En aquest cas, l'aplicació s'anomena *foamMeshToFluent*. Així com els resultats que s'obtenen de les simulacions realitzades, mitjançant el *foamDataToFluent*.

4.1.2.1. Cas particular

La tovera que s'ha dissenyat¹¹ està composta per 20 vèrtexs. Els quals conformen un tall transversal en forma de falca de 5° . Per definir-la s'ha hagut d'anar dins la paraula clau *Patches*, i on posa *symmetryPlane axis* definir una línia com si es tractés d'una superfície. Cal dir que les cares dels hexaedres són superfícies quadrades, per tant quan es defineix la *patch inlet*, al ser la falca triangular, s'ha d'usar un vèrtex repetit definint-lo com el primer i l'últim punt de la superfície.

Per definir alguns *edges* de la paret de la tovera s'ha usat l'arc. Aquesta funció dibuixa un arc, entre els dos vèrtexs que li assignem i un punt d'interpolació entre ambdós, de la següent manera:

arc vertex1 vertex2 (Punt interpolació [x y z])

¹¹ Veure annex 4, apartat 1.

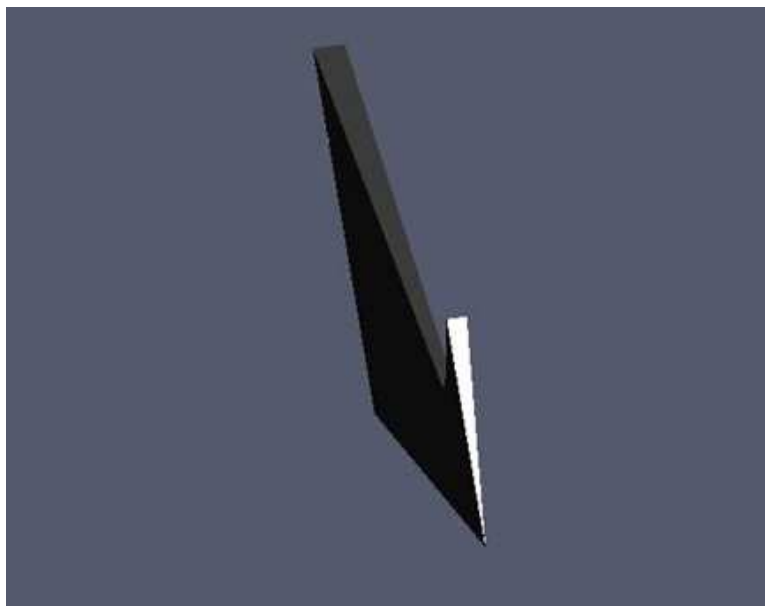


Fig. 4.9. Tovera axisimètrica en forma de falca de 5°

Mitjançant el Paraview es pot veure com ha quedat la geometria que s'ha realitzat si el visualitzem com a sòlid, o la malla com a *wireframe*. D'aquesta manera es comprova si és tal i com s'havia ideat o cal fer modificacions a la geometria.

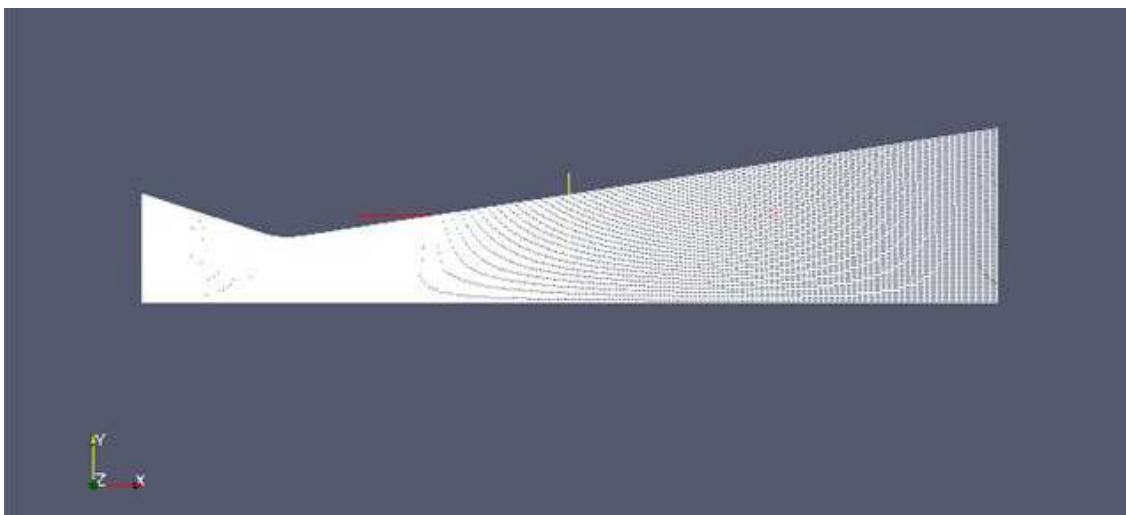


Fig.4.10.. Tovera mallada

4.2. Simulació

4.2.1. Fluent

Un cop es té la mallada la geometria amb Gambit, s'exporta com a *mesh* per a poder obrir-la com a cas d'estudi al Fluent.

Primer de tot el que cal fer és comprovar la malla fent un *check* dins la barra d'eines anomenada *grid*. Si el volum dóna negatiu la malla està mal feta, donarà problemes al fer la solució i el programa no trobarà mai els valors esperats. Per tant haurà de refer-se i tornar al Gambit, havent de refer potser també part de la geometria. Mitjançant la funció *display grid*, es pot visualitzar la malla realitzada i comprovar prement a sobre els diferents contorns assignats des del Gambit.

Cal veure també en quines unitats està feta la malla, i escalar-la, mitjançant *scale*, en cas de què sigui necessari.

Un cop fet això, cal assignar quin tipus de fluid i/o material es vol pel cas, i especificar el valor de les diferents variables que hi apareixen, com pot ser la calor específica (cp). Els valors estàndards, però, solen venir proporcionats per Fluent.

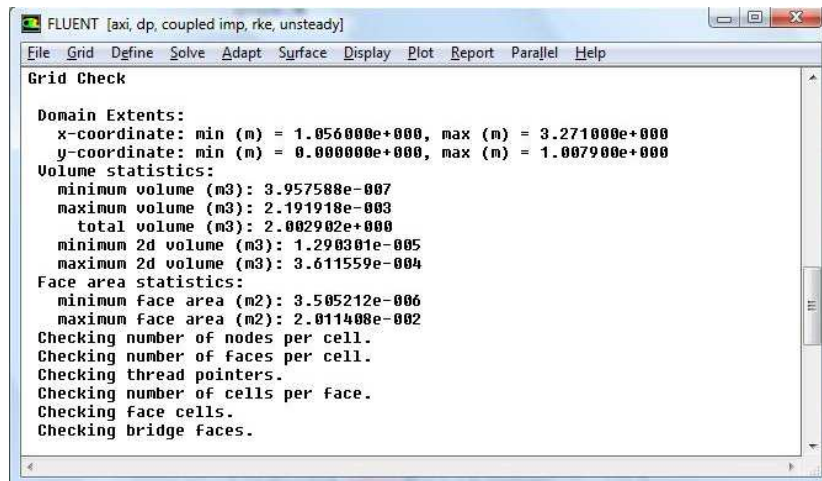


Fig.4.11. Interfície del Fluent

S'ha de definir el model de *solver* que es vol emprar: Fluent en posa dos a escollir: *segregated* (basat en la pressió) i *coupled* (basat en la densitat). El primer es recomana per a fluids subsònics i el segon per a supersònics. Dins el mateix submenú cal indicar que la malla és axisimètrica i el tipus de solució que es pretén buscar si estacionària o no estacionària.

També ha d'activar-se l'equació de l'energia per a què tingui en compte els intercanvis de calor dins el mateix fluid. I definir quin model de viscositat o turbulència es pretén seguir.

Un cop definit el conjunt d'equacions que buscaran una solució pel nostre cas, cal especificar les condicions de contorn (*Define/boundary conditions*). Abans, però, caldrà especificar les condicions d'operació, on s'haurà de definir el valor de la pressió operativa.

Definida la pressió operativa, cal indicar tot seguit quines són les condicions de contorn de la tovera: tan de l'entrada, com de la sortida. I comprovar que l'axis està definit com a tal i no com un pla de simetria. En cas que les condicions de contorn no hagin estat ben importades des del Gambit, o sigui, que per exemple s'hagi definit l'axis com a paret, no hi ha cap problema, ja que pot canviar-se fàcilment des del propi Fluent.

Abans de passar a solucionar el cas cal fer una sèrie de passes més. Dins de *Solve*, primer de tot cal anar a *controls solutions* i augmentar l'ordre de discretització a segon grau del mode turbulent. Allí mateix, es pot veure com el Fluent, de manera predeterminada, té definit un nombre de *courant* de valor 5.

El nombre de *courant* (C) és un valor que té molta importància a l'hora de trobar una solució analítica. I el seu valor ve determinat per la següent equació:

$$\frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} < C \quad (4.1)$$

El valor òptim del nombre de *courant* és entre 0 i 1 i com es pot veure a l'equació 4.1 ha d'ésser major que el producte de la velocitat del flux per l'increment de temps, dividit entre l'increment de longitud. Per tant ens interessa agafar valors petits de variació temporal en cas que les cel·les de la malla siguin massa petites, perquè no canviï el valor del *courant*. O bé, just el contrari, increments de temps més grans per a cel·les més amples. De les dues opcions, la més interessant és reduir l'increment de temps o *time step*, per no perdre precisió en cas de fer servir una malla més gran.

Tanmateix, el Fluent no dóna cap valor entre 0 i 1, sinó que el predetermina en 5. I això és perquè no segueix la definició general del nombre de *courant*, sinó una de pròpia ideada per Ansys.

Ara ja es pot inicialitzar el cas (*Solver/initialize*). Un cop dins caldrà indicar al Fluent des d'on vol que comenci a realitzar els càlculs.

Un cop inicialitzat, el Fluent ens permet adaptar el gradient de la malla (*Adapt/Gradient*) per tal de minimitzar els possibles errors que hi hagi a les cel·les i trobar una millor solució. Per exemple, dels tres mètodes que Fluent proposa: s'ha fet servir el del gradient que és el recomanat per simulacions de fluid supersònic amb fortes ones de xoc. També hi ha un altre paràmetre a

definir que és el de normalització, que serveix per escalar els valors de la solució, o sigui per refinar la malla, utilitzant un valor de *coarsen* i un de *refine threshold* que serviran per adaptar-la millor.

A l'hora de buscar una solució és recomanable adaptar la malla tot posant primerament un valor mínim i màxim de cel·les. L'adaptació dinàmica de la malla farà que el *solver* estigui constantment refinant la malla davant la proximitat d'una ona de xoc conforme les iteracions avancen. El programa identifica les ones de xoc buscant grans gradients de pressió.

Abans de començar a iterar el cas per trobar una solució, cal determinar també el criteri de convergència per a les variables implicades en la resolució (*Residuals*). Com més petit sigui, més acurada serà, tot i que no sempre els valors podran arribar-hi. Un paràmetre estàndard és 10^{-4} .

Si es vol veure una animació del cas en les iteracions que es vol executar, només cal anar a *animation*, abans de començar i definir la variable que es vol seguir. Un cop acabades les iteracions, quan convergeixi o es decideixi que els valors dels residuals són gairebé estacionaris, es pot anar a *play animation* i veure la seqüència d'imatges que el Fluent ha anat creant. I si un ho desitja es pot crear un vídeo de la mateixa.

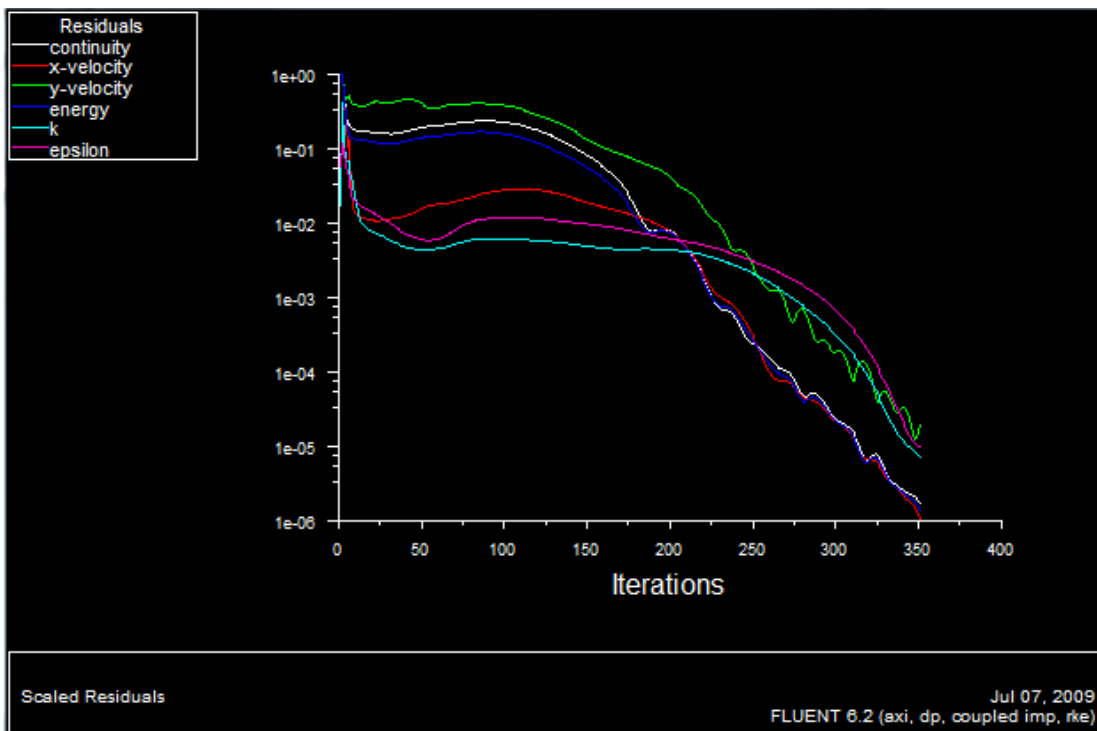


Fig. 4.12. Gràfic dels residuals per a un cas estacionari

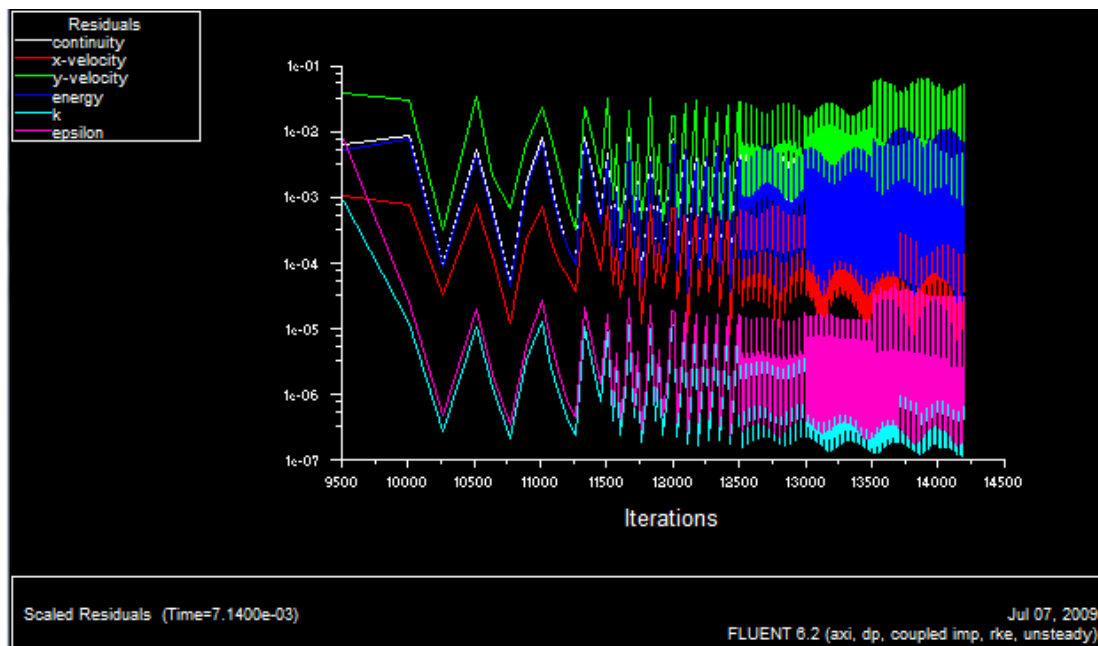


Fig. 4.13. Gràfic dels residuals per a un cas no estacionari

Si es decideix buscar una solució no estacionària caldrà posar a part del nombre de *time steps*, el valor de cadascun i el nombre màxim d'iteracions que es vol per cada valor de temps.

Un cop es té una solució, es poden comprovar els diferents resultats de forma visual amb el *Grid contours* per cadascuna de les variables implicades. On es podrà visualitzar el valor mínim i màxim de cada propietat termofísica.

Per tal d'extreure els valors mitjans a la sortida de la tovera, s'empra l'eina *Report/Surface Integrals* on seleccionant la opció '*Integral*' es mostra la suma de tots els valors per cada propietat i contorn escollit en funció de l'àrea del contorn.

4.2.1.1. Cas particular

1. S'obre la malla creada amb Gambit per a poder-la analitzar amb fluent com s'ha comentat a l'apartat anterior.
2. Es defineix el fluid com a aire, i se li indica que segueixi el model del gas ideal. Es canvia el valor de la c_p constant a variable¹².
3. A les condicions d'operació, el valor de la pressió operativa es deixa a 0 ja que es vol treballar amb valors absoluts i no pas relatius.

¹² Veure annex 5, taula 5.1.

4. El model de solver es defineix com a *coupled implicit*, ja que es treballa amb flux supersònic. Es busca la solució no estacionària, i se li assigna el segon grau de discretització.
5. S'activa l'equació de l'energia, es defineix el model viscos de *la k-epsilon realizable*. I es posa a grau dos el nivell de discretització dels paràmetres turbulents TDR (la epsilon) i TKE (la k).
6. Es comprova que els contorns estan ben designats, i es modifica el de l'entrada del flux amb una pressió total de $1,15 \cdot 10^7$ Pa i una d'estàtica de $1,147 \cdot 10^7$ Pa. A una temperatura de 2.545 K. A més a més, se li posaran uns valors d'entrada per la TDR i la TKE, de 266..000 i 1.000 respectivament per tal de coincidir amb l'OpenFOAM, que són els valors que proporciona per a un flux turbulent. I el de la sortida es deixa amb els valors per defecte: pressió: 0 Pa i 300 K.
7. S'inicialitza el cas per l'*inlet*, s'adapta la malla pel mètode del gradient i es normalitza amb *scale*. Donant uns valors al *coarsen* i *refine threshold* de 0.3 i 0.7 respectivament.
8. S'executa amb un nombre determinat de iteracions o *time step*, com pot ser 1000, depenent de si el cas és estacionari o no estacionari. I s'espera a què el Fluent calculi una solució.

