

GUIPEP

EVALUACION DE PROPELENTES



**Texto extraído de www.nakka-rocketry.net y traducido por:
Jeremías Carmona para www.coheteriaamateur.com.ar y
“Asociación de Cohetería Experimental y Modelistas
Argentina”**

Indices

Introducción	4
Uso GUIPEP	5
Análisis de los supuestos	5
Salida GUIPEP	6
Comparación de las ecuaciones de rendimiento para GUIPEP	13
Limitaciones de GUIPEP	13

Introduction

Este software, GUIPEP, que es básicamente el software PROPEP (versión PC del programa de evaluación de propulsante), con una interfaz gráfica de usuario (GUI) añadido para simplificar considerablemente el uso del programa. Este software termoquímica de gran utilidad permite al usuario evaluar el rendimiento teórico de un sólido (o líquido) combustible para cohetes. Como tal, es especialmente útil para comprobar la viabilidad de las formulaciones de carburante posible. Además, permite al usuario determinar rápidamente las proporciones de los ingredientes más eficaces para lograr el desempeño deseado, desde una perspectiva teórica.

GUIPEP es principalmente un programa de solución *de equilibrio químico*, es decir, que los saldos de las ecuaciones químicas sobre los reactivos y los productos de carburante por un método conocido como "la reducción al mínimo de energía libre de Gibbs". Los ingredientes (reactivos) que define el propulsor se transforman adiabática y de forma irreversible a las reacciones de los componentes del producto en las cantidades fijadas por las relaciones de equilibrio, la presión de la cámara, y el balance de masa a una temperatura de reacción fija por la disponibilidad de energía de la reacción. El conjunto resultante de los productos es la base para el cálculo de las propiedades termodinámicas de los parámetros de funcionamiento se determinan mediante un proceso iterativo para tener en cuenta para cambiar las propiedades del producto y la composición.

De entrada es simplemente una lista de ingredientes de propulsor (y la masa de cada uno), así como la presión de la cámara y la presión de salida de la boquilla. La producción Solver incluye la temperatura de combustión, exponente isoentrópica, el peso molecular de los productos, la temperatura del escape y la composición, el impulso específico, y la relación de expansión ideal.

Tenga en cuenta que los parámetros de tipo de quemaduras *no* son evaluadas, como velocidad de combustión es un fenómeno complejo que involucra muchos otros procesos físicos, además de la combustión, tales como el calor y la transferencia de masa entre la llama y la superficie de reacción de combustión del propulsante.

Análisis de los supuestos

Los supuestos básicos empleados por el programa de solución son mucho como se describe en los supuestos básicos:

- Un flujo unidimensional con respecto a la continuidad, la energía y el impulso ecuaciones
- La velocidad de flujo cero en la entrada de la boquilla
- La combustión completa y adiabática
- La expansión isoentrópica en la boquilla
- Mezcla homogénea de los reactivos y productos de
- Ley del gas ideal se aplica
- La temperatura cero y el retraso de la velocidad de los productos de la fase condensada

Uso GUIPEP

Hasta 10 componentes propulsores fueron escogidos por los cuadros desplegados, y la masa (en gramos) se introduce. La masa total no es necesario agregar hasta 100 gramos, pero esta es la forma más conveniente para introducir los datos, como la masa representa entonces el *porcentaje* de ese componente en particular.

Para eliminar cualquier elemento no deseado, el cero se introduce como la masa.

A **título** de la carrera es ingresada, y puede ser de hasta 10 caracteres de longitud.

Las **condiciones de funcionamiento** en general se dejan como los valores por defecto, a menos que exista alguna razón particular para modificar:

La temperatura de los ingredientes = 298 K (que es la temperatura ambiente, 25C).

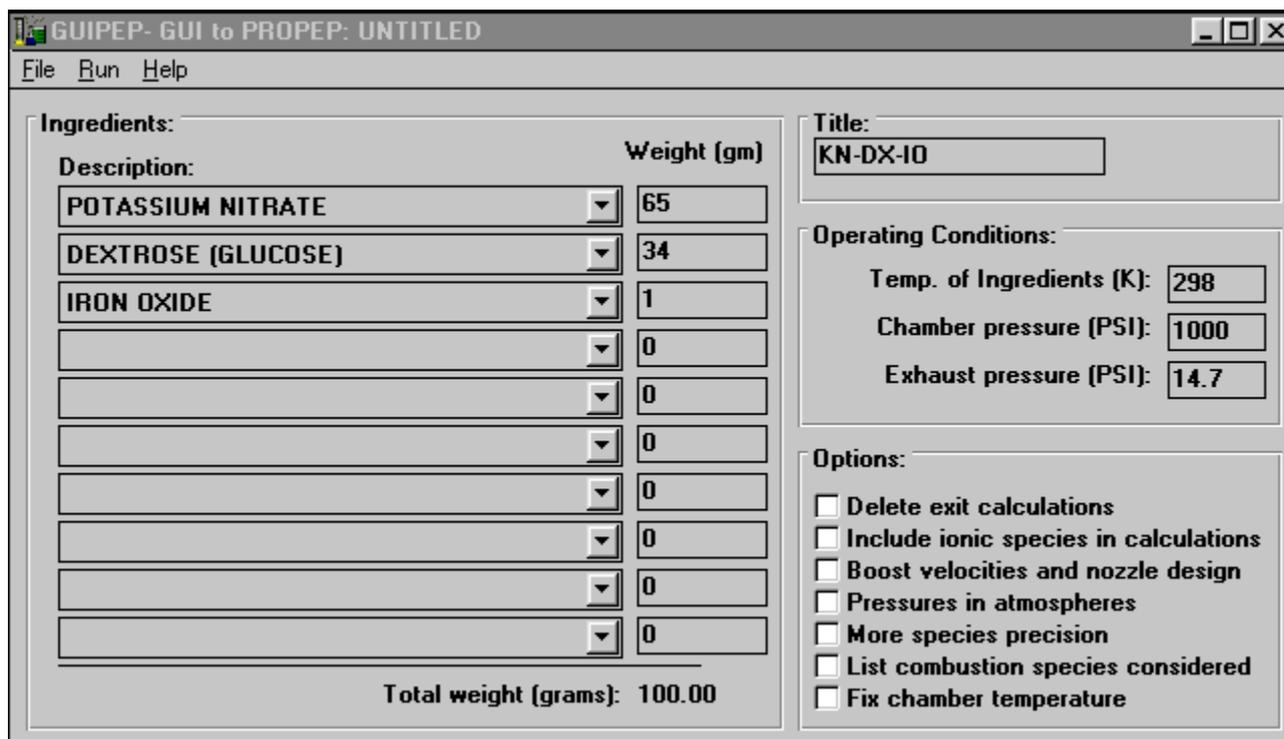
Cámara = presión de 1000 psi (que es la presión de referencia en el que se cita Isp).

De presión de escape = 14.7 psi (que es una atmósfera, la condición ideal de la expansión a nivel del mar).

En lo que se refiere a **las posibilidades**, ninguna necesidad de ser elegidos para la evaluación de carburante de base. Sin embargo, si el diseño de la boquilla está en estudio, compruebe el *Boost velocidades y la boquilla* cuadro de diseño.

El último paso es ejecutar el programa seleccionando *Ejecutar*, a continuación, en *Ejecutar individual*. Una ventana de DOS aparece a continuación, para permitir la ejecución del programa, que se inicia pulsando la tecla *Intro*. MS Bloc de notas aparece entonces, en la que se muestra la salida.