4.2.2. OpenFOAM

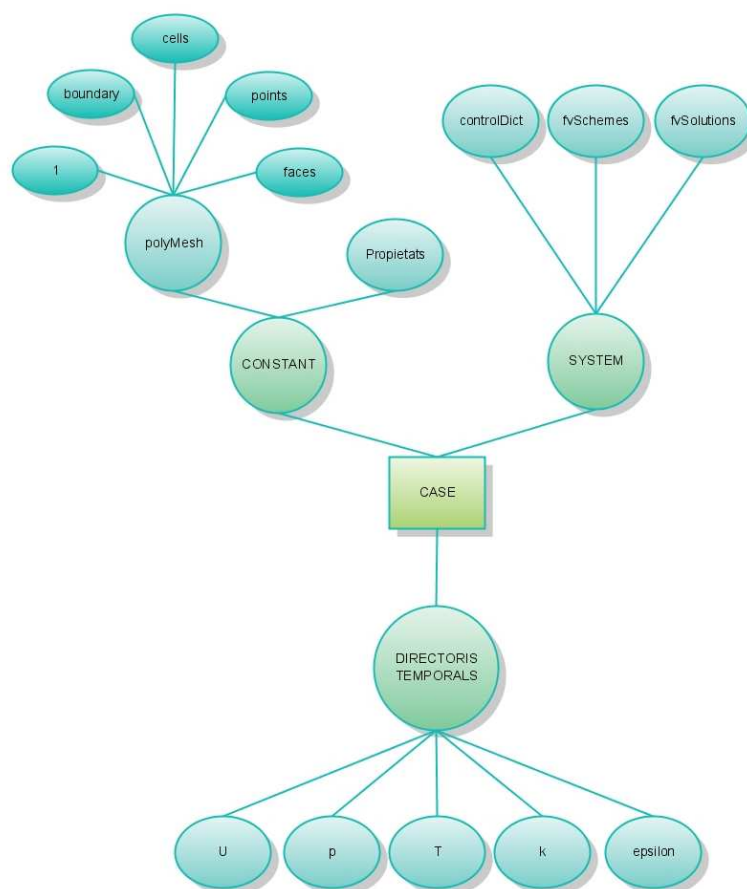


Fig. 4.14. Estructura dels arxius d'OpenFOAM

Quan es crea un cas amb OpenFOAM aquest s'estructura en varies carpetes bàsiques: *system*, *constant* i els directoris de temps.

A la primera carpeta, la *system*, és on es defineixen els esquemes i mètodes que s'utilitzaran i el temps pel qual es solucionen les simulacions. Un cop dins es troben com a mínim tres arxius: el *controlDict*, que és el que marca l'inici i acabament del temps, el *time step*, i el temps d'escriptura, entre altres; els *fvSchemes* que és on hi ha els esquemes numèrics a aplicar segons les equacions que requereix el cas; i les *fvSolutions* que és on hi ha els diferents paràmetres per a la solució de cada variable, toleràncies per a aquestes variables (els residuals) i els paràmetres de l'algoritme principal, ja sigui el SIMPLE (per a un cas estacionari) o el PISO (per a un cas no estacionari). Tot i això a la carpeta del sistema també es poden trobar altres arxius, per exemple el *rotationDict* que es crea amb l'execució del programa *MakeAxialMesh*.

Al directori constant dins la subcarpeta *polyMesh* es poden trobar les propietats de la malla, definides per diferents arxius. Aquests arxius defineixen les cares, els punts, les condicions de contorn i les cel·les veïnes. Tots ells, excepte el

blockMeshDict, són creats per la funció *blockMesh* o l'importació des d'un altre programa, com per exemple des de Fluent.

A més a més dins de *constant* també es troben arxius que defineixen les propietats termofísiques (*thermophysicalProperties*) i les condicions de turbulència (*RASProperties*). N'hi pot haver més, com ara un que defineixi les propietats de transport, on es defineix la viscositat, però el nombre d'aquests variarà en funció del *solver* utilitzat.

Dins del cas, es troben els directoris de temps. Excepte el '0', que és el que dona les condicions inicials, els restant arxius amb valor numèric donaran les variables físiques del flux en cada punt de la geometria.

A la carpeta 0¹³ es defineixen les condicions inicials per a realitzar la simulació, que poden variar depenent del *solver*. Per exemple, en un *solver* anomenat *sonicFoam* només cal utilitzar pressió, temperatura i velocitat. Mentre que per utilitzar el *sonicTurbFoam*, també són necessàries *k* i *epsilon*.

Un cop inicialitzats els valors s'utilitza un *solver*, que és una aplicació d'OpenFOAM. Aquest pot ser un predefinit pel programa (*sonicTurbFoam*), o un de modificat a partir d'un dels anteriors (*sonicDynTimeTurbFoam*).

Tot i això, es podria crear un *solver* des del no res. Però la gran quantitat de *solvers* predefinitos i la simplicitat per modificar-los, fa que no sigui la opció més adequada. Ja que, haver d'escollir i escriure tots els processos, llibreries i variables que utilitzarà, és un procés complex.

En cas de voler implementar que la c_p variï en funció de la temperatura, l'OpenFOAM utilitza una opció anomenada *janafThermo*. Aquesta, necessita que se li afegixin valors de les taules de Janaf¹⁴ de 7 coeficients. Unes taules que contenen les principals propietats termodinàmiques i químiques de cada molècula com poden ser la c_p , l'entalpia o l'entropia.

En aquest projecte s'han utilitzat les dades extretes de la nova base de dades de la NASA amb format Fortran. Aquest nou format, amb nou coeficients, dona amb poques línees les propietats químiques i l'evolució amb la temperatura de la c_p , l'entalpia i l'entropia, mitjançant les següents fórmules:

$$C_p^o(T)/R = a_1 T^{-2} + a_2 T^{-1} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \quad (4.2)$$

$$H^o(T)/RT = a_1 T^{-2} + a_2 \frac{\ln T}{T} + a_3 + a_4 \frac{T}{2} + a_5 \frac{T^2}{3} + a_6 \frac{T^3}{4} + a_7 \frac{T^4}{5} + \frac{b_1}{T} \quad (4.3)$$

¹³ Veure annex 4, apartat 2.1.

¹⁴ Veure annex 4, apartat 2.4.

$$S^o(T)/R = -a_1 \frac{T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + a_5 \frac{T^2}{2} + a_6 \frac{T^3}{3} + a_7 \frac{T^4}{4} + b_2 \quad (4.4)$$

Com es pot comprovar, totes elles depenen d'unes constants $a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6$ i a_7 . I en el cas de l'entropia i l'entalpia, a més a més, hi ha un offset, b_1 i b_2 . Les dades es mostren d'aquesta manera.

Air	Mole%:N2 78.084,O2 20.9476,Ar .9365,CO2 .0319.Gordon,1982.Reac
2 g 9/95 N 1.5617O .41959AR.00937C .00032 .00000 0	28.9651159 -125.530
200.000 1000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0	8649.264
1.009950160D+04-1.968275610D+02 5.009155110D+00-5.761013730D-03	1.066859930D-05
-7.940297970D-09 2.185231910D-12	-1.767967310D+02-3.921504225D+00
1000.000 6000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0	8649.264
2.415214430D+05-1.257874600D+03 5.144558670D+00-2.138541790D-04	7.065227840D-08
-1.071483490D-11 6.577800150D-16	6.462263190D+03-8.147411905D+00

En aquesta taula la temperatura és partida en dos intervals: de 200 a 1000 i de 1000 a 6000. Cadascun dels quals consta de tres línees:

200.000	1000.0007	-2.0	-1.0	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	0.0	8649.264
1.009950160D+04-1.968275610D+02	5.009155110D+00-5.761013730D-03									
1.066859930D-05										
-7.940297970D-09	2.185231910D-12									-1.767967310D+02-3.921504225D+00

Tin	Tfin	exponents	H(298.15)-H(0)	
a1	a2	a3	a4	a5
a6	a7		b1	b2

En aquests en primer lloc hi ha la temperatura d'inici i la final. Després els exponents de l'equació de c_p/R , que sempre són els mateixos. L'últim valor de la primera fila és la diferència d'entalpies entre la temperatura ambient i 0 K. A part de les temperatures inicial i final, els valors de la segona i tercera fila són els realment importants per la configuració del programa.

La llibreria *janafThermo* utilitza la següent expressió per calcular c_p :

$$C_p = R(((a_4 T + a_3) \cdot T + a_2) \cdot T + a_1) \cdot T + a_0 \quad (4.5)$$

Per utilitzar aquesta opció (*janafthermo*) és necessari primerament modificar l'arxiu *janafThermol.H* per a què tingui en compte els set coeficients i no només cinc, utilitzant així l'equació 4.2. En segon lloc, cal donar-li dos intervals de temperatura, des de la mínima fins a una intermitja i des d'aquesta fins a la màxima. Això és degut a què en cadascun d'aquests intervals els coeficients seran diferents. Per tal que funcioni el *janafThermo* cal afegir les tres temperatures anteriorment citades, i els coeficients de c_p i les constants

d'integració de l'entropia i l'entalpia, per a cadascun dels intervals de temperatura.

Posades totes les dades necessàries, quan es simula el cas, aquest va creant carpetes amb el nom del instant de temps i al seu interior les dades dels valors de cada variable per a cada cel·la.

Mentre dura la simulació, es poden anar veient els resultats mitjançant el ParaView. El Paraview és una interfície gràfica que mostra la malla i els resultats obtinguts a la simulació, si n'hi ha, i permet aplicar eines de post-processat per tal de presentar els valors al gust del usuari.

Un factor a tenir ben en compte durant la simulació és el pas de temps variable. Per variar el nombre de *courant*, com s'ha vist en el cas del Fluent, es pot canviar la mida de la malla o el valor del *timestep*. A diferència del Fluent, aquí sí que interessa que durant les simulacions es mantingui sempre entre 0 i 1. Tanmateix, es pot donar el cas que amb un *timestep* continu el nombre de *courant* augmenti superant els límits desitjats:

Time = 0.017131		
Courant Number	mean: 5.84054e+38	max: 3.29039e+43

La millor opció per tal de solucionar-ho és variar el temps. Per tant s'haurà de modificarà el *controlDict*¹⁵ per a què la opció *adjustTimeStep* estigui activada. A més a més, caldrà especificar un nombre de *courant* màxim, com pot ser de 0'2.

<i>adjustTimeStep</i>	yes;
<i>maxCo</i>	0.2;

Però no tots els programes tenen implementat el codi necessari per a fer-ho. Com es veurà al següent apartat en el cas particular.

4.2.2.1. Cas particular

Obtinguda la malla mitjançant el *blockMesh*, el que cal fer és escriure en primer terme les condicions inicials a la carpeta 0, a cadascun dels contorns definits: a l'entrada i a la sortida els mateixos valors que hem vist al apartat de Fluent. L'eix axisimètric ha de definir-se com un pla de simetria (*simmetryPlane*), els *wedges*, anomenats per defecte *frontAndBackPlanes*, els costats virtuals de la falca, definits com a *wedges*, i, finalment, abans d'executar el *solver*, establir les condicions temporals de la simulació mitjançant el *controlDict*.

El *solver* que s'ha utilitzat ha estat el *sonicDynTimeTurbFoam*. Aquest no és un *solver* existent, sinó que s'ha creat a partir d'un altre anomenat *sonicTurbFoam*.

¹⁵ Veure annex 4, apartat 2.2.

Tanmateix, fent el mateix procediment que s'explicarà tot seguit, a partir del *sonicFoam* es pot crear també el *sonicDynTimeFoam*.

La diferència entre ambdós és que el que s'ha usat és per a règims transsònics/supersònics transitoris per a un flux turbulent de gas compressible. Mentre el segon és per a règims transsònics/supersònics transitoris d' un flux laminar de gas compressible.

En cap dels dos *solvers* existents hi ha l'opció dels increments de temps variable. És per això que s'ha hagut de canviar el codi per tal d'obtenir-lo. Per fer-ho ha de modificar-se l'arxiu *.C* i el *files*. Al primer arxiu hi ha les instruccions que utilitza el *solver* i al segon s'especifica el nom i la direcció d'aquest per tal d'usar-lo.

Per tant, per fer que el temps sigui variable només cal afegir-hi uns *includes*¹⁶ al codi ('arxiu'.C) que fan que el programa utilitzi aquesta funció. I per a poder utilitzar-lo com si d'un nou *solver* es tractés, cal modificar l'arxiu *files* canviant-li el nom i la direcció on es busca. Un cop fet això es crea i s'actualitza la *bash*, que és un fitxer del Linux que permet executar les aplicacions des de qualsevol carpeta, creant rutes directes al directori on es troba.

Com a resultat, quan s'utilitza un *solver* amb el temps compressible, se li afegeix a les dades donades el *deltaT*, ja que no és el valor constant que s'havia especificat en el cas d'un *timestep* constant.

```
Time = 0.0207465
Courant Number mean: 0.00664276 max: 0.200039
deltaT = 2.4062e-07
```

¹⁶ Veure annex 4, apartat 2.3.

4.3. Comparativa

Un cop vist el funcionament bàsic d'ambdós programaris i la seva aplicació pel que fa als casos particulars, es poden treure vèries conclusions. En quant a la geometria i mallat, tot i que l'OpenFOAM permet fer-les des de zero mitjançant el *blockMeshDict* és molt més pràctic, ràpid i visual, importar-les des de Gambit/Fluent. A més a més, la utilització del ACAD 2008 per fer la geometria estalvia temps a l'hora de definir els punts, ja que amb menys punts permet fer, per exemple, una *spline* més semblant a la desitjada que no pas amb el *blockMeshDict*.

S'ha de tenir en compte que, com s'ha explicat abans, una geometria en OpenFOAM ha de ser sempre en 3D. Per corregir els problemes de compatibilitat que sorgeixen a l'hora d'importar una malla axisimètrica des de Fluent cal rotar una de les seves cares per tal que adapti la forma de falca. Si no es fa, OpenFOAM el converteix en un objecte d'amplada unitària impeding la seva correcta simulació pel cas buscat.

En el moment de mallar, el problema torna a ser semblant al de la geometria pel que fa a l'OpenFOAM. El no poder previsualitzar la malla, fa que sigui necessari crear una geometria nova cada vegada que es vulgui modificar.

A l'hora de simular, amb el Fluent hi ha la opció de visualitzar els resultats per cada iteració o *time step* amb la funció *animation*, mentre amb l'OpenFOAM es pot visualitzar a través del Paraview. La diferència és que mentre el Fluent les deixa visualitzar en temps real, OpenFOAM a través de Paraview tan sols permet la visualització dels instants de temps previs a l'execució de l'aplicació.

Una altra diferència bàsica es troba a l'hora de canviar de *solver*. A l'OpenFOAM aquest fet comporta posar arxius diferents i modificar-los, mentre que al Fluent el canvi de *solver* produeix un canvi automàtic de les opcions vàlides a la interfície. Facilitant la feina a l'usuari. A més a més, OpenFOAM a diferència del Fluent no proposa valors orientatius per les condicions donades. I han d'ésser calculats o bé estimats a partir de tutorials semblants.

Tots dos programaris ofereixen la possibilitat de cercar la solució en forma estacionària o no estacionària. Per fer això utilitzen els algoritmes SIMPLE i PISO, pel cas estacionari i no estacionari respectivament.

Finalment cal dir que tant Fluent com OpenFOAM segueixen un esquema ben definit i semblant a l'hora de preparar el cas per a ser simulat.

CAPÍTOL 5. ANÀLISI DELS RESULTATS

En la primera part d'aquest capítol s'exposen primerament els resultats de les simulacions dutes a terme amb la primera i la tercera tovera, ambdós còniques. El flux s'ha analitzat mitjançant Fluent, en aquest cas aire, amb un calor específic (c_p) de valor constant i estàndard: $\gamma=1,4$. Tot seguit s'han comparat els valors resultants respecte els teòrics del flux isentròpic, i s'ha comprovat la influència de la conductivitat tèrmica i de tenir un calor específic variable. En els resultats simulats, per a un cas estacionari, s'ha optat per posar el valor límit assolit localment a la sortida del flux, així com el seu valor mig al llarg de la seva àrea de sortida. A més a més, s'ha calculat l'empenta que generaria la tovera amb el seu respectiu impuls específic.

Vistos els diferents casos, s'ha comparat la diferència de resultats entre la primera i la tercera tovera per a un cas no estacionari respecte l'estacionari. Per a fer la comparativa només s'ha usat el cas en què es considera la c_p i la conductivitat tèrmica variables, ja que es considera que és el que més s'apropa a la realitat, i per tant el més interessant d'analitzar.

En segon lloc s'ha avaluat quina de les dues formes de tovera dona millors prestacions, si la tercera tovera en forma cònica o la sisena en forma de campana. Sabent d'antuvi que la forma de campana s'aproxima més a la forma ideal per a l'expansió del flux. També s'ha realitzat a partir del cas amb c_p i conductivitat tèrmica variable, per les raons exposades a l'anterior paràgraf.

En tercer lloc es presenten els resultats obtinguts per la cinquena tovera, feta íntegrament amb OpenFOAM, considerant el flux isentròpic amb c_p i conductivitat tèrmica amb valors constants.

I per acabar, s'ha analitzat una mateixa tovera, la tercera, amb Fluent i OpenFOAM i s'han contrastat les diferències sorgides.

A les taules en què només s'ha posat un valor, aquest ha estat el valor mig. I a totes les simulacions realitzades a les diferents toveres s'han considerat les següents condicions de contorn: 115 bars d'entrada, una temperatura inicial de 2.545 K i una densitat inicial de 15,74 kg/m³.