Una captura de pantalla de un ejemplo de pantalla de entrada GUIPEP se muestra a continuación:



Salida GUIPEP

La primera parte de la producción es básicamente un eco de los datos de entrada completa, como se muestra a continuación:

```

File Edit Search Help
■■ KN-DX-IO          Run using June 1988 Version of PEP,
Case 1 of 1        11 Aug 2001 at 9:14:10.68 pm

CODE              WEIGHT      D-H  DENS      COMPOSITION
821 POTASSIUM NITRATE      65.000  -1169  0.07670    1N  30  1K
1093 DEXTROSE (GLUCOSE)   34.000  -1689  0.05670    6C  12H  60
541 IRON OXIDE             1.000  -1230  0.18400    30  2FE

THE PROPELLANT DENSITY IS 0.06884 LB/CU-IN OR 1.9056 GM/CC
THE TOTAL PROPELLANT WEIGHT IS 100.0000 GRAMS

NUMBER OF GRAM ATOMS OF EACH ELEMENT PRESENT IN INGREDIENTS

2.264628 H      1.132314 C      0.642877 N      3.079730 O
0.642877 K      0.012523 FE

```

Algunos de los datos de entrada es automáticamente extraído del archivo de *pepcoded.daf*, que es un archivo de texto que contiene los datos de los ingredientes siguientes:

- Nombre del ingrediente
- Fórmula química
- "El calor de la formación" (que en realidad es el delta de entalpia de formación), en calorías / gramo
- Densidad de masa, en libras / pulgada cúbica

Estos datos se reflejan en la salida de arriba, donde DH es el "calor de la formación del delta", ENS D es la densidad de componentes, y C OMPOSICIÓN es la fórmula química. La densidad resultante de propulsor ideal también está dado, y se calcula según la siguiente ecuación:

$$\rho_p = \frac{1}{\frac{f_a}{\rho_a} + \frac{f_b}{\rho_b} + \frac{f_c}{\rho_c} + \dots}$$

ecuación 1

como se detalla en el propulsor Teoría de grano.

ENS por ejemplo, $D = 1 / (0.65/0.0767 + 0.34/0.0567 + 0.01/0.184) = 0,06884$ lb / in³.

El número de átomos gramo de cada elemento presente en los ingredientes se enumeran a continuación. Básicamente, esto indica cuántos *átomos* relativos de cada elemento están presentes en el caldero de los ingredientes que se combinan para formar los productos de la combustión. Aunque esta información es clave para el programa de solución, para que el usuario no responde a ningún propósito en particular. Para referencia, esto se calcula como la relación masa-peso molecular de un ingrediente en particular, multiplicado por el número de moles de un elemento particular, se suman para cada ingrediente.

La siguiente parte de la producción presenta las **condiciones de la cámara de combustión**, como se muestra a continuación:

```
*****CHAMBER RESULTS FOLLOW*****
T(K) T(F) P(ATM) P(PSI) ENTHALPY ENTROPY CP/CV GAS RT/U
1733. 2659. 68.02 1000.00 -134.64 163.44 1.1280 2.297 29.614

SPECIFIC HEAT (MOLAR) OF GAS AND TOTAL= 10.801 15.381
NUMBER MOLS GAS AND CONDENSED= 2.2970 0.3179

0.87508 H2O 0.41818 CO2 0.40865 CO 0.32138 N2
0.30541 K2CO3* 0.24164 H2 0.03037 KHO 0.01242 FeO*
1.30E-03 K 1.70E-04 K2H2O2 8.55E-05 FeH2O2 6.85E-05 NH3
1.80E-05 H 1.05E-05 KH 4.87E-06 KCN 3.75E-06 HO
2.13E-06 CH2O 2.12E-06 CH4 1.63E-06 CNH

THE MOLECULAR WEIGHT OF THE MIXTURE IS 38.243
```

La primera fila indica la **temperatura de combustión** (en grados Kelvin y F), la **presión de la cámara** como se especifica, la **entalpía** total de la mezcla (kcal / masa del sistema), la **entropía** total del sistema (cal / K / masa del sistema), **CP / CV**, la cual es la relación entre los calores específicos, **G AS** (número de moles de gas en la mezcla), y **T R / V** (un factor de conversión, que normalmente no se usa). Tenga en cuenta que la masa del sistema en este ejemplo es de 100 gramos.