5.1. Fluent

5.1.1. Tovera n^o1

Taula 5.1. Resultats teòrics del flux isentròpic amb $\gamma=1,4$

Tovera n ^o 1	Model isentròpic	
Mach	5,6790	
P _{sortida}	10.188 Pa	
Densitat _{sortida}	0,1039 kg/m ³	
T _{sortida}	341,59 K	
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	867.813N	1.101.428N
I _{sp}	173s	219s

5.1.1.1. Cas 1

Taula 5.2. Resultats simulats considerant la c_p i la conductivitat tèrmica constant

Tovera n ^o 1	Cas 1	
	Valor límit	Valor Mig
Mach	5,5475	5,3165
P _{sortida}	9910 Pa	12.045 Pa
Densitat _{sortida}	0.0671 kg/m ³	0.1135 kg/m ³
T _{sortida}	354.06 K	433,63 K
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	801.381N	1.035.138N
I _{sp}	159s	206s

Com es pot comprovar, tot hi haver-hi diferències significatives pel que fa als valors de pressió (+15%) i sobretot temperatura (+20%), la influència en el impuls específic es veu reduïda a una diferència del 10%. Així com l'empenta del coet, que es manté en valors similars al del I_{sp}. S'ha de dir, però, que si es mira el límit màxim d'expansió, i no pas la mitjana dels valors a la sortida, la diferència es veu dràsticament reduïda en totes les propietats excepte la densitat. Cal destacar la pèrdua d'un 23% d'empenta en la tovera a l'atmosfera respecte al buit.

5.1.1.2. Cas 2

Taula 5.3. Resultats simulats considerant la conductivitat tèrmica en funció de la temperatura

Tovera nº1	Cas 2	
	Valor límit	Valor Mig
Mach	5,5431	5,3025
P _{sortida}	9.840 Pa	12.369 Pa
Densitat _{sortida}	0,0650 kg/m ³	0,1131 kg/m ³
T _{sortida}	354,89 K	548,91 K
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	800.026 N	1.033.782 N
I _{sp}	159 s	206 s

La inclusió de la conductivitat tèrmica afecta d'una manera ben notòria la temperatura del fluid. Fent-lo augmentar 125K. La resta de paràmetres es mantenen pràcticament invariables, amb variacions menors al 3% respecte el cas 1. D'altra banda, els valors límits tampoc varien gaire, en aquest cas ni tan sols la temperatura.

5.1.1.3. Cas 3

Taula 5.4. Resultats simulats considerant la conductivitat tèrmica i la c_p en funció de la temperatura

Tovera nº1	Cas 3	
	Valor límit	Valor Mig
Mach	4,9578	4,7889
P _{sortida}	12.762 Pa	15.478 Pa
Densitat _{sortida}	0,0642 kg/m ³	0,1003 kg/m ³
T _{sortida}	520,93 K	715,27 K
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	837.036 N	1.070.793 N
I _{sp}	175 s	223 s

Implementant una c_p variable en funció de la temperatura, es pot comprovar com tots els valors es veuen significativament afectats. La variació de la c_p , comporta que la temperatura final es vegi augmentada encara més, degut a què hi ha una major interacció entre les molècules. Aquest augment fa augmentar la seva pressió i la velocitat a la qual un flux es considera sònic. Per tant el Mach del fluid es veu disminuït.

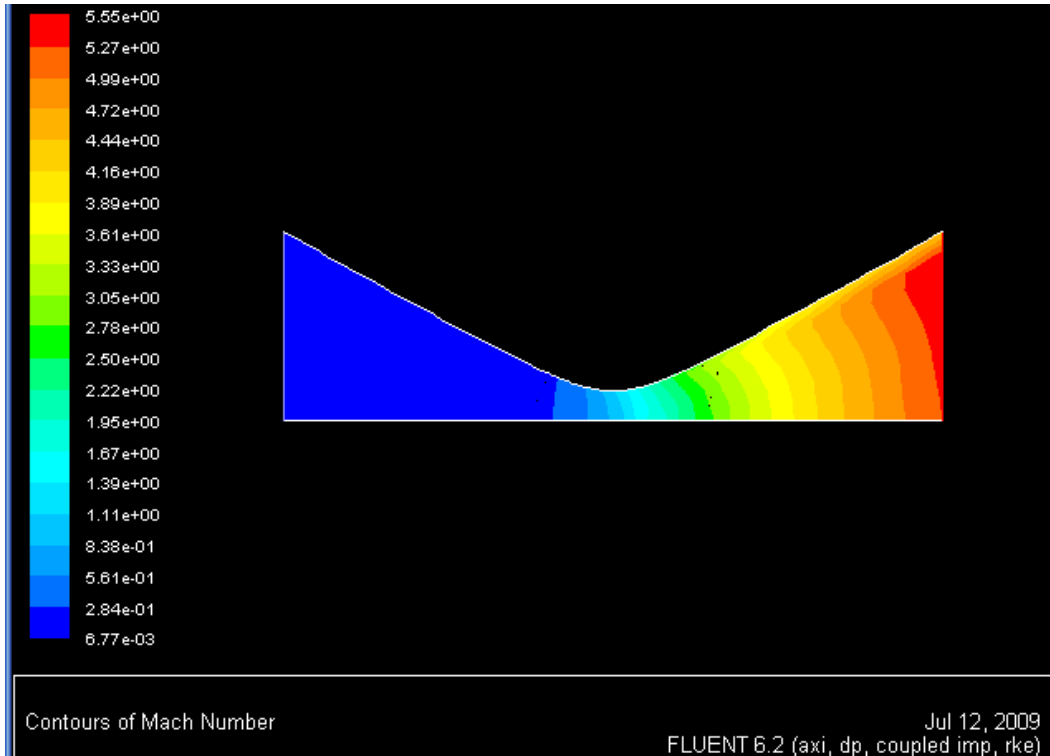


Fig. 5.1. El Mach per la tovera n°1 cas 1

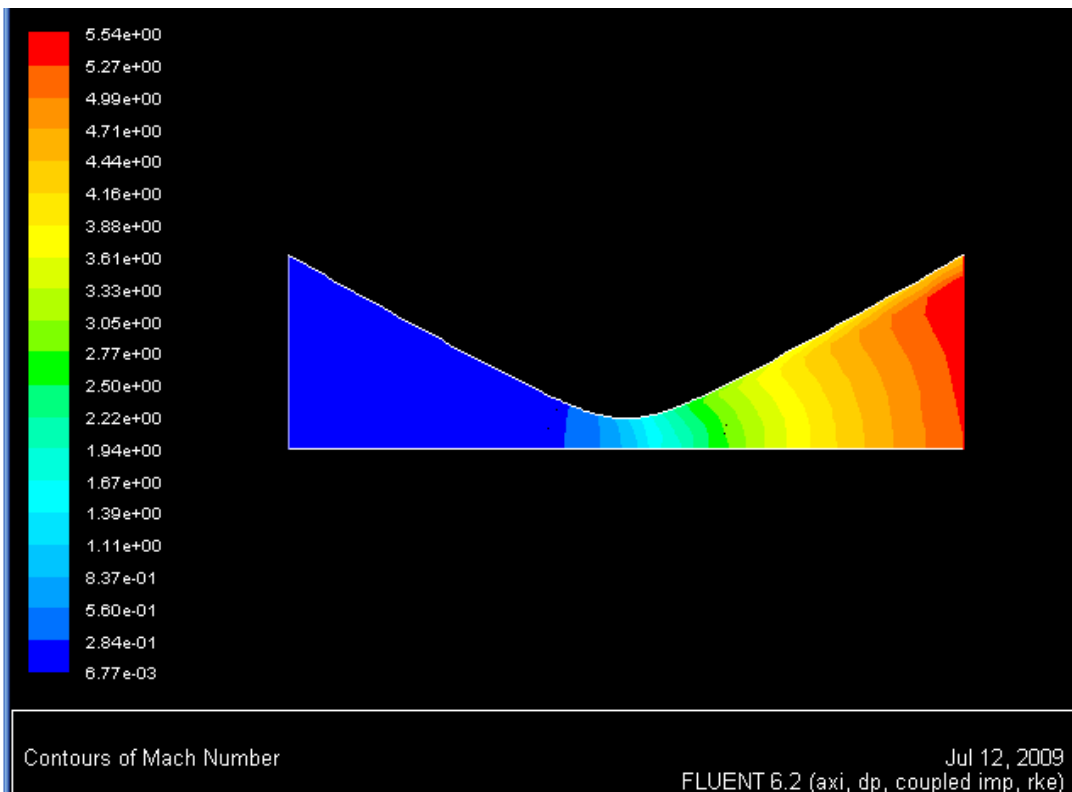


Fig. 5.2. El Mach per la tovera n°1 cas 2

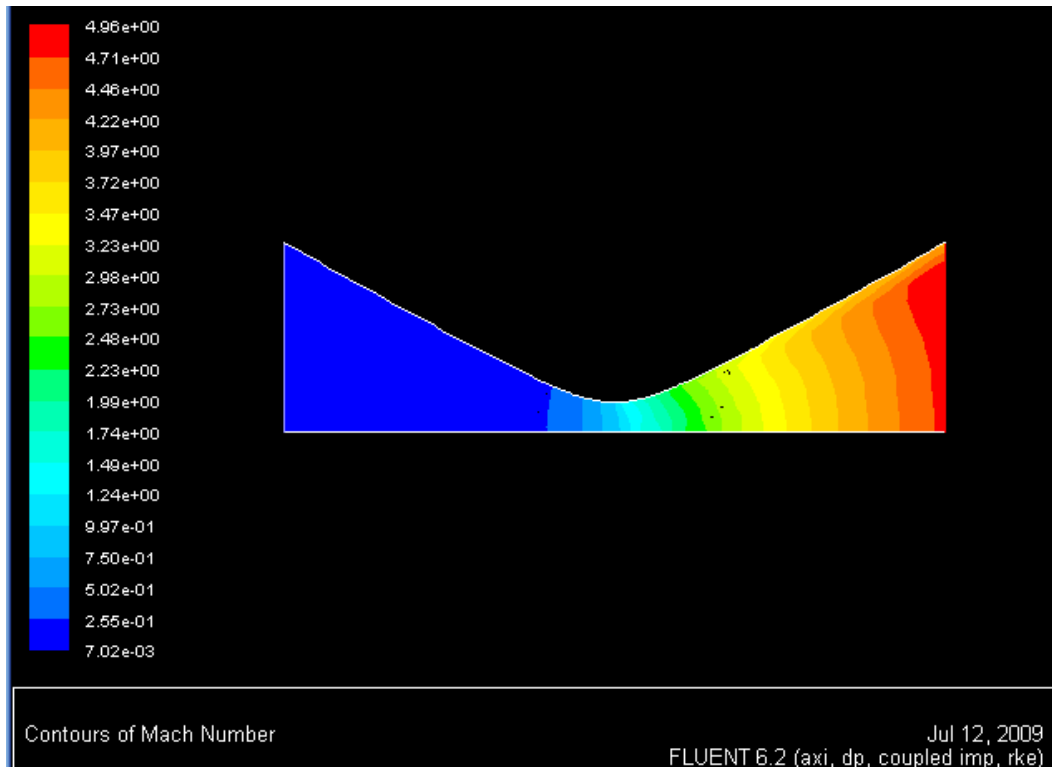


Fig. 5.3. El Mach per la tovera n^o1 cas 3

5.1.2. Tovera n^o3

Taula 5.5. Resultats teòrics del flux isentròpic amb $\gamma=1,4$

Tovera n ^o 3	Model isentròpic	
Mach	6,1301	
P _{sortida}	6.381 Pa	
Densitat _{sortida}	0,0743 kg/m ³	
T _{sortida}	298,85K	
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	783.322 N	1.106.448 N
I _{sp}	158 s	223 s

5.1.2.1. Cas 1

Taula 5.6. Resultats simulats considerant la c_p i la conductivitat tèrmica constant

Tovera nº3	Cas 1	
	Valor límit	Valor Mig
Mach	6,0776	5,7642
P_{sortida}	6.265 Pa	7.572 Pa
Densitat $_{\text{sortida}}$	0,0271 kg/m ³	0,0800 kg/m ³
T_{sortida}	303K	358,30 K
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	745.590 N	1.068.961 N
I_{sp}	150 s	215 s

Com es pot veure també a les taules anteriors, tots els valors teòrics s'aproximen a les propietats del flux al observar els valors límits, excepte la densitat. La diferència de pressió és d'un 16% i la de la temperatura d'un 17%. Tot i que els valors mitjans varien molt respecte el valors teòrics, l'empenta del coet i l' I_{sp} varien només al voltant d'un 5%.

5.1.2.2. Cas 2

Taula 5.7. Resultats simulats considerant la c_p en funció de la temperatura

Tovera nº3	Cas 2	
	Valor límit	Valor Mig
Mach	5,4323	5,1857
P_{sortida}	8.194 Pa	9.754 Pa
Densitat $_{\text{sortida}}$	0,0286 kg/m ³	0,0707 kg/m ³
T_{sortida}	445,81K	509,17 K
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	785.331 N	1.108.702 N
I_{sp}	166 s	234 s

Com s'ha vist anteriorment, la inclusió de la c_p en funció de la temperatura ha comportat un canvi substancial en les prestacions del coet doncs el Mach ha disminuït un 11%. Tot i això l'impuls específic s'ha vist augmentat un 8%, degut a què el flux màssic disminueix al augmentar la velocitat i disminuir-se la densitat. El fet de què la Mach disminueixi és degut a què la temperatura ha augmentat molt.

5.1.2.3. Cas 3

Taula 5.8. Resultats simulats considerant la c_p i la conductivitat tèrmica en funció de la temperatura

Tovera nº3	Cas 3	
	Valor límit	Valor Mig
Mach	5,4271	5,1892
P_{sortida}	8.208 Pa	9.754 Pa
Densitat $_{\text{sortida}}$	0,0286 kg/m ³	0,0707 kg/m ³
T_{sortida}	447,64K	553 K
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	785.233 N	1.108.604 N
I_{sp}	166 s	234 s

La variació de la conductivitat tèrmica, com s'havia vist anteriorment, no ha influït més que en un augment de quasi 2 K a la temperatura límit. La seva inclusió ha comportat un augment de la temperatura mitjana del flux.

Com s'ha vist amb l'anterior tovera, els contorns del Mach són molt semblants, per tant només s'adjunta la del tercer cas.

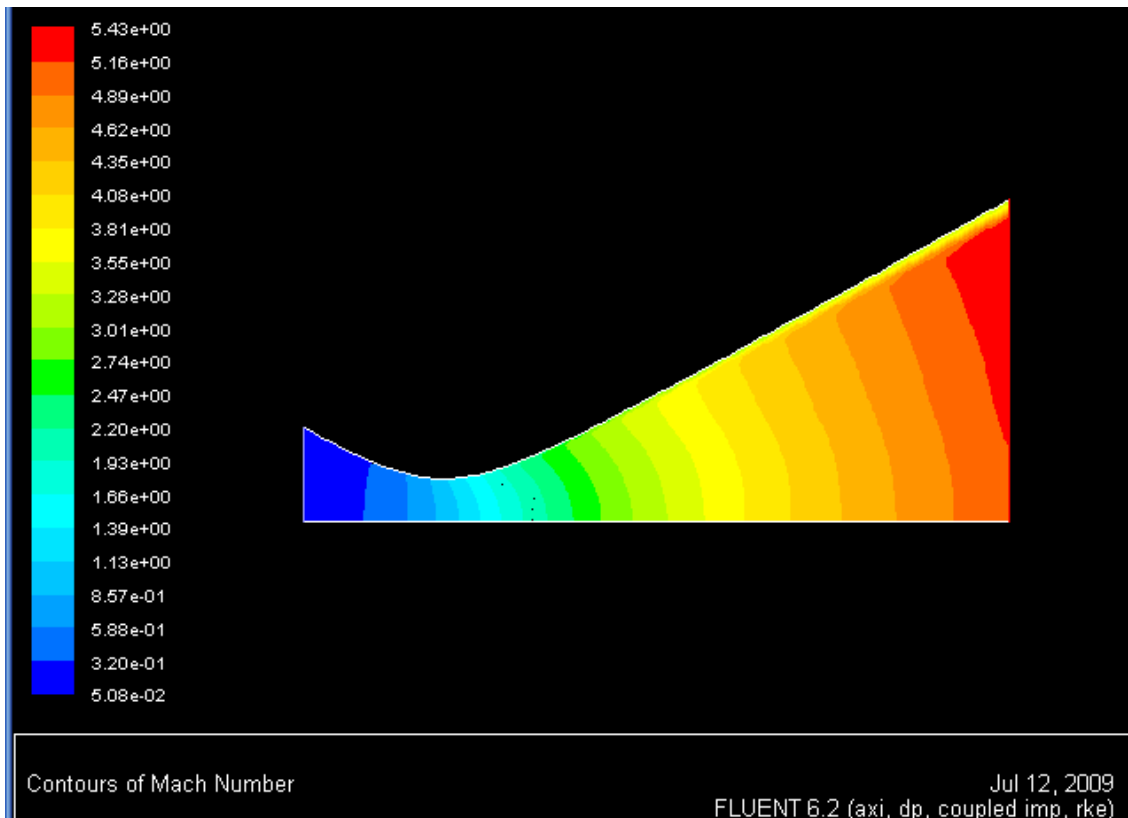


Fig. 5.4. El Mach de la tovera nº3 cas 3

5.1.2. Estacionari vs no estacionari

Les solucions obtingudes fins ara eren considerant el flux estacionari. Per tant s'ha agafat de nou la primera i la tercera tovera i s'ha buscat la solució no estacionària per al cas 3 per comprovar si hi havia diferència amb els valors obtinguts en la solució estacionària. El cas no estacionari és un cas més aproximat a la realitat, i és per això que es vol observar com les oscil·lacions temporals de les propietats del flux tendeixen als mateixos resultats que en el cas estacionari, considerat ideal.

Taula 5.9. Resultats simulats considerant la conductivitat tèrmica i la c_p en funció de la temperatura

Tovera n°1	No estacionari		Estacionari	
Mach	4.7642		4,7889	
P_{sortida}	15.342 Pa		15.478 Pa	
Densitat $_{\text{sortida}}$	0.0977 kg/ m ³		0,1003 kg/m ³	
T_{sortida}	714,15 K		715,27 K	
	Pa=1atm	Al buit	Pa=1atm	Al buit
Empenta	791.340 N	1.025.097 N	837.036 N	1.070.793 N
I_{sp}	171 s	222 s	175 s	223 s

Taula 5.10. Resultats simulats considerant la conductivitat tèrmica i la c_p en funció de la temperatura

Tovera n°3	No estacionari		Estacionari	
Mach	5,1978		5,1892	
P_{sortida}	9.633 Pa		9.754 Pa	
Densitat $_{\text{sortida}}$	0,0707 kg/ m ³		0,0707 kg/m ³	
T_{sortida}	548,12 K		553 K	
	Pa=1atm	Al buit	Pa=1atm	Al buit
Empenta	784.981 N	1.108.352 N	785.233 N	1.108.604 N
I_{sp}	165 s	234 s	166 s	234 s

Els resultats obtinguts per ambdós tractaments temporals del flux són semblants en les dues toveres, sobretot en la tovera n°3. La diferència màxima es troba en l'empenta de la primera tovera, que és d'un 5,5%. Així doncs, la utilització d'un o altre mètode es considera que no té una importància rellevant de cara als resultats finals.

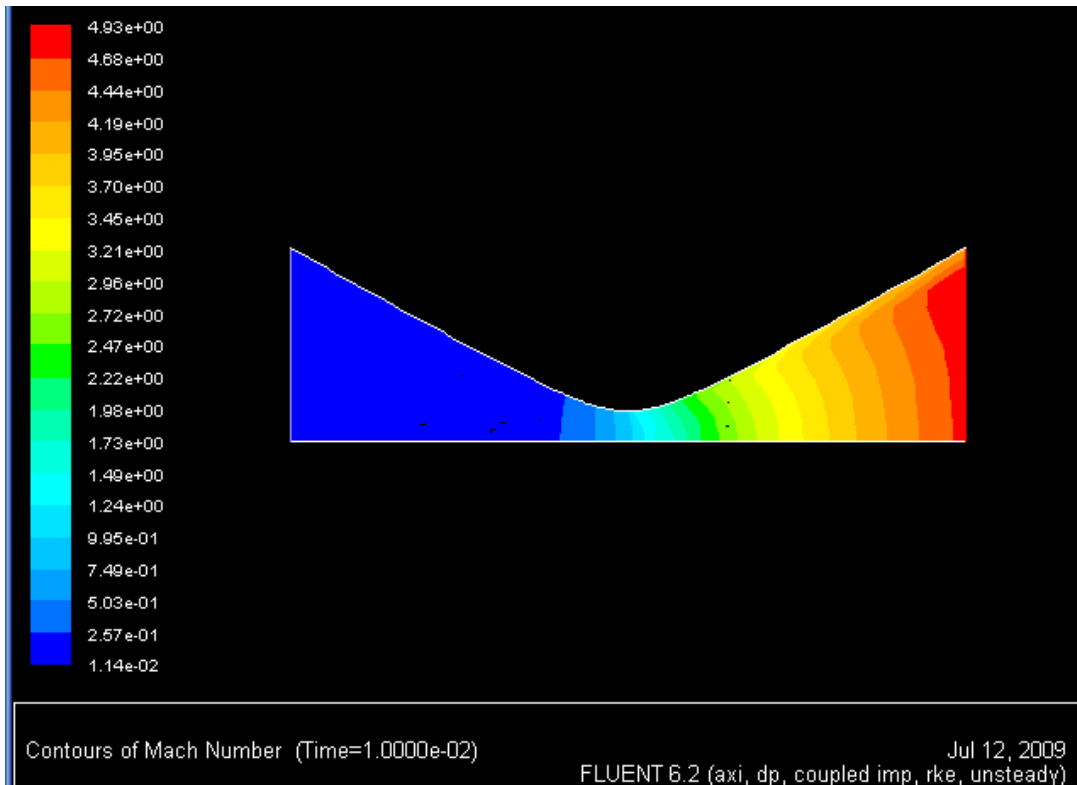


Fig. 5.5. El Mach de la tovera n°1 en no estacionari

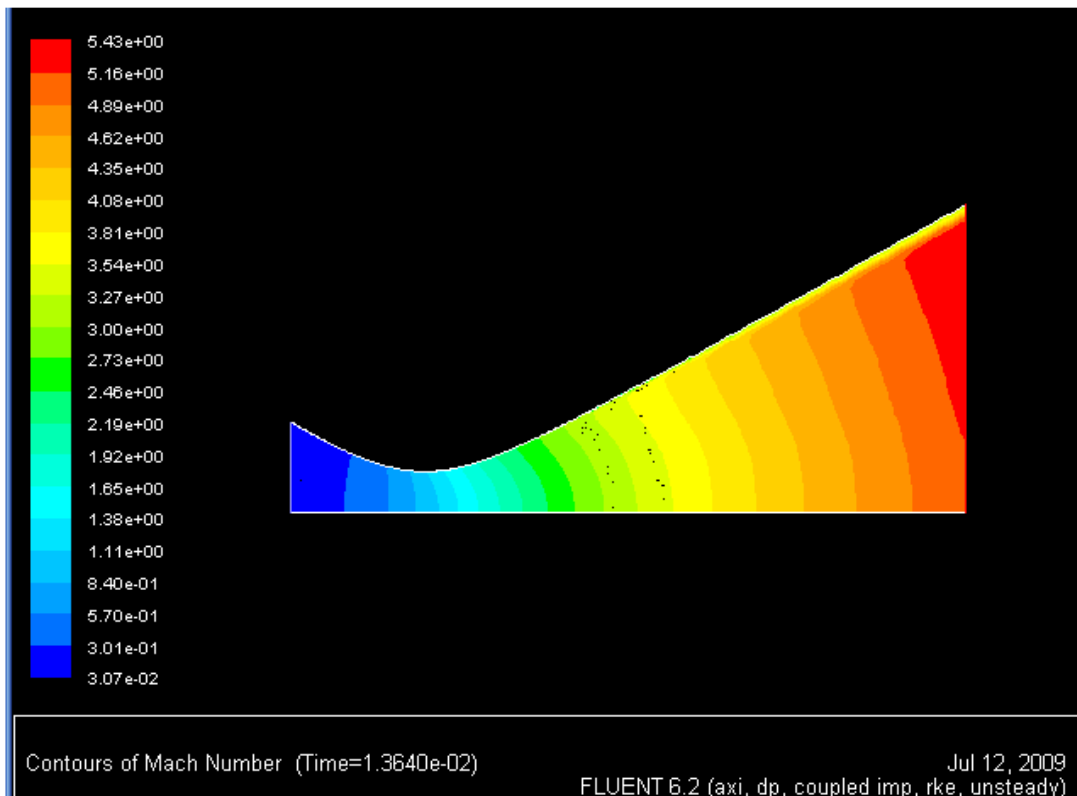


Fig. 5.6. El Mach de la tovera n° 3 en no estacionari

5.2. Campana vers Cònica

La sisena tovera, que representa una millora de la tercera, ha estat simulada considerant el flux no estacionari i els seus resultats han estat comparats amb la tercera tovera.

Taula 5.11. Resultats simulats considerant la conductivitat tèrmica i la c_p en funció de la temperatura

	Tovera n°6		Tovera n°3	
	Valor límit	Valor mig	Valor límit	Valor mig
Mach	6.207	5,7543	5.4272	5,1978
P_{sortida}	3365 Pa	11.718 Pa	8186 Pa	9.633 Pa
Densitat $_{\text{sortida}}$	0.0365 kg/ m ³	0,0676 kg/ m ³	0.0282 kg/ m ³	0,0707 kg/ m ³
T_{sortida}	352.37 K	433,92 K	448.12 K	548,12 K
	Pa=1atm	Al buit	Pa=1atm	Al buit
Empenta	843.524 N	1.191.980 N	784.981 N	1.108.352 N
I_{sp}	172 s	242 s	165 s	234 s

Aquí es pot veure un cas que s'ha volgut estudiar des del principi com un objectiu principal del projecte: la diferència en l'expansió del flux d'una tovera cònica (n°3) vers una de campana (n°6). Veient la taula, es pot comprovar que la tovera amb forma de campana és més eficient a l'hora d'expandir el flux. Aconseguint uns valors límit de pressió i temperatura de sortida menors, fent que el flux assoleixi un Mach més alt.

Tot i això, al comparar els valors mitjos s'aprecia un augment de la temperatura d'entre 80 i 100 K entre ambdós toveres. Aquest augment comporta una reducció del valor mig del Mach. Cal destacar que la diferència entre el valor mig i el límit en la tovera n°6 és, en el cas de la pressió, molt elevada. Tanmateix, pot ser possible ja que tots els valors límit són locals.

El Mach, l'empenta i l'impuls específic són majors en la tovera n°6: un 9%, un 7% i un 4% respectivament. Tot i que els valors de pressió i temperatura, difereixen bastant entre ambdós toveres, els altres valors de l'empenta i l'impuls específic es mantenen similars.

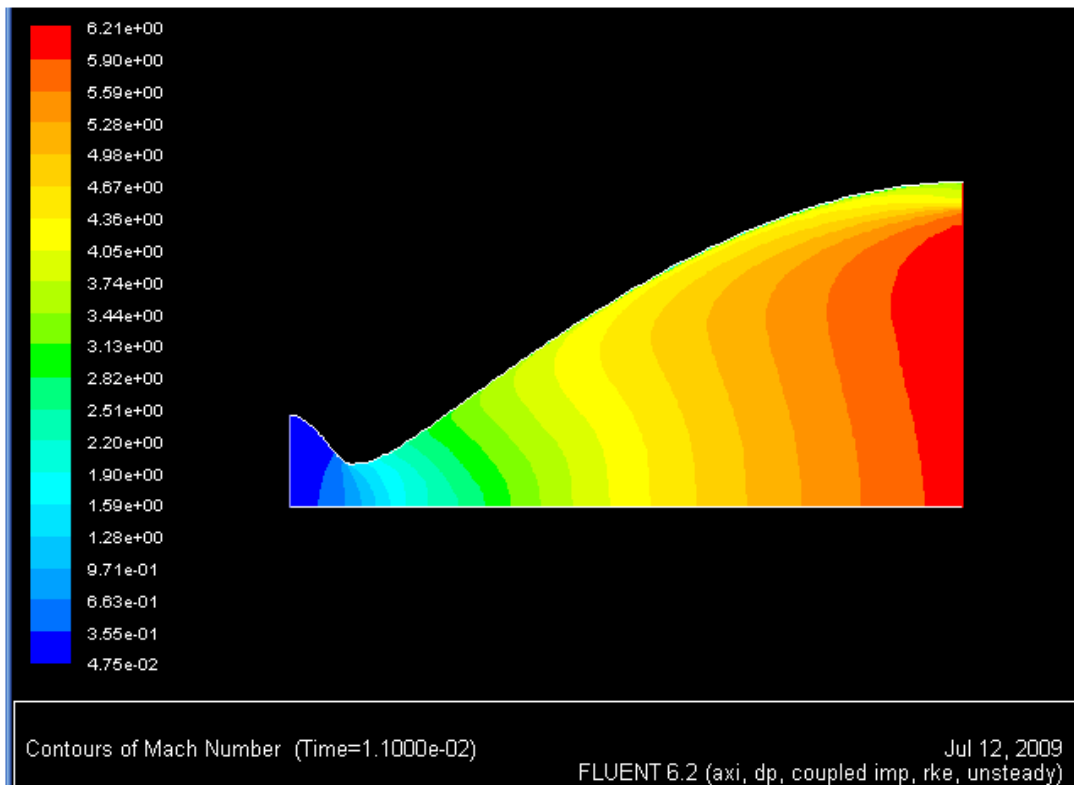


Fig. 5.7. El Mach de la tovera n° 6

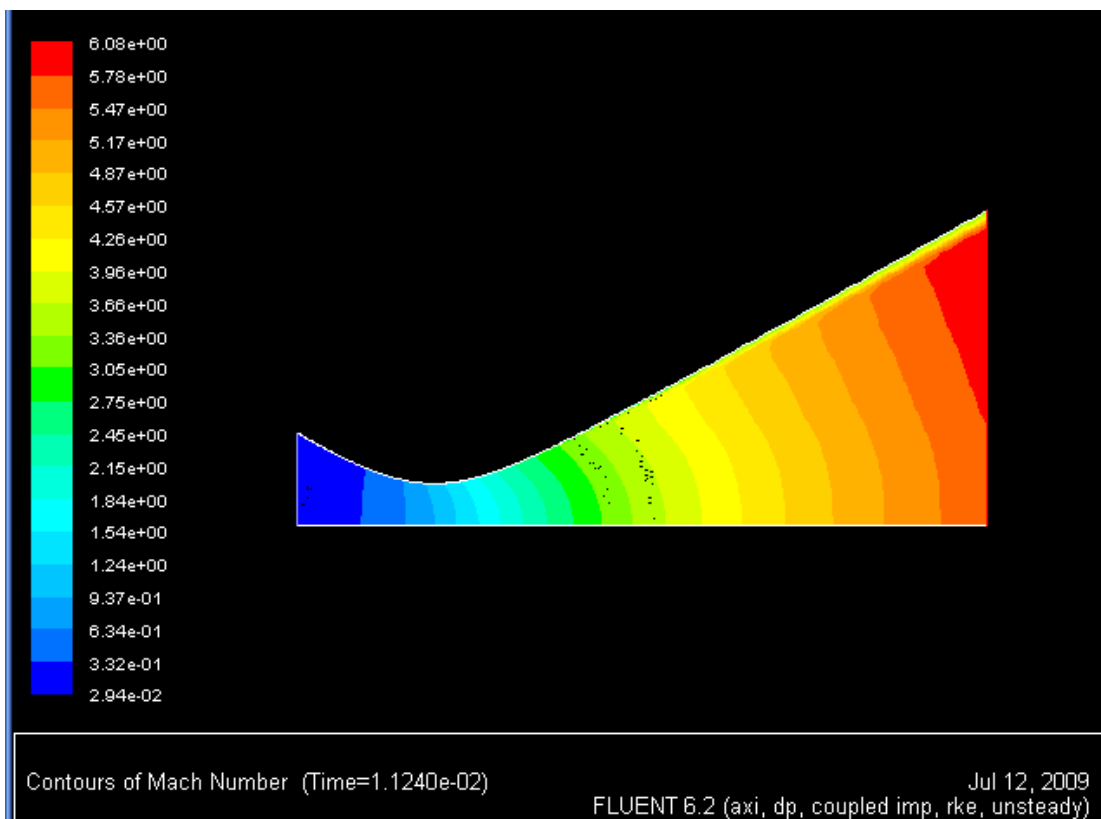


Fig. 5.8. El Mach de la tovera n° 3

5.3. OpenFOAM

La cinquena tovera ha estat feta íntegrament amb OpenFOAM, i s'han comparat els valors teòrics del flux isentròpic amb els obtinguts de la seva simulació considerant la c_p i la conductivitat tèrmica constants.

Taula 5.12. Resultats teòrics del flux isentròpic amb $\gamma=1,4$

Tovera nº5	Model isentròpic	
Mach	3,56	
P_{sortida}	137.311 Pa	
T_{sortida}	718,22 K	
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	231.666 N	598.867 N
I_{sp}	447 s	1.155 s

Taula 5.13. Resultats simulats considerant el model isentròpic amb c_p i la conductivitat tèrmica constants

Tovera nº5	Model $C_p=\text{const.}$	
Mach	3,227	
P_{sortida}	133.361 Pa	
T_{sortida}	843,33 K	
	Pa=1atm	Al buit
Empenta	217.215 N	584.417 N
I_{sp}	418 s	1.127 s

Observant les taules, es pot veure com la diferència més gran entre valors es produeix amb la temperatura (15%), seguida de la Mach (10%). La pressió es manté molt semblant (< 3%), i la diferència amb l'empenta proporcionada i l'impuls específic assolit és d'un 6%. El que més sobta, havent vist els valors de les toveres anteriors, és el gran impuls específic que aquesta configuració aconsegueix.

La diferència es deu a què el flux màssic és entre 9 i 10 vegades més petit. Per tant, tot i que l'empenta que assoleix és unes quatre vegades inferior, pot assolir un major temps d'impulsió. Tanmateix, aquest no es considera un valor real, ja que el màxim impuls que un endoreactor químic ha assolit mai són 500s.

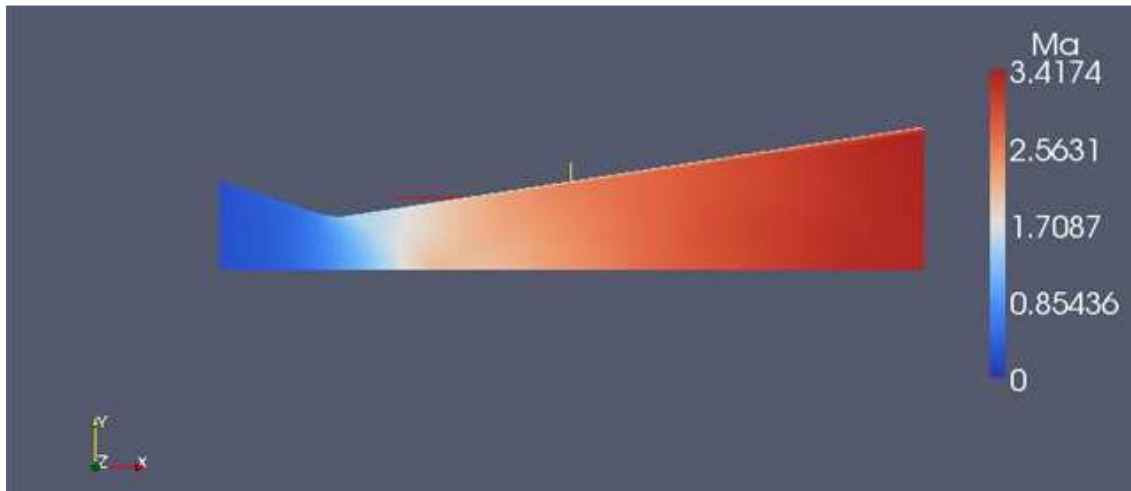


Fig. 5.9. El Mach de la tovera n°5

5.4. Fluent vs OpenFOAM

S'ha simulat a més una tovera idèntica, en aquest cas la tercera, amb Fluent i OpenFOAM per veure la diferència de resultats entre ambdós programaris. S'ha avaluat el cas no estacionari, ja que com s'ha comprovat anteriorment no hi ha diferències apreciables entre els dos tipus d'anàlisi temporal.

Taula 5.14. Resultats simulats considerant el model isentròpic.