Los únicos parámetros importantes aquí son:

La temperatura de combustión - También conocida como la *temperatura adiabática de llama*, y determinado por el método descrito en la combustión. En general, cuanto mayor sea la temperatura, mayor es el impulso específico. Las temperaturas más altas requieren carcasa más robusta y materiales de la boquilla, aislamientos, revestimientos o ablativo. Tenga en cuenta que la temperatura de la cámara es la *temperatura de estancamiento* que la boquilla "ver" y debe ser diseñado. Bajo temperaturas de combustión, como se predijo en este programa, no puede ser autosuficiente en la realidad. Por ejemplo, una formulación con una temperatura de la cámara prevista de 1000 K, probablemente no quemaría a todos.

CP / CV - La relación entre los calores específicos, k , para la mezcla en las condiciones de la cámara de combustión, este es el valor correcto a utilizar en el cálculo de velocidad característica (CEE-estrella) y presión de la cámara, como se describe en la anterior teoría. El valor de la CP / CV se calcula a partir de las siguientes ecuaciones:

$$k = \frac{Cp_{mix}}{Cp_{mix} - R} \quad \text{dónde} \quad Cp_{mix} = \frac{1}{n} \sum_i (n_i Cp_i + n_s C_s)$$

ecuaciones 2 y 3

G AS - El número de moles de productos de la combustión *de gases* en la mezcla de productos (que también puede contener fase condensada). Este valor se utiliza para calcular el peso molecular efectivo, M , de la mezcla de productos, que viene dado por la división del número de moles de gas en la masa del sistema. Para este ejemplo, $M = 100 / 2,297 = 43,54 \text{ g / mol}$. Este es el valor del peso molecular adecuado para utilizar en las ecuaciones de la dinámica de gases descrita en el anterior Teoría de páginas Web.

Las siguientes dos líneas proporcionan los valores del **calor específico molar** de los productos gaseosos, y de la mezcla, (cal / mol / K), y se proporcionan únicamente como referencia.

La siguiente línea proporciona los valores para el número de **moles de gas** (repetido) y el número de **moles de** los productos de **fase condensada**, que puede ser sólido o líquido. Esta información es de interés, ya que proporciona la (molar) la relación de gas o productos fase condensada.

Las siguientes líneas de salida tabular el número de **moles de cada componente de productos de la combustión**. Los nombres de productos seguidos de * son en fase líquida, y designa y en fase sólida, todos los demás están en fase gaseosa. Esta información permite al usuario calcular la *fracción de masa de la fase condensada*, que está dada por la masa de todos fase condensada dividido por la masa del sistema, y cuando la masa de cualquier componente viene dado por el *número de moles* multiplicado por el *peso molecular* de que lo constituyen.

por ejemplo, fracción de masa de fase condensada = [(0,30541) 138,2 + 0,01242 (71,9)] / 100 = 0,422

Muchos de los productos de combustión son en pequeñas cantidades, y desempeñan un papel insignificante en el proceso global. En el ejemplo anterior, los únicos productos importantes son H2O, K2CO3, CO2, H2, CO, N2 y tal vez KOH y FeO.

Para un mejor rendimiento, productos de bajo peso molecular son deseables, de tal manera que se minimice el peso molecular efectivo de la mezcla. Productos de bajo peso molecular en el ejemplo anterior sería H2O, H, H2, CH4, CO, NH3 y OH.

La siguiente línea en la parte de arriba de la salida da el peso molecular de la mezcla (a veces denota *MW*), que viene dada por la suma de la fracción molar de cada componente, multiplicada por su peso molecular, como se muestra a continuación:

$$M_{mix} = \sum_i f_{mi} M_i \quad \text{ecuación 4}$$

Este valor de peso molecular se debe descuidar, ya que no sirve para nada con respecto al rendimiento de cohetes.