Tovera n°3	No estacionari			
	Fluent		OpenFOAM	
Mach	5,4272		5,8321	
P _{sortida}	7.531 Pa		6.700 Pa	
T _{sortida}	355,93 K		370.65 K	
	Pa=1atm	Al buit	Pa=1atm	Al buit
Empenta	745.714 N	1.069.085 N	747.106 N	1.107.558 N
Isp	150 s	215 s	152 s	225 s

A primera vista es pot comprovar que els valors d'ambdós casos difereixen. Sobretot en els valor de la pressió. Però pel que fa a l'empenta i l'impuls específic són molt semblants.

Considerant que es tracta de la mateixa malla i havent estat simulades amb les mateixes condicions de contorn, es considera que les diferències poden ser degudes per:

- El tractament de la malla: ja que en el cas de Fluent es simula una superfície plana amb simetria axial. Mentre que l'OpenFOAM, com hem vist al llarg del treball, utilitza una falca de 5°.

- El *solver* emprat: tot i que tant l'un com l'altre es basen en la densitat per a fer els càlculs, les toleràncies utilitzades i els mètodes de linealització són diferents.

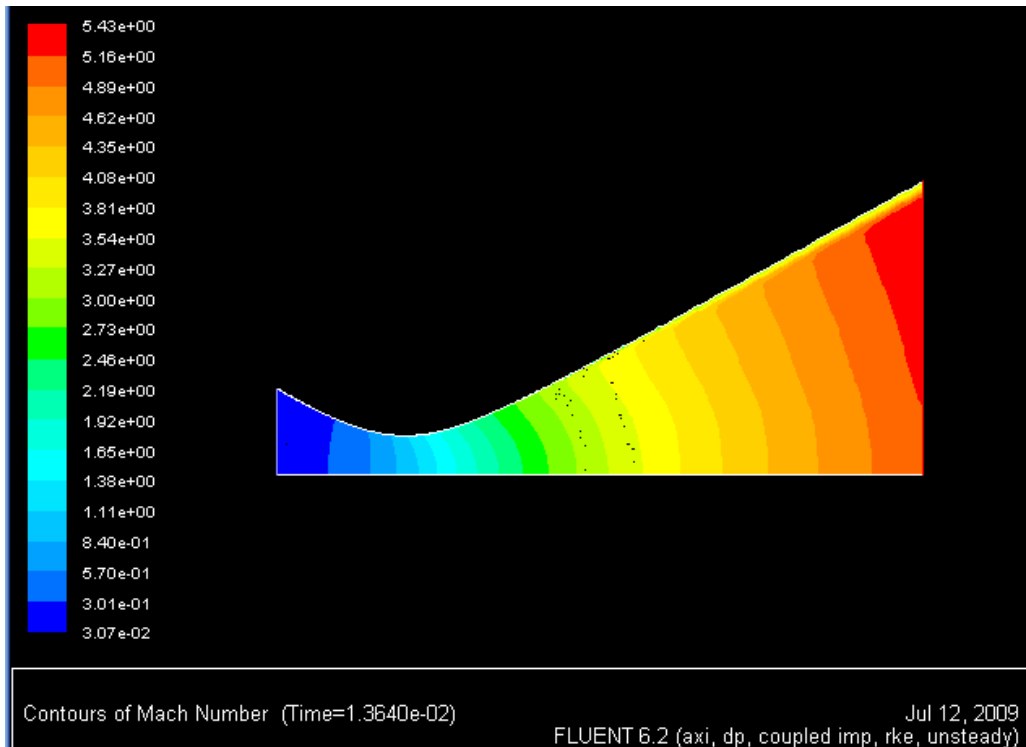


Fig. 5.10.. El Mach de la tovera en Fluent

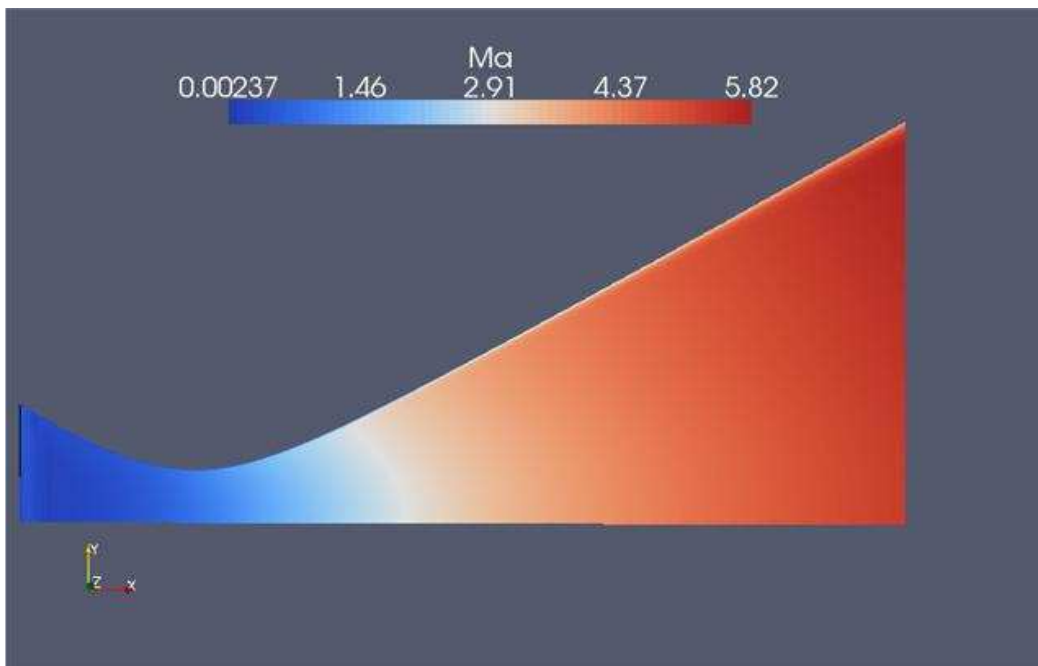


Fig.5.11. El Mach de la tovera en OpenFOAM

CAPÍTOL 6. DISSOCIACIÓ DE LES MOLÈCULES

Fins ara el que s'ha vist ha estat el model del flux que passa a través d'una tovera sense reaccions químiques. Però en un cas real, aquest model a altes temperatures és molt més complex i es produeixen dissociacions i recombinacions de les molècules. Tot i que per a l'estudi s'ha utilitzat aire, els motor coet bipropel·lents, per exemple, fan la combustió mitjançant un oxidant i fuel, com poden ser oxigen i hidrogen respectivament. Els reactius s'escalfen al llarg de la cambra de combustió i són expulsats, recombinant-se, a altes temperatures a través de la tovera, on assoleixen la velocitat supersònica. D'aquesta manera, no es pot considerar el flux com a caloríficament perfecte (tot i que tampoc en el cas que només s'ejectés aire). I això comporta que el valor de la constant adiabàtica gamma, o altrament dita, índex d'expansió, deixi de ser un valor constant i variï en funció de la temperatura en cada punt del flux de la tovera.

6.1. La influència del calor específic en les reaccions

A la següent taula per a l'aire sec, es pot veure com el canvi del valor de gamma és significatiu a altes temperatures. Només cal fixar-se en el salt que hi ha dels 1.000 als 2.000°C.

Taula 1.1. Valors de gamma respecte la Temperatura per l'aire sec

T	gamma
0°C	1,403
20°C	1,400
100°C	1,401
200°C	1,398
400°C	1,393
1.000°C	1,365
2.000°C	1,088

La c_v és constant i té un valor de $5/2R$ quan les molècules només tenen energia translacional i rotacional, i considerem negligibles l'energia vibracional i electromagnètica, que és l'últim estadi que s'assoleix.

Si s'observa la fig.6.1 es veu com la gamma i la temperatura van associades a l'hora de determinar l'energia de les molècules diatòmiques, com ho són l'hidrogen i l'oxigen.

Fins a 600 K només hi ha energia per a provocar un moviment translacional i rotacional. A mesura que s'augmenta la temperatura, es va activant el moviment vibracional. I serà quan aquest arribi al límit de la seva capacitat, i sigui molt intens, quan s'entrarà a la fase en què les molècules poden començar a dissociar-se .

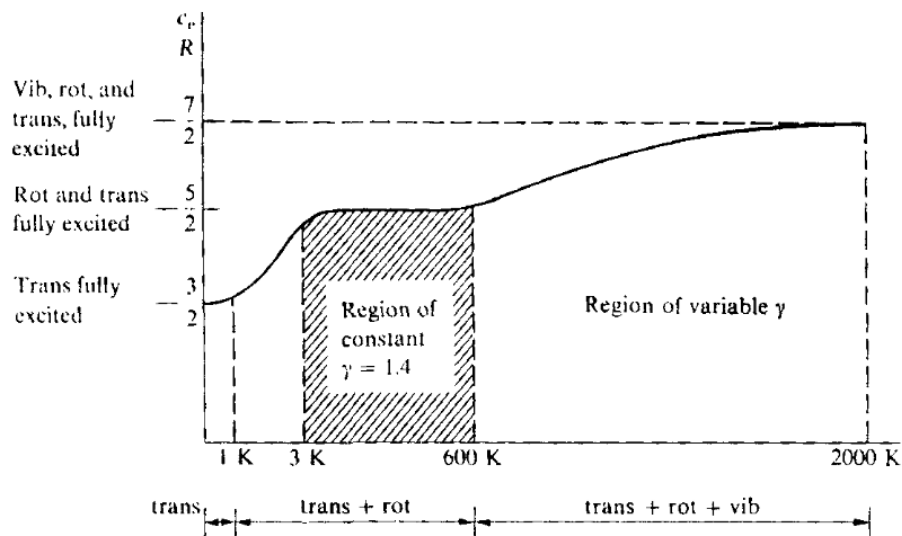


Figura 6.1. Variació de la c_v per a un gas diatòmic

6.2. Dissociació

Si un imaginés tenir una massa d'aire, es trobaria que a *grosso modo*, per cada mol d'aire n'hi ha, a temperatura i pressió ambient, 0.8 de Nitrogen i 0.2 d'oxigen. Si mantenint la pressió constant comença a augmentar la temperatura del gas, es pot observar com ràpidament hi ha un decreixement de la fracció molar d'ambdues molècules, i això passa perquè tant el nitrogen com l'oxigen assoleixen ràpidament el màxim d'energia vibracional i comencen a dissociar-se.

Es calcula que l'oxigen comença a dissociar-se per sobre els 2.000 K i que als 4.000 K ja està completament dissociat.

El nitrogen per la seva banda comença a dissociar-se en nitrogen monoatòmic per sobre els 4.000 K, i no és fins als 9.000 K que es considera completament dissociat.

Com es pot veure a la figura 6.2, per sota dels 4.000 K, el nitrogen dissociat tendeix a agrupar-se amb l'oxigen per formar òxid de nitrogen, que apareix durant un interval que va dels 2.000 als 6.000 K, amb un màxim de fracció molar pels 3.500 K.

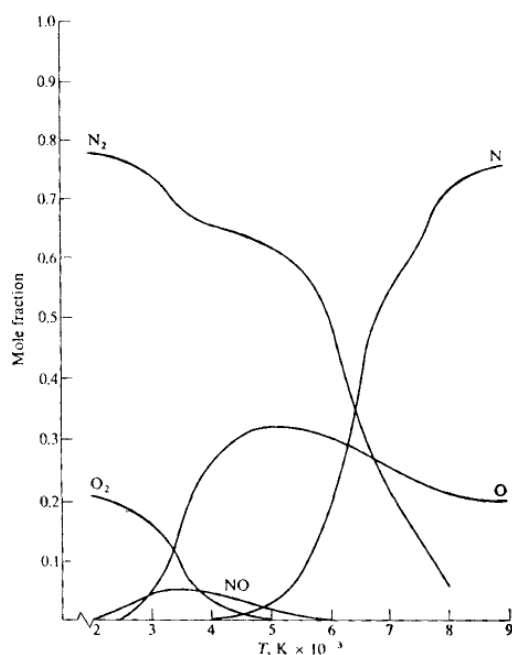


Fig. 6.2. Dissociació de les molècules d'oxigen i nitrogen

L'hidrogen, per la seva banda, es considera que pels 5.000°C, a pressió ambient, ja s'està dissociant. Per tant, tenint en compte, que a més pressió cal més temperatura per arribar a la dissociació, la majoria de reaccions que es produeixin en l'ejecció dels gasos seran entre molècules d'hidrogen i àtoms dissociats d'oxigen. Tot i això, si incrementem la pressió entre molècules disminuïm la dissociació entre elles (i viceversa).

Un cop s'arriba a la dissociació, si a una matèria se li continua donant temperatura, arribarà un punt en què es començarà a ionitzar degut a la pèrdua d'electrons. I és llavors quan es pot passar al quart estat de la matèria, el plasma, que és un gas ionitzat que es caracteritza per estar constituït en gran part per cations i on la majoria dels electrons que l'envolten resten lliures. Això fa que sigui un bon conductor elèctric i que respongui fortament a camps electromagnètics.

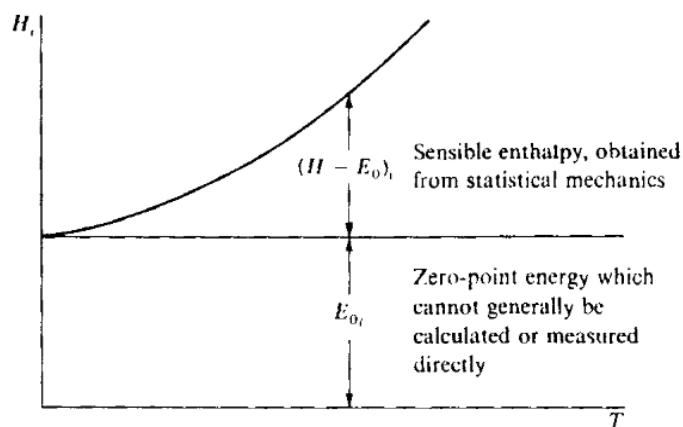
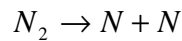


Fig. 6.3. Esquema del contrast entre l'entalpia sensible i el *zero point energy*

Un altre dels aspectes lligats a la dissociació de molècules és el *zero point energy* o energia del punt zero. Segons la mecànica quàntica, es considera que és l'energia mínima de qualsevol sistema físic.

La figura 6.3 mostra la dissociació d'una molècula, com pot ser la de nitrogen. Quan es té la molècula en sí, el sistema té una energia del punt zero baixa, ja que està en una composició estable on no li fa falta energia per mantenir-s'hi. En canvi, si es desitja separar aquests àtoms, caldrà que li donem més energia per a què es dissociïn, per tant el valor de l'energia del punt zero augmentarà. I amb ella l'entalpia del sistema, al augmentar l'energia interna de les molècules.



$N_2 \equiv$ Punt d'energia zero baix

$N + N \equiv$ Punt d'energia zero alt

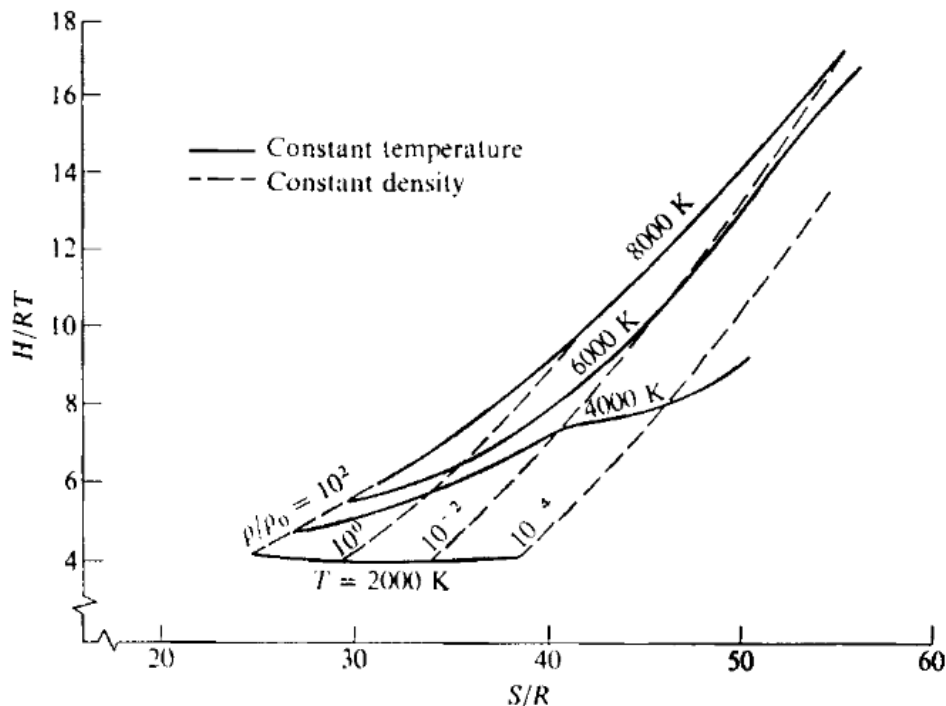


Fig.6.4. Diagrama de Mollier per aire a alta temperatura

A la fig.6.4 s'observa l'entalpia en funció de l'entropia del sistema. A temperatures més baixes de 2.000 K l'entalpia es manté constant, però a mesura que es va augmentant la temperatura, com s'ha vist abans, l'augment de l'energia interna de les molècules provocarà un augment d'entalpia. Aquest augment d'entalpia fa que es produeixi més dissociació entre les molècules i que la densitat del sistema disminueixi, augmentant l'entropia del conjunt. Tot i això, encara que la temperatura es mantingui, com més dissociació, més alta serà l'entalpia absoluta.

6.3. Equilibri químic vs química congelada

A l'hora d'analitzar el flux que passa a través d'una tovera hi ha varies consideracions segons la influència de les reaccions químiques al llarg de l'expansió en aquesta. La primera és considerar l'expansió del flux en química congelada, és a dir, en un bipropel·lent d'oxigen i hidrogen, seria quan la mescla H_2 i O_2 ¹⁷ que surt de la cambra de combustió per entrar a la tovera no reacciona més enllà de l'inici de la tovera. Com es pot veure (fig.6.5) el valor de la temperatura decau ràpidament a les poques polzades de distància. L'altra, és considerar l'expansió del flux en equilibri químic, és a dir, que al llarg de l'expansió a través de la tovera hi continuen havent reaccions químiques. Es pot observar com degut a la dissociació i consegüent augment de l'entalpia que es produeix durant les reaccions i recombinacions, la temperatura decau més lentament en l'espai.

Tot i això, a la pràctica, ni una ni l'altra s'apropen als valors experimentals. La tendència real que segueix el flux quedaria al bell mig d'ambdós casos, tot i que la consideració d'equilibri químic sembla ser més a prop dels valors experimentals.

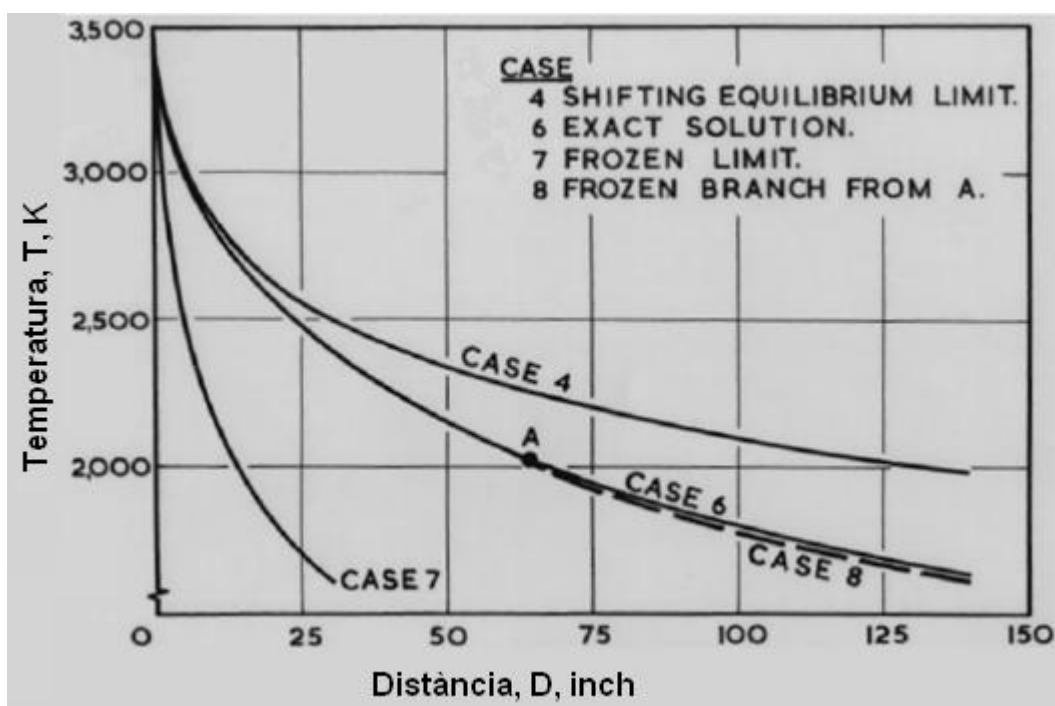


Fig.6.5. Gràfica de l'equilibri químic vers química congelada vers resultats experimentals

¹⁷ Veure annex 6, apartat 1: cinètica química de la mescla H_2+O_2

CAPÍTOL 7. EL PROGRAMA CEA DE LA NASA

El programa CEA, *Chemical Equilibrium Applications*, de la NASA, permet calcular les concentracions de productes en equilibri químic de qualsevol tipus de reactius. Tot determinant les seves propietats termodinàmiques i de transport.

Per fer-ho, primer de tot s'ha de seleccionar un dels diferents tipus de problemes que ens presenta, entre els que es poden trobar les propietats de combustió, la detonació de *Chapman-Jouquet*, o la *performance* d'un coet.

La idea inicial era utilitzar aquesta eina per tal de comprovar els resultats de les reaccions químiques entre hidrogen i oxigen que s'haguessin obtingut de les simulacions. Degut a què no s'han pogut implementar, es mostraran els resultats dels càlculs duts a terme que haguessin hagut d'ésser comparats. Per tant aquest apartat es centrarà en el cas del coet, que és el que interessa..

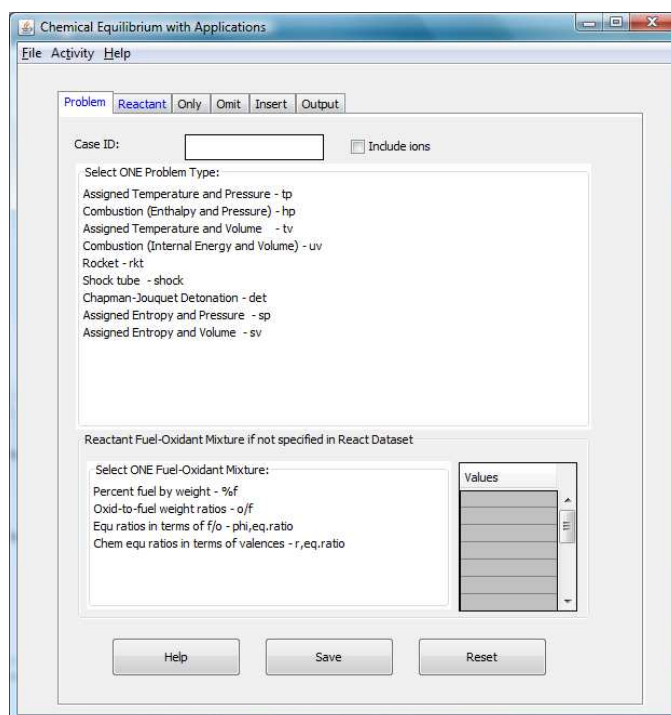


Fig.7.1 Interfície del CEA

Es selecciona el problema del coet (rocket-rkt) i apareix una finestra emergent on s'hauran d'especificar diferents condicions d'entrada. Els valors de les dades estaran basats en la tovera Vulcain 2, creada per Volvo.

En ella s'indicarà primer de tot que la nostra cambra de combustió és finita i se li donarà el valor del ràtio entre l'àrea de sortida de la cambra de combustió i la gola de la tovera del Vulcain 2, que és de 4,6. També se li assignarà el valor de pressió amb què surt de la cambra de combustió que és de 115 bars. El ràtio

d'àrea de la sortida de la tovera (sup A_e/A_t) que és de 58,3, i es deixarà per defecte la temperatura amb què els gasos surten de la cambra de combustió.

Un cop es torni a la interfície inicial, caldrà definir a la part inferior com serà la mescla entre l'oxidant i el reactiu. En aquest cas, pel Vulcain 2, el *oxid-to-fuel* ràtio serà de 6.7.

La següent pestanya, *reactant*, que marca els reactius de la mescla química, s'ha de completar posant l'hidrogen i l'oxigen diatòmic en estat líquid. Tot i que el Vulcain 2 ens marca una T determinada, el CEA no considera els valors i els omet per ser massa alts, posant el valor mínim per defecte.

A partir d'aquí les pestanyes que resten són opcionals. Com que l'interès és que calculi totes les fraccions molars de totes les possibles reaccions que es duguin a terme dins la tovera, no se li farà ometre cap espècie i es deixaran les tres pestanyes següents en blanc.

Finalment hi ha la pestanya *output*, on es pot seleccionar la unitat dels diferents productes de la reacció, així com les diferents variables que es vulguin visualitzar en els resultats, com ara: l'impuls específic del coet, la seva Mach, les condicions tèrmiques en equilibri químic i en química congelada, la pressió, temperatura i entropia del flux, etc.

Un cop entrades totes les dades i triades totes les opcions desitjades, s'executa el CEA i calcula tota una taula de resultats¹⁸ pels valors esmentats. Com es pot veure, la major part de la reacció dona com a producte aigua, en un 78% del total.

A la sortida del coet, s'obté un Mach de 4,41, una pressió de 154,8 pascals, i una temperatura de sortida de 1330K.

l'impuls específic obtingut és de 441s el qual és a priori un pèl més elevat que el que proporciona el Vulcain 2 que ronda els 429s. La diferència es deu deure a la variació de les temperatures inicials dels reactius, i a la temperatura de sortida de la cambra de combustió de què no es disposaven dades.

¹⁸ Veure annex 6, apartat 4.

CONCLUSIONS

Al llarg d'aquest projecte s'ha tractat la simulació de vàries toveres mitjançant dos programes de dinàmica de fluids computacional: el Fluent i l'OpenFOAM.

D'ambdós, es considera que per tal de fer un projecte curt sense cap tipus de coneixement bàsic del seu funcionament el més adient és el Fluent. Això és degut a què la seva interfície és més intuïtiva i visual, ja que tot i que Fluent permet treballar sobre consola si un ho desitja, les versions actuals estan clarament enfocades per a ser usades mitjançant la barra d'eines. Ja que a l'hora de preparar un cas per a ser executat, només cal anar resseguint les diferents opcions per ordre: d'esquerra a dreta i de dalt a baix.

En canvi, l'OpenFOAM funciona modificant varis documents de text a partir dels quals els diferents *solvers* extreuen les dades. A més a més, tot i que també és possible al Fluent, és bastant comú haver de modificar el codi d'un *solver* o d'una utilitat per tal que faci exactament el desitjat. Tot això fa que l'aprenentatge de l'ús del OpenFOAM sigui més farragós. Resumint, per la gent que faci projectes de major duració o posseeixi coneixements de programació, simulació i de la matèria sobre la qual aquesta gira, OpenFOAM és una bona tria. Tanmateix, per fer un projecte com el d'aquest TFC es recomana la utilització de Fluent.

Durant el treball s'ha volgut comprovar que la tovera de campana expandeix millor el flux que no pas la de forma cònica, i que era per tant més òptima per les nostres necessitats. Això s'ha fet a partir de l'adaptació d'una tovera cònica a campana, la número tres, mitjançant el codi de Matlab. Un cop simulades les dues toveres amb ràtios d'àrea similars, tot i comprovar que la tovera de campana expandeix millor el flux, s'ha vist com els valors resultants, com el de l'empenta i l'impuls específic són similars. Per tant, degut a què la diferència no és substancial es consideren igualment bones opcions les dues.

A l'hora de fer les simulacions, s'ha pogut comprovar que la dinàmica computacional de fluids és una bona eina d'aproximació a la realitat. Nogensmenys, els resultats només són un valor orientatiu ja que hi ha factors com ara el mallat o les toleràncies que poden fer-los variar. A més a més, la diferència que hi ha respecte els valors teòrics és major degut a què en aquests no està considerada la turbulència.

Tot i que al final no ha estat possible, un altre dels objectius del projecte era la simulació de les reaccions químiques d'un motor coet bipropel·lent i la comprovació dels resultats obtinguts mitjançant el CEA. Aquesta part era interessant ja que la química a altes temperatures hagués permès presentar un cas més real. Tanmateix, gràcies a la utilització d'aquest programa i les dades publicades a la web de la NASA s'ha aconseguit fer ús de les taules JANAF i l'evolució de c_p amb la temperatura.

Per finalitzar, cal dir que s'està satisfet amb el projecte tot i les dificultats trobades, sobretot amb l'OpenFOAM.

BIBLIOGRAFIA

Llibres

- [1] Anderson, J.D, *Computational Fluid Dynamics*, McGraw-Hill, 1995.
- [2] Philip G. Hill, Carl R. Peterson, *Mechanics and Thermodynamics of Propulsion*, Addison-Wesley Longman, 1992
- [3] Anderson, J.D, *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*, McGraw-Hill, 1988.
- [4] Anderson, J.D, *Fundamentals of Aerodynamics*, McGraw-Hill, 2005.
- [5] Sutton, George P, *Rocket Propulsion Elements*. John Wiley & Sons, 2001.
- [6] Glassman, Irvin, *Combustion*, Elsevier, 2008.

Apunts

- [7] Gutiérrez, J.,García-Berro, E., *Sistemas Espaciales: El motor cohete y los vectores de lanzamiento*, EPSC-UPC, 2009.
- [8] De Luca, Luigi. Endoreattori. Politecnico di Milano, 2007.
- [9] Vigevano, Luigi. Gasdinamica I. Politecnico di Milano 2006

Pàgines web

- [10] Engineering Applets.-Virgina Tech.
<http://www.engapplets.vt.edu/>
- [11] Richard Nakka's Experimental Rocketry Web Site
<http://www.nakka-rocketry.net/nozmach.html>
- [12] Henry A. Bent, *The Second Law*, Oxford University Press, New York, 1965
http://books.google.com/books?id=gY_T8mKI9DUC&pg=PA84&lpg=PA84&dq=%22hydrogen+dissociation+temperature++K%22&source=bl&ots=x8D6LITFBt&sig=opLvJJam2ITqAtLxISEh6YJtK54&hl=en&ei=6ss_SrbalZLMjAfPn50C&sa=X&oi=book_result&ct=result&resnum=5
- [13] ThermoBuild (CEA).- NASA
<http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/ceaThermoBuild.htm>
- [14] Open CFD
www.openfoamcfd.com

[15] OpenFOAM Wiki

http://openfoamwiki.net/index.php/Main_Page

[16] OpenFOAM User's Guide

<http://foam.sourceforge.net/doc/Guides-a4/UserGuide.pdf>

[17] Fluent User's Guide

http://cdlab2.fluid.tuwien.ac.at/LEHRE/TURB/Fluent.Inc/fluent6.3.26/help/html/ug//main_pre.htm

[18] Gambit User's Guide

http://www.ent.ohiou.edu/~juwt/HTMLS/fluent/gambit2/html/modeling_guide/mgtoc.htm

[19] Volvo, Vulcain 2

http://www.volvo.com/NR/rdonlyres/D9440E68-23B3-4BD7-9B7A-8B3CEFEF8740/0/Vulcain2_2005.pdf

[20] The engineering toolbox

http://www.engineeringtoolbox.com/dry-air-properties-d_973.html

[21] EADS-Astrium

<http://cs.astrium.eads.net/sp/LauncherPropulsion/Vulcain-2-Rocket-Engine.html>

ANNEX 1: SOBRE LA DINÀMICA DE FLUIDS

1.1. Què és la Dinàmica de Fluids Computacional?

Per estudiar el flux dins de la tovera s'ha hagut de fer una petita immersió en la dinàmica de fluids computacional, que és una branca de la mecànica de fluids que permet resoldre problemes que no tenen una solució analítica.

1.2. Per a què serveix?

La dinàmica de fluids computacional és avui dia una eina indispensable per tal de comprovar la viabilitat de projectes automobilístics, aeronàutics, navals, o millorar l'eficiència de productes ja existents. A més a més, és una bona eina d'estalvi per a les diferents empreses que la utilitzin, si s'empra bé, ja que totes les proves dels prototips es fan virtualment en primera instància, i si sembla que funciona és llavors quan s'inverteixen els diners per a realitzar les proves al món real.

Pràcticament qualsevol objecte existent a la nostra vida quotidiana podria ser examinat mitjançant la tècnica de la dinàmica de fluids computacional en termes de transferència de calor, diferències de pressió, velocitats, ja que el contacte amb un que altre flux de matèria és permanent.

1.3. Com s'ha aplicat?

S'ha usat la dinàmica de fluids computacional per simular el comportament del flux que passa a través d'una tovera. I poder determinar així com varia la temperatura, la pressió, la densitat i la Mach al llarg de la seu procés d'expansió supersònic. De manera que el volum o superfície de control estarà ben delimitat per les parets i l'entrada i sortida de l'enginy.

A més a més, els programes que s'han fet servir provaran de resoldre els problemes presentats mitjançant les equacions de Navier-Stokes per la resolució del mètode dels números finits, ja que el flux a resoldre, a priori és compressible, viscos i no-estacionari.

1.4. Les fórmules de Navier-Stokes

L'equació de la continuïtat

Forma No-Conservativa

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot V = 0 \quad (1.1)$$

Forma Conservativa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (1.2)$$

L'equació del moment

Forma No-Conservativa

Component X:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (1.3)$$

Component Y:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (1.4)$$

Component Z:

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (1.5)$$

Forma Conservativa

Component X:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u V) = \rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (1.6)$$

Component Y:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v V) = \rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (1.7)$$

Component Z:

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho w V) = \rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (1.8)$$

L'equació de l'energia

Forma No-Conservativa

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ &- \frac{\partial(u p)}{\partial x} - \frac{\partial(v p)}{\partial y} - \frac{\partial(w p)}{\partial z} + \frac{\partial(u \tau_{xx})}{\partial x} \\ &+ \frac{\partial(u \tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u \tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(u \tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v \tau_{yy})}{\partial y} \\ &+ \frac{\partial(v \tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w \tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w \tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(v \tau_{zz})}{\partial z} + \rho f \cdot V \end{aligned} \quad (1.9)$$

Forma Conservativa

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{V^2}{2} \right) V \right] &= \rho \dot{q} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\
- \frac{\partial(uv)}{\partial x} - \frac{\partial(vp)}{\partial y} - \frac{\partial(wp)}{\partial z} + \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} & \\
+ \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(u\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} & \\
+ \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} + \rho f \cdot V &
\end{aligned} \tag{1.10}$$

Totes aquestes equacions estan formulades amb un flux viscos com a objecte d'estudi. Un flux viscos es caracteritza per tenir el fenomen de transport de la fricció, conductivitat tèrmica, i/o difusió de massa inclosa. El fenomen de transport sempre és dissipatiu (o sigui, sempre incrementa l'entropia del flux).

Un exemple n'és un gas químicament reactiu, com ara la dissociació de l'aire que passa en fluxos d'alta temperatura sobre vehicles hipersònics; en aquests fluxos, els gradient de concentració són induïts per diferents tasses de reacció i/o per la prominència de diferents tipus de reaccions en diferents parts del flux a diferents pressions i temperatures.

Totes les equacions de Navier-Stokes presentades són sistemes d'equacions molt difícils de resoldre analíticament. A dia d'avui, no hi ha una solució tancada sobre aquestes equacions. Tot i que això no vol dir que no hi hagi una solució general, sinó, tan sols, que fins ara s'ha estat incapaç de trobar-la.