La siguiente parte de la producción presenta las **condiciones tobera de escape**, como se muestra a continuación:

```

*****EXHAUST RESULTS FOLLOW*****
T(K)  T(F)  P(ATM)  P(Psi)  ENTHALPY  ENTROPY  CP/CV  GAS  RT/V
1169.  1646.  1.00    14.70   -161.60   163.44   1.1325  2.266  0.441

SPECIFIC HEAT (MOLAR) OF GAS AND TOTAL=  9.969  14.803
NUMBER MOLS GAS AND CONDENSED=  2.2656  0.3334

  0.77686 H2O          0.51521 CO2          0.35490 H2           0.32141 N2
  0.32090 K2CO3&     0.29614 CO           0.01250 FeO&        0.00101 KHO
  4.62E-05 K          1.17E-05 NH3        2.42E-06 CH4        1.75E-06 K2H2O2

THE MOLECULAR WEIGHT OF THE MIXTURE IS  38.475

```

El formato de estos resultados es idéntica a la de los resultados de cámara. Los valores representan las condiciones en el *plano de salida* de la boquilla.



Algunos puntos dignos de mención:

La temperatura de la combustión de productos se ha reducido de manera significativa, como la energía térmica se ha convertido en energía cinética. La temperatura de salida puede ser calculada a partir de *la ecuación 4* de la boquilla.

:

$$T_e = \frac{T_o}{1 + \frac{k-1}{2} M_e^2} \quad \text{dónde} \quad M_e = \sqrt{\frac{2}{k-1} \left[\left(\frac{P_o}{P_e} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right]}$$

ecuaciones 5 y 6

donde es la temperatura de la cámara, P_o / P_e es la cámara de relación entre la presión de salida, *de mí* es el número de Mach del flujo en la salida, y k es la CP / CV para las condiciones de escape. Tenga en cuenta que el valor dado en la salida es a las condiciones *cambiantes del equilibrio* que se explica más adelante.

Cámara de presión se ha reducido a una atmósfera, la condición de diseño.

Tanto CP / CV y el número de moles de gas ha cambiado ligeramente, reflejando los cambios de composición y temperatura de los gases de escape que fluye a través de la boquilla.

Asimismo, los calores específicos y el número de moles de las especies condensadas ha cambiado de Condiciones de la cámara.

La composición de los productos ha cambiado de una manera interesante. Tenga en cuenta que hay menos *oligoelementos*. Esta es la *disociación*, porque la temperatura es más baja y menos (ruptura en moléculas más simples) de los mayores compuestos se produce.

También tenga en cuenta que los productos líquidos que se han congelado en fase sólida.

La siguiente parte de la producción presenta el **rendimiento** de un motor de cohete equipado con este propulsor y la boquilla como se especifica:

```
*****PERFORMANCE:  FROZEN ON FIRST LINE, SHIFTING ON SECOND LINE*****
IMPULSE  IS EX      T*      P*      C*      ISP*  OPT-EX  D-ISP      A*M  EX-T
 151.6   1.1326   1625.   39.31   2967.9   114.3  10.22   288.9   0.09227  1057.
 153.2   1.1058   1647.   39.63   3025.2   114.3  10.82   291.9   0.09405  1169.
```

El rendimiento se da tanto para **congelados** y **Cambio de** las condiciones de equilibrio.

¿Qué significan estos términos? Equilibrio Congelado significa que la composición química de los gases de escape *no cambia* a medida que fluye a través de la boquilla (la composición del producto se establece en la cámara de combustión). El cambio de equilibrio se supone que el equilibrio químico instantánea se establece como el gas se expande a través de la boquilla, de "desplazamiento" de la composición de forma continua.

¿Por qué tanto los resultados previstos? Por el tiempo de residencia muy corto en la boquilla, no se sabe si hay o no tiempo suficiente para las reacciones químicas que ocurren realmente como predice el modelo de equilibrio cambiante. Geometría también desempeña un papel, como ya proporcionar más tiempo de boquillas de residencia.