ANNEX 2: EQUACIONS DEL FLUX ISENTRÒPIC

Les equacions que descriuen el flux isentròpic en règim estacionari són les següents:

Continuïtat

$$\rho_1 \cdot V_1 \cdot A_1 = \rho_2 \cdot A_2 \cdot V_2 \quad (2.1)$$

Moment

$$p_1 \cdot A_1 + \rho_1 \cdot V_1^2 \cdot A_1 + \int_{A_1}^{A_2} p \, dA = p_2 \cdot A_2 + \rho_2 \cdot V_2^2 \cdot A_2 \quad (2.2)$$

Energia

$$h_1 + \frac{V_1^2}{2} = h_2 + \frac{V_2^2}{2} \quad (2.3)$$

Equació de l'estat

$$p = \rho \cdot R \cdot T \quad (2.4)$$

Relació per un cas caloríficament perfecte

$$h = c_p \cdot T \quad (2.5)$$

Equació que relaciona l'àrea amb la Mach

$$\left(\frac{A}{A^*} \right)^2 = \frac{1}{M^2} \left[\frac{2}{\gamma+1} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right) \right]^{(\gamma+1)/(\gamma-1)} \quad (2.6)$$

Els valors de pressió, temperatura i densitat en funció del Mach, i per tant en funció també de la relació d'àrees. Són els següents:

Pressió

$$\frac{p}{p_0} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-\gamma/(\gamma-1)} \quad (1.7)$$

Densitat

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1/(\gamma-1)} \quad (1.8)$$

Temperatura

$$\frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2\right)^{-1} \quad (1.9)$$

ANNEX 3: ESQUEMES, VALORS I CODIS DE DISSENY

3.1. Esquemes de disseny

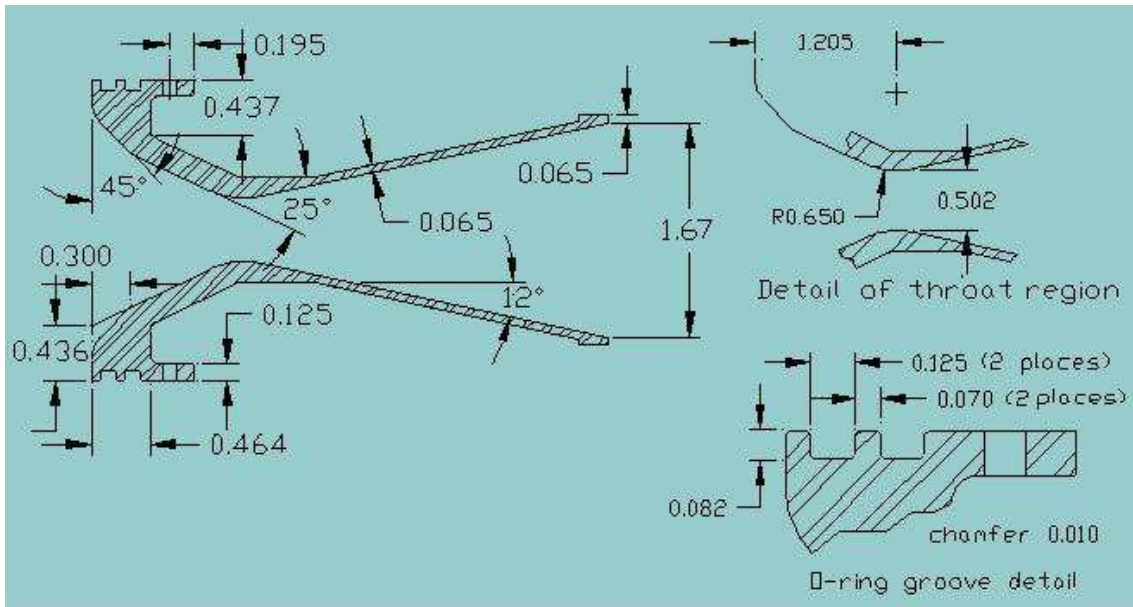


Fig.3.1. Esquema de la tovera n^o2

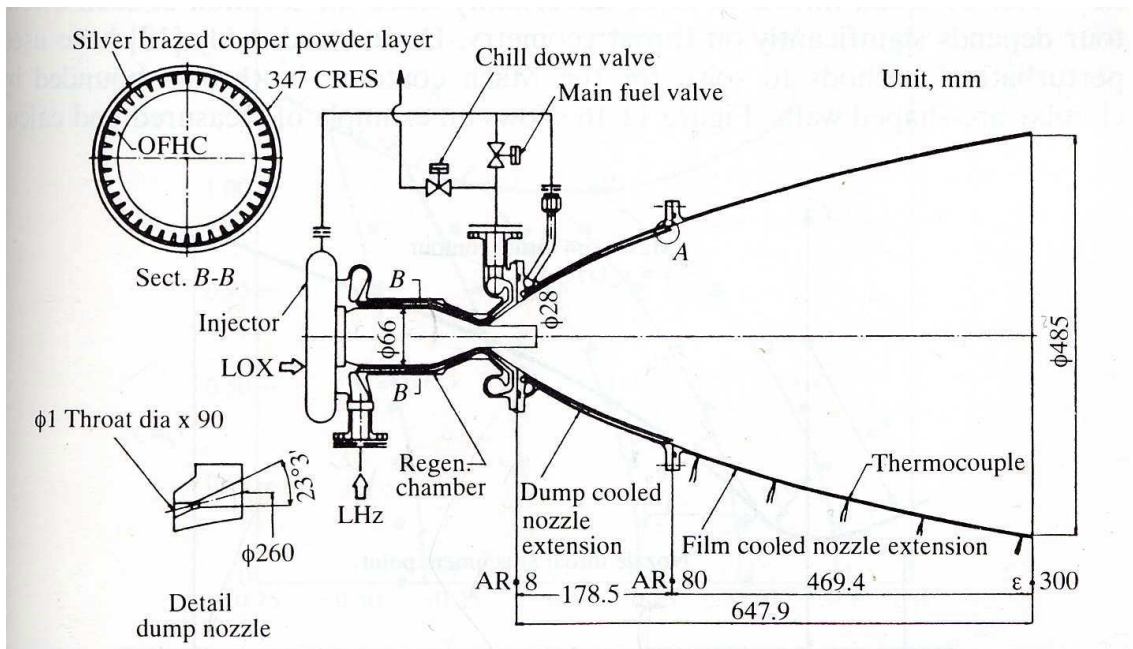


Fig.3.2. Esquema de la tovera n^o4

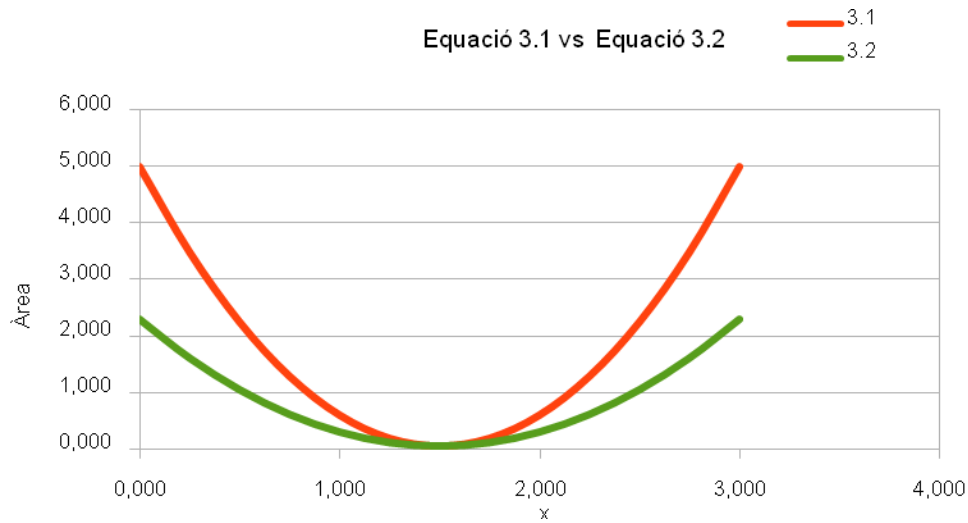


Fig.3.3. Gràfic comparatiu dels contorns de la tovera n°1

3.2. Valors de disseny de les geometries

Taula 3.1. Valors de la geometria de les diferents toveres

Tovera	Valors disseny				
	Ag (m ²)	Ae/Ag	As/Ag	Dt (m)	Dg (m)
N°1	0,0547	42,151	42,151	3	1,5
N°2	0,0289	11,111	11,111	1,541	0,462
N°3	0,0547	5	58,3	2,215	0,444
N°4	0,0615	5,5561	300	7,3215	0,4814
N°5	0,5020	2,81	7,22	5,3	0,9
N°6	0,0589	4,6303	58,338	2,17	0,2

3.3. Codi del Programa de Matlab

3.3.1. principal.m

```
% Programa per generar una tobera convergent-divergent
% utilitzant una equació polinòmica de 3r grau en cadascuna
% de les seves parts (la convergent i la divergent)

% Per a fer-ho es necessita saber:

% L'àrea del inlet (Ai), l'àrea del throat (At) i el del outlet (Ao)
% i també la seva posició en l'eix x (xi, xt i xo respectivament)
% A més a més necessitem el número de punts de la zona convergent (N1)
% i de la divergent (N2)

N1 = 30;
N2 = 30;

% Número total de punts
np = N1 + N2 + 1;

% Inicialització de la coordenada x (xx) i de l'àrea (aa)
xx = zeros(np,1);
aa = zeros(np,1);

% Valors inicials
xi = 0;
xt = 0.17;
xo = 2.17;
Ai = 0.273;
At = 0.059;
Ao = 3.44;

% Part convergent

i0 = 1;
i1 = N1 + 1;
N = i1 - i0 + 1;

x0 = xi;
x1 = xt;
a0 = Ai;
a1 = At;

[aa(i0:i1),xx(i0:i1)] = perfil(x0,x1,a0,a1,N);

% Part divergent

i0 = N1 + 1;
i1 = np;
N = i1 - i0 + 1;

x0 = xt;
x1 = xo;
a0 = At;
a1 = Ao;
```

```
[aa(i0:i1),xx(i0:i1)] = perfil(x0,x1,a0,a1,N);
```

```
% Plots tant de aa(x) com de rr(x)
```

3.3.2. perfil.m

```
% Aquest programa genera una equació polinòmica de 3r grau com  
aquesta:
```

```
% Àrea =  $k_1*x^3+k_2*x^2+k_3*x+k_4$ 
```

```
% calculant els valors de les constants depenent dels valors  
introduïts
```

```
% valor inicial de x -> x0
```

```
% valor final de x -> x1
```

```
% valor a en x0 -> a0
```

```
% valor a en x1 -> a1
```

```
% número de punts del vector -> N
```

```
function [aa,xx] = perfil(x0,x1,a0,a1,N)
```

```
xx = zeros(N,1);
```

```
aa = zeros(N,1);
```

```
Da = a1 - a0;
```

```
Dx = x1 - x0;
```

```
k1 = -2*Da/(Dx*Dx*Dx);
```

```
k2 = 3*Da*(x0+x1)/(Dx*Dx*Dx);
```

```
k3 = -6*(Da/(Dx*Dx*Dx))*x0*x1;
```

```
k4 = (x1*x1*(x1-3*x0)*a0-x0*x0*(x0-3*x1)*a1)/(Dx*Dx*Dx);
```

```
for i = 1 : size(xx,1)
```

```
    xx(i) = x0 + (i-1) * Dx / (N-1);
```

```
    aa(i) = ((k1*xx(i) + k2)*xx(i) + k3)*xx(i) + k4;
```

```
end
```

ANNEX 4: CODIS D'OPENFOAM

4.1. BlockMeshDict de la tovera n°5

```
convertToMeters 1;

vertices
(
(0 0 0) // 0
(0.6036 0 0) // 1
(0.9 0 0) // 2
(1.0393 0 0) // 3
(5.3 0 0) // 4
(5.3 0.358 0.0156) // 5
(1.0173 0.1422 0.0062) // 6
(0.9 0.1332 0.0058) // 7
(0.6602 0.1716 0.0075) // 8
(0 0.2231 0.0097) // 9
(0 0.4463 0.0195) // 10
(0.7019 0.2982 0.0130) // 11
(0.9 0.2664 0.0116) // 12
(0.9969 0.2739 0.012) // 13
(5.3 0.716 0.0313) // 14
(5.3 1.074 0.0469) // 15
(0.9765 0.4055 0.0177) // 16
(0.9 0.3996 0.0174) // 17
(0.7436 0.4247 0.0185) // 18
(0 0.6694 0.0292) // 19
(5.3 0.358 -0.0156) // 20
(1.0173 0.1422 -0.0062) // 21
(0.9 0.1332 -0.0058) // 22
(0.6602 0.1716 -0.0075) // 23
(0 0.2231 -0.0097) // 24
(5.3 0.716 -0.0313) // 25
(0.9969 0.2739 -0.012) // 26
(0.9 0.2664 -0.0116) // 27
(0.7019 0.2982 -0.0130) // 28
(0 0.4463 -0.0195) // 29
(5.3 1.074 -0.0469) // 30
(0.9765 0.4055 -0.0177) // 31
(0.9 0.3996 -0.0174) // 32
(0.7436 0.4247 -0.0185) // 33
(0 0.6694 -0.0292) // 34
);

edges
(
arc 18 17 (0.85 0.4021 0.0175)
arc 11 12 (0.85 0.2684 0.0117)
arc 8 7 (0.85 0.1348 0.0059)
arc 17 16 (0.95 0.4021 0.0175)
arc 12 13 (0.95 0.2684 0.0117)
arc 7 6 (0.95 0.1348 0.0059)
arc 33 32 (0.85 0.4021 -0.0175)
arc 28 27 (0.85 0.2684 -0.0117)
```

```
arc 23 22 (0.85 0.1348 -0.0059)
arc 32 31 (0.95 0.4021 -0.0175)
arc 27 26 (0.95 0.2684 -0.0117)
arc 22 21 (0.95 0.1348 -0.0059)
);
```

blocks

```
(
hex (0 1 1 0 9 8 23 24) (80 1 20) simpleGrading (3 1 1) // 0
hex (1 2 2 1 8 7 22 23) (15 1 20) simpleGrading (1 1 1) // 1
hex (2 3 3 2 7 6 21 22) (10 1 20) simpleGrading (1 1 1) // 2
hex (3 4 4 3 6 5 20 21) (200 1 20) simpleGrading (5 1 1) // 3
hex (9 8 23 24 10 11 28 29) (80 1 20) simpleGrading (3 1 1) // 4
hex (8 7 22 23 11 12 27 28) (15 1 20) simpleGrading (1 1 1) // 5
hex (7 6 21 22 12 13 26 27) (10 1 20) simpleGrading (1 1 1) // 6
hex (6 5 20 21 13 14 25 26) (200 1 20) simpleGrading (5 1 1) // 7
hex (10 11 28 29 19 18 33 34) (80 1 20) simpleGrading (3 1 1) // 8
hex (11 12 27 28 18 17 32 33) (15 1 20) simpleGrading (1 1 1) // 9
hex (12 13 26 27 17 16 31 32) (10 1 20) simpleGrading (1 1 1) // 10
hex (13 14 25 26 16 15 30 31) (200 1 20) simpleGrading (5 1 1) // 11
);
```

patches

```
(
patch inlet
(
(0 9 24 0)
(9 10 29 24)
(10 19 34 29)
)
wall wall
(
(19 18 33 34)
(18 17 32 33)
(17 16 31 32)
(16 15 30 31)
)
wedge front
(
(0 1 8 9)
(1 2 7 8)
(2 3 6 7)
(3 4 5 6)
(9 8 11 10)
(8 7 12 11)
(7 6 13 12)
(6 5 14 13)
(10 11 18 19)
(11 12 17 18)
(12 13 16 17)
(13 14 15 16)
)
wedge back
(
(0 24 23 1)
(1 23 22 2)
)
```

```
( 2 22 21 3)
( 3 21 20 4)
(24 29 28 23)
(23 28 27 22)
(22 27 26 21)
(21 26 25 20)
(29 34 33 28)
(28 33 32 27)
(27 32 31 26)
(26 31 30 25)
)
```

```
symmetryPlane axis
(
(0 1 1 0)
(1 2 2 1)
(2 3 3 2)
(3 4 4 3)
)
```

```
patch outlet
(
(4 20 5 4)
(5 20 25 14)
(14 25 30 15)
)
```

```
); // Closing the parenthesis of patches
```

```
mergePatchPairs
(
);
```

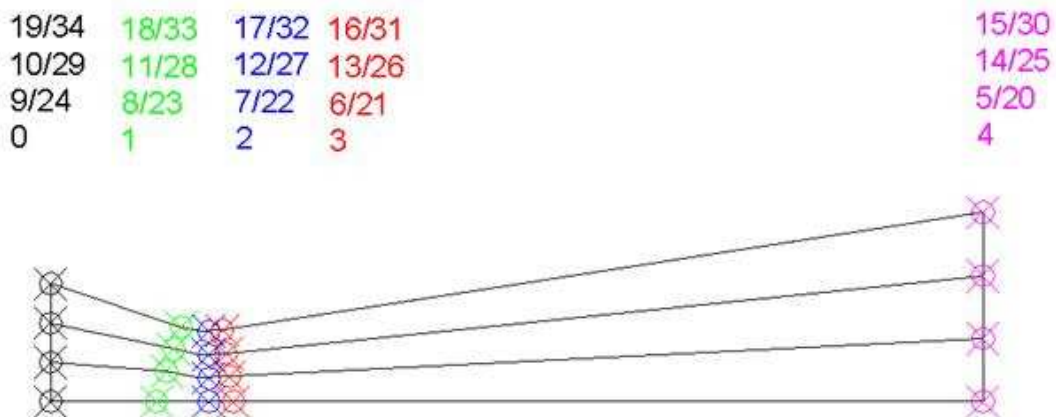


Fig.4.1. Esquema de la posició dels punts en la tovera n^o5

4.2. Exemples d'arxius de simulació d'OpenFOAM

4.2.1. Exemple d'arxiu de la carpeta 0.

```
dimensions      [1 -1 -2 0 0 0 0];
// les unitats que la defineixen, en aquest cas kg*m^-1*s^-2

internalField   uniform 100000;
//el valor del interior

boundaryField
{
    inlet // aquesta es una boundary definida al blockMeshDict
    {
        type          fixedValue;
        //la pressió entra a la tovera de manera constant
        value         uniform 1.15e+07;
    }

    nozzleWall
    {
        type          zeroGradient;
        //el gradient de la pressió a la pared de la tovera es 0
    }

    front
    {
        type          wedge;
    }

    back
    {
        type          wedge;
    }

    symmetryAxe
    {
        type          symmetryPlane;
    }

    endOfNozzle
}
```

```
{
    type          waveTransmissive;
    //la pressió surt de la tobera en forma de ones
    phi          phi;

    rho          rho;

    psi          psi;

    gamma        1.4;

    fieldInf     1e3;

    lInf         10;

    value        uniform 1e3;
}
}
```

4.2.2. Exemple controlDict

```
application sonicTurbFoam;

startFrom      startTime;

startTime      0;

stopAt         endTime;

endTime        0.005;

deltaT         1e-6;

writeControl   runtime;

writeInterval  0.00005;

purgeWrite     0;

writeFormat    ascii;

writePrecision 6;

writeCompression uncompressed;

timeFormat     general;

timePrecision  6;

adjustTimeStep no;

maxCo          0.2;

runtimeModifiable yes;
```

4.2.3. Creació del sonicDynTimeTurbFoam

Includes a afegir dins del següent tros de codi:

```
int main(int argc, char *argv[])
{
#   include "readTimeControls.H"
#   include "compressibleCourantNo.H"
#   include "setInitialDeltaT.H"
```

I dins d'aquest altre::

```
Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

for (runTime++; !runTime.end(); runTime++)
{
    Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;

#   include "readTimeControls.H"
// 2 línees
#   include "setDeltaT.H"
```

4.2.4. El codi janaf en Fortran

```
1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
      10          20          30          40          50          60          70          80
1  TiN(cr)          Chase, 1998 pp1612-4. 1
2  2 j 6/68 TI 1.00N 1.00 0.00 0.00 0.00 1 61.87374 -337648.800 2
3  200.000 800.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 5487.000 3
4  -5.479117220D+05 9.328691110D+03 -6.386263890D+01 2.429925456D-01 -4.304234520D-04 4
5  3.792645100D-07 -1.317412256D-10 -8.424256140D+04 3.392988560D+02 5
6  800.000 3220.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 5487.000 6
7  -3.656247060D+05 1.265730431D+03 3.831711190D+00 1.632900455D-03 -1.062786626D-07 7
8  1.310931390D-11 -5.770548410D-16 -5.027654400D+04 -1.652632899D+01 8
9  TiN(L)          Chase, 1998 pp1612-4. 9
10 1 j 6/68 TI 1.00N 1.00 0.00 0.00 0.00 2 61.87374 -337648.800 10
11 3220.000 6000.0007 -2.0 -1.0 0.0 1.0 2.0 3.0 4.0 0.0 5487.000 11
12 0.000000000D+00 0.000000000D+00 7.548249987D+00 0.000000000D+00 0.000000000D+00 12
13 0.000000000D+00 0.000000000D+00 -3.626039860D+04 -3.958296649D+01 13

1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
      10          20          30          40          50          60          70          80
```


4.2.5. Taula del codi Fortran

Record	Contents	FORTRAN format	Columns
1	Species name or formula Comments and data source	A16 A62	1 to 16 19 to 80
2	Number of T intervals Reference data code Chemical formula—symbols (all capitals) and numbers Zero for gas; nonzero for condensed ^a Molecular weight Heat of formation at 298.15 K, J/mol	I2 A6 5(A2, F6.2) I2 F13.7 F15.5	1 to 2 4 to 9 11 to 50 51 to 52 53 to 65 66 to 80
3	Temperature range Number of coefficients for $C_p^{\circ}(T)/R$ (always seven) T exponents in empirical equation for $C_p^{\circ}(T)/R$ [always -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4; see eq. (1)] $H^{\circ}(298.15) - H^{\circ}(0)$ J/mol, if available	2F11.3 I1 8F5.1 F15.3	1 to 22 23 24 to 63 66 to 80
4	First five coefficients for $C_p^{\circ}(T)/R$, eq. (1)	5D16.9	1 to 80
5	Last two coefficients for $C_p^{\circ}(T)/R$, eq. (1) Integration constants b_1 and b_2 , eqs. (2) and (3)	2D16.9 2D16.9	1 to 32 49 to 80
--	Repeat 3, 4, and 5 for each interval	-----	-----

a - Condensed phases are numbered in increasing order by temperature

4.2.6. Tipus de condicions de contorn utilitzades amb OpenFOAM

U (Velocitat)		
Tipus	Utilitat	Valors Necessitats
<i>fixedValue</i>	Valor del camp fixat	El valor fix
<i>zeroGradient</i>	El gradient del camp en el contorn (boundary) és nul	Cap
<i>inletOutlet</i>	Depenent de la direcció de <i>U</i> varia el camp <i>U</i> i <i>P</i> entre <i>fixedValue</i> i <i>zeroGradient</i>	El valor a l'àrea d'entrada i el del contorn
<i>pressureInletOutletVelocity</i>	A més a més de la funcionalitat de l' <i>inletOutlet</i> la <i>U</i> és calculada a partir del flux en la direcció de l'àrea d'entrada si es sap el valor de <i>P</i>	El valor del contorn i la direcció a l'àrea d'entrada

T (Temperatura)		
Tipus	Utilitat	Valors Necessitats
<i>fixedValue</i>	Valor del camp fixat	El valor fix
<i>zeroGradient</i>	El gradient del camp en el contorn és nul	Cap

P (Pressió)		
Tipus	Utilitat	Valors Necessitats
<i>fixedValue</i>	Valor del camp fixat	El valor fix
<i>zeroGradient</i>	El gradient del camp en el contorn és nul	cap
<i>totalPressure</i>	La pressió total $P_t = p_{estàtica} + \frac{1}{2} \rho \cdot u^2$ és fixa. Quan <i>U</i> canvia <i>p</i> és ajustada	ρ_0 (<i>uniform</i> o <i>nonuniform List<scalar></i>); phi; rho; psi; gamma;p
<i>waveTransmissive</i>	Transmet la pressió supersònica en ones cap a un camp.	Valor pressió per correcció entrada/sortida, <i>Inf</i> (com de lluny és el camp llunyà), psi, rho, phi, gamma, fieldInf (pressió del camp llunyà)

ANNEX 5: VALORS DE LA C_p I LA CONDUCTIVITAT TÈRMICA

Taula 5.1. Valors de C_p en funció de la temperatura per diferents espècies

T (K)	C_p H ₂ (J/mol·K)	C_p O ₂ (J/mol·K)	C_p Aire (J/mol·K)
0	0,000	0,000	0,000
300	28,849	29,388	29,000
400	29,189	30,115	29,355
500	29,254	31,092	29,821
600	29,318	32,090	30,442
700	29,444	32,990	31,135
800	29,629	33,745	31,823
900	29,873	34,361	32,467
1000	30,206	34,883	33,050
1100	30,567	35,333	33,571
1200	30,983	35,695	34,023
1300	31,421	36,006	34,419
1400	31,866	36,288	34,767
1500	32,305	36,553	35,076
1600	32,732	36,808	35,342
1700	33,144	37,057	35,600
1800	33,539	37,302	35,825
1900	33,916	37,545	36,029
2000	34,276	37,784	36,216
2100	34,618	38,020	36,387
2200	34,944	38,254	36,546
2300	35,254	38,484	36,694
2400	35,550	38,710	36,831
2500	35,832	38,933	36,960
2600	36,102	39,152	37,081
2700	36,361	39,366	37,195
2800	36,609	39,575	37,303
2900	36,848	39,780	37,405
3000	37,078	39,980	37,502
3100	37,301	40,175	37,594
3200	37,518	40,365	37,682
3300	37,728	40,549	37,766
3400	37,934	40,729	37,847
3500	38,135	40,904	37,924
3600	38,331	41,074	37,998
3700	38,525	41,239	38,070
3800	38,715	41,400	38,139
3900	38,902	41,556	38,206
4000	39,087	41,707	38,270

Taula 5.2. Valors de conductivitat tèrmica de l'aire en funció de la temperatura

T (K)	Conductivitat Tèrmica 10^{-8} (w/m·k)
200	1.809
300	2.624
400	3.365
500	4.041
600	4.661
700	5.236
800	5.774
900	6.276
1000	6.754
1100	7.209
1200	7.640
1300	8.054
1400	8.450
1500	8.831
1600	9.199
1700	9.554
1800	9.899
1900	10.233
2000	10.314
2100	10.515
2200	10.687
2300	10.831
2400	10.947
2500	11.036
2600	11.096
2700	11.128
2800	11.132
2900	11.109
3000	11.057

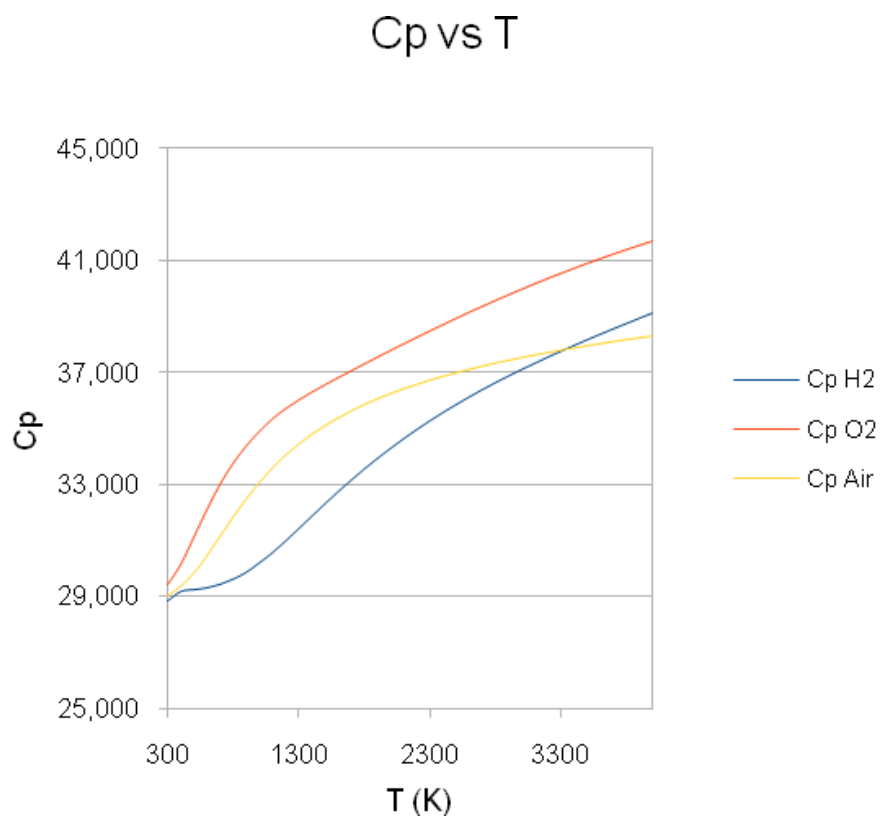
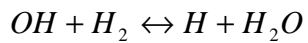
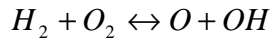


Fig.5.1. Gràfic comparatiu dels valors de la C_p respecte la Temperatura

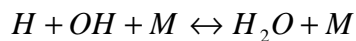
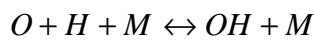
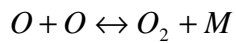
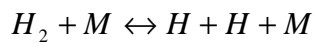
ANNEX 6: Mescla H₂ + O₂ i CEA

6.1. Cinètica química de la mescla H₂ + O₂

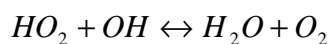
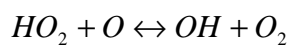
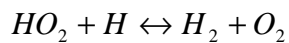
H₂ - O₂ Reaccions en cadena



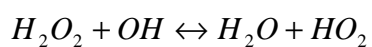
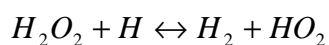
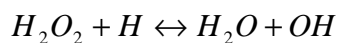
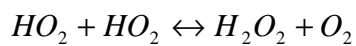
H₂ - O₂ Reaccions de Dissociació / Recombinació



H₂O Reaccions



H₂O₂ Reaccions



6.2. Entalpia de reacció

Càlcul de l'entalpia de reacció de formació de l'aigua, el producte amb una fracció molar més elevada en la mescla $H_2 + O_2$.

$$\Delta H_{\text{reacció}}^{\ominus} = \sum \Delta H_f^{\ominus} (\text{Products}) - \sum \Delta H_f^{\ominus} (\text{Reactants})$$

$$\Delta H_{\text{reacció}} = \sum n \cdot \Delta H_f (\text{productes}) - \sum n \cdot \Delta H_f (\text{reactius});$$

$$\Delta H_{\text{reacció } 0K} = \Delta H_f (H_2O) - (2 \cdot \Delta H_f (H) + \Delta H_f (O));$$

$$\Delta H_{\text{reacció } 0K} = -238.922 - (2 \cdot 216.035 + 242.250) = -913.242 \text{ kJ / mol}$$

$$\Delta H_{\text{reacció}} = \sum n \cdot \Delta H_f (\text{productes}) - \sum n \cdot \Delta H_f (\text{reactius});$$

$$\Delta H_{\text{reacció } 2000K} = \Delta H_f (H_2O) - (2 \cdot \Delta H_f (H) + \Delta H_f (O));$$

$$\Delta H_{\text{reacció } 2000K} = -251.334 - (2 \cdot 226.899 + 284.888) = -990.02 \text{ kJ / mol}$$

$$\Delta H_{\text{reacció}} = \Delta H_{\text{reacció } 2000K} - \Delta H_{\text{reacció } 0K} = -76.778 \text{ kJ / mol}$$

Taula 6.1. Entalpies de formació per l'oxigen, hidrogen, i aigua.

T (k)	ΔH_f [kJ/mol]		
	O	H	H ₂ O
0	242,250	216,035	-238,922
2000	284,888	226,899	-251,334
2200	289,054	227,595	-251,569
2400	293,220	228,227	-251,727
2600	297,390	228,801	-251,832
2800	301,566	229,322	-251,904
3000	305,749	229,795	-251,957
3200	309,942	230,222	-252,005
3400	314,147	230,607	-252,059
3600	318,366	230,950	-252,126
3800	322,600	231,255	-252,213
4000	326,851	231,522	-252,323

6.3. Característiques Vulcain 2

Taula 6.1. Característiques del Vulcain 2

Propel·lents	LOX/LH2
Empenta en el buit	1.359 kN
Impuls específic en el buit	429s
Flux màssic del propel·lent a l'entrada de la cambra d'impuls:	
• LH2	40,9 kg/s
• LOX	275,6 kg/s
• Turbine exhaust gas (injectat a la tovera)	10,1 kg/s
Condicions de la cambra d'impuls:	
• Pressió LH2	182,1 bar
• Temperatura LH2	36 K
• Pressió LOX	153,9 bar
• Temperatura LOX	96,7 K
<i>Mixture ratio</i> (Cambra d'impuls)	6,7
Pressió de la cambra de combustió	117.3 bar
Àrea ràtio de la tovera (As/Ag)	58,2
Diàmetre de sortida de la tovera	2,09 m
Llargada total del motor	3,44 m
Massa de la cambra d'impuls	909 kg

6.4. Full de resultats del CEA

NASA-GLENN CHEMICAL EQUILIBRIUM PROGRAM CEA2, MAY 21, 2004
BY BONNIE MCBRIDE AND SANFORD GORDON
REFS: NASA RP-1311, PART I, 1994 AND NASA RP-1311, PART II, 1996


```
problem case=vulcain o/f=6.1,
  rocket fac ac/at=4.6 tcest,k=3800
  p,bar=115,
  sup,ae/at=58.3,
react
  fuel=H2(L) wt=100
  oxid=O2(L) wt=100
output
  plot p t s pip mach aeat isp cond condz
end
```

OPTIONS: TP=F HP=F SP=F TV=F UV=F SV=F DETN=F SHOCK=F REFL=F
INCD=F
RKT=T FROZ=F EQL=T IONS=F SIUNIT=T DEBUGF=F SHKDBG=F DETDBG=F
TRANSPT=F

TRACE= 0.00E+00 S/R= 0.000000E+00 H/R= 0.000000E+00 U/R=
0.000000E+00

Pc, BAR = 115.000000

Pc/P =

SUBSONIC AREA RATIOS =

SUPERSONIC AREA RATIOS = 58.3000

NFZ= 1 Mdot/Ac= 0.000000E+00 Ac/At= 4.600000E+00

REACTANT	WT.FRAC	(ENERGY/R),K	TEMP,K	DENSITY
EXPLODED FORMULA				
F: H2(L)	1.000000	-0.108389E+04	20.27	0.0000
H	2.000000			
O: O2(L)	1.000000	-0.156101E+04	90.17	0.0000
O	2.000000			

SPECIES BEING CONSIDERED IN THIS SYSTEM
(CONDENSED PHASE MAY HAVE NAME LISTED SEVERAL TIMES)
LAST thermo.inp UPDATE: 9/09/04

g 6/97 *H	g 4/02 HO2	tpis78 *H2
g 8/89 H2O	g 6/99 H2O2	g 5/97 *O
g 4/02 *OH	tpis89 *O2	g 8/01 O3
g11/99 H2O(cr)	g 8/01 H2O(L)	g 8/01 H2O(L)

O/F = 6.100000

MIXTURE	EFFECTIVE	FUEL	EFFECTIVE	OXIDANT
ENTHALPY		h(2)/R		h(1)/R
h0/R				
(KG-MOL)(K)/KG	-0.53767500E+03		-0.48783267E+02	-
0.11764126E+03				
KG-FORM.WT./KG		bi(2)		bi(1)
b0i				
*H		0.99212255E+00		0.00000000E+00
0.13973557E+00				
*O		0.00000000E+00		0.62502344E-01
0.53699197E-01				
POINT ITN	T	H	O	
1 9	3553.931	-9.075	-15.963	
2 2	3549.803	-9.092	-15.972	
Pinf/Pt = 1.736064				
3 4	3349.484	-9.268	-16.320	
Pinf/Pt = 1.736280				
3 1	3349.440	-9.268	-16.320	
4 2	3546.194	-9.095	-15.977	
4 1	3546.186	-9.095	-15.977	
2 2	3552.885	-9.080	-15.965	
Pinf/Pt = 1.736177				
3 4	3351.944	-9.255	-16.314	
Pinf/Pt = 1.736409				
3 1	3351.896	-9.255	-16.314	
4 2	3549.265	-9.083	-15.971	
4 1	3549.258	-9.083	-15.971	
END OF CHAMBER ITERATIONS				
4 5	1275.714	-10.852	-29.136	
4 3	1330.367	-10.805	-28.235	

THEORETICAL ROCKET PERFORMANCE ASSUMING EQUILIBRIUM

COMPOSITION DURING EXPANSION FROM FINITE AREA COMBUSTOR

Pin = 1667.9 PSIA
 Ac/At = 4.6000 Pinj/Pinf = 1.009629
 CASE = vulcain

TEMP	REACTANT	WT FRACTION	ENERGY
		(SEE NOTE)	KJ/KG-MOL
K			
FUEL	H2(L)	1.0000000	-9012.000
20.270			
OXIDANT	O2(L)	1.0000000	-12979.000
90.170			
O/F=	6.10000	%FUEL= 14.084507	R,EQ.RATIO= 1.301096
PHI,EQ.RATIO=	1.301096		