Que resulta de usar? Para los motores de aficionados, donde boquillas son muy pequeñas en comparación con las grandes cohetes profesional, considero que el modelo de flujo de congelados para ser más realista. Para la tobera del motor cohete Kappa, he calculado el tiempo de duración para el flujo de pasar a través de la boquilla a 430 microsegundos!

En la parte de las prestaciones del producto, la primera fila presenta el impulso específico ideal (I MPULSE), exponente isoentrópica (I S EX), la temperatura del flujo en la garganta (T *) y la presión en la garganta (P *), característica de velocidad (C *), el impulso de vacío (I SP *), relación de expansión óptimo (O PT-EX), la densidad de Isp (D-ISP), área de la garganta a la tasa de flujo másico (A * M), y salir del plano de temperatura (EX-T).

La siguiente es una breve discusión de cada uno de los resultados:

Impulso ideal específico es la clave del "patrón" del potencial de rendimiento, y se puede considerar que se refieren el *empuje producido por una unidad de masa* (por ejemplo, 1 libra o kg) de combustible en un *tiempo de combustión de un segundo*. El impulso específico ideal puede determinarse a partir de la ecuación 7

$$I_{sp} = \frac{1}{g} \sqrt{2 T_o \left(\frac{R'}{M} \right) \left(\frac{k}{k-1} \right) \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_o} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right]}$$

la ecuación 7

donde *k* es en la media de la CP / CV cámara y las condiciones de escape, y *M* como la media de peso molecular efectivo para la cámara y las condiciones de escape.

El **exponente isoentrópica** es el mismo *k* o CP / CV para un gas perfecto ^k tal que PV = constante (P = presión V = volumen). Ya que el gas no es perfecta, los valores de la IS EX y CP / CV no está de acuerdo.

T * y P * son los llamados valores *críticos* de la temperatura del caudal y la presión en la velocidad del flujo es uno de Mach, es decir, en la garganta. Estos pueden calcularse a partir de las ecuaciones de 4 y 6.

Las unidades son Kelvin y atmósferas, respectivamente.

$$T^* = \frac{T_0}{1 + \frac{k-1}{2}} \quad y \quad P^* = \frac{P_0}{\left(1 + \frac{k-1}{2}\right)^{\frac{k}{k-1}}} \quad \text{ecuaciones 8 y 9}$$

C * es la velocidad de escape característica (CEE-star), con unidades de pies / seg. Este parámetro puede ser considerado como una figura de mérito termoquímico para un propulsor particular, y es dada por la ecuación 3:

$$c^* = \sqrt{\frac{R/M \cdot T_0}{k \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}}}$$

ecuación 10

ISP * es el impulso de vacío que se obtendría por una boquilla de sonido en el aire que respiran el trabajo del motor, y por lo tanto puede ser ignorada.

O PT-EX, la expansión óptima Ratio (A_e / A_t) es un parámetro importante en el diseño de la boquilla. Este valor define la relación del área de salida de la boquilla a la zona de la garganta, y, como tal, el tamaño de la divergencia de diámetro de cono de salida, donde

$D_e = D_t \sqrt{A_e / A_t}$. Esta relación puede determinarse a partir de la ecuación:

$$\frac{A_e}{A^*} = \frac{1}{\left(\frac{k+1}{2}\right)^{\frac{1}{k-1}} \left(\frac{P_e}{P_0}\right)^{\frac{1}{k}} \sqrt{\left(\frac{k+1}{k-1}\right) \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_0}\right)^{\frac{k-1}{k}}\right]}}$$

ecuación 11

donde k es el valor de la CP / CV para las condiciones de escape.

El impulso densidad específica, **D-ISP**, es un parámetro muy interesante. Se define como el producto de un impulso específico y el propulsor gravedad específica, o $m_e d = d_p I_{sp}$ (el peso específico es numéricamente igual a la densidad, en g / cc). Un valor alto de densidad I_{sp} sería importante que los diseños de motor compacto, donde el volumen es un lujo.

A * M ("A-estrella M") es la proporción del área de la boquilla garganta para flujo másico expresado como en ²-sec/lb. Realmente no sé lo que esto está destinado a ser utilizado para ...!

E XT es la temperatura de salida de la boquilla plano (Kelvin) y puede determinar a partir de *la ecuación 5* se mostraron anteriormente.

Comparación de las ecuaciones de rendimiento para GUIPEP

La siguiente tabla muestra una comparación interesante entre los resultados presentados por GUIPEP a los mismos resultados, calculado mediante el uso de las ecuaciones de rendimiento presentadas anteriormente, que son considerados como "aproximado". Sin embargo, los resultados están de acuerdo muy cerca.

Parameter		Eqn.	Calculated	GUIPEP
Characteristic velocity	c*	10	2966	2968
Specific Impulse	Isp	7	151.1	151.6
Opt. Expansion ratio	Ae/At	11	10.22	10.22
Critical temperature	T*	8	1629	1625
Critical pressure	P*	9	39.33	39.31
Exit plane temperature	T:	5	1058	1057

Limitaciones de GUIPEP

En cierta medida, la exactitud de los resultados depende de la JANNAF.DAT el archivo que contiene especies de reacción al calor de los datos de formación utilizados por el programa de solución. La lista de especies es de alcance limitado, y para las combinaciones inusuales de propulsor, los productos de reacción real no pueden estar presentes en la lista. El resultado es un fracaso del programa de solución, o resultados inexactos. Un buen ejemplo es el de zinc-propulsor de azufre, para el que GUIPEP no ofrece ninguna solución. La razón es que el principal producto de la combustión, sulfuro de zinc, no está presente en la lista de especies de reacción.

Como se mencionó en la introducción, la *velocidad de combustión de carburante* no es evaluada por GUIPEP, ni hay ninguna indicación a que en cuanto a si una mezcla carburante particular, se *auto-combustión*. Aunque es evidente que este tipo de evaluación está más allá del alcance o la intención de GUIPEP, este hecho debe tenerse en cuenta en la evaluación de un propulsor. Un buen ejemplo es el nitrato de amonio (AN), basado en los propulsores. Aunque GUIPEP se presenta típicamente números brillante para el rendimiento, en realidad, la velocidad de combustión suele ser tan lento que el propulsor se auto-extinción. Además, la adición de metales como el aluminio se encuentra

para aumentar significativamente el rendimiento de los propulsores de muchos, de acuerdo a los resultados de GUIPEP. Esto no suele ser el caso en la realidad, donde se deja la mayor parte del metal quemado a menos que la temperatura de reacción propulsor es muy alta y el tamaño de las partículas de metal es muy fino. Las limitaciones físicas también pueden invalidar un propulsor potencialmente prometedor. Alto contenido de sólidos de carga es a menudo previsto para mejorar el rendimiento, pero en la práctica, suele ser difícil de conseguir debido a las limitaciones de la adherencia de carpetas.

Otra limitación o deficiencia, se refiere a la predicción del rendimiento de los propulsores con un porcentaje significativo de las partículas de fase condensada en el escape (flujo de dos fases). El valor de la CP / CV y el exponente isoentrópica utilizados por el programa de solución GUIPEP para la determinación de todos los parámetros de rendimiento se calculan para un gas *mezcla* de partículas, como se muestra en *la ecuación 1*. Sin embargo, para el flujo a través de la boquilla, un exponente de isoentrópica vez se debe utilizar, dada por *la ecuación 2* en la página web de referencia. Para los propulsores con una mínima fracción de la fase condensada (por ejemplo, <10%), el efecto global es probablemente insignificante. Pero para un propulsor como KN-sacarosa, donde la fracción de la fase condensada es muy alta (44%), el efecto neto es más significativo. Como ejemplo, el valor de la cámara del exponente isoentrópica calculado por *la ecuación 2* es $k = 1,04$, mientras que el valor dado por *la ecuación 1* y GUIPEP es $k = 1,13$. La diferencia en el impulso ideal específico es $I_{sp} = 166$ seg. frente $I_{sp} = 153$ seg., respectivamente.