



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

AUTORIZAÇÃO PARA PUBLICAÇÃO
AUTHORIZATION FOR PUBLICATION

AUTORES AUTHORS	PALAVRAS CHAVES/KEY WORDS	AUTORIZADA POR/AUTHORIZED BY
	HIDRAZINA REATORES DE LEITOS CATALÍTICOS ESCOAMENTO REATIVO EM MEIOS HETEROGÊNEOS	<i>[Signature]</i> Marco Antônio Baupp Diretor Geral

AUTOR RESPONSÁVEL RESPONSIBLE AUTHOR	DISTRIBUIÇÃO/DISTRIBUTION	REVISADA POR / REVISED BY
<i>[Signature]</i> Sônia M. Gomes	☐ INTERNA / INTERNAL ☒ EXTERNA / EXTERNAL ☐ RESTRITA / RESTRICTED	

CDU/UDC	DATA / DATE
519.872:66.097.1	Novembro 1988

TÍTULO/TITLE	PUBLICAÇÃO Nº PUBLICATION NO	ORIGEM ORIGIN	
	INPE-4738-PRE/1413	LAC	
AUTORES/AUTHORSHIP	SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE MODELO TRANSIENTE DE MICRO-PROPULSORES A HIDRAZINA	PROJETO PROJECT	
		SIMULA	
		Nº DE PAG. NO OF PAGES	
		ULTIMA PAG. LAST PAGE	
		10	04
		VERSÃO VERSION	Nº DE MAPAS NO OF MAPS

RESUMO - NOTAS / ABSTRACT - NOTES
Neste trabalho estudamos o comportamento transiente de um micro-propulsor a decomposição catalítica da hidrazina. Consideramos um modelo simplificado mediante a hipótese de resposta quasi-estacionária na fase gasosa e tempo de pressurização pequeno em relação à inércia térmica do catalisador. Descrevemos um algoritmo numérico para integrar o sistema de equações diferenciais resultante e apresentamos os resultados para o regime contínuo de operação.

OBSERVAÇÕES / REMARKS
* Facultad de Ingenieria, UNAM, México. Submetido para apresentação no II Encontro Nacional de Ciências Térmicas - ENCIT 88, 6 a 8 de dezembro de 1988, Águas de Lindóia - SP.

ABSTRACT

Analytical and numerical studies of catalysed hydrazine decomposition reaction chamber are performed in order to establish procedures capable of predicting the transient behavior of the system in continuous operation. We base our analysis on a simplified model which takes into account the main aspects of the process. We develop an implicit finite differences algorithm to integrate the resulting non linear balance equations. We show the results of calculations for standard bed configuration and operation conditions.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
1 - INTRODUÇÃO	1
2 - O MODELO	1
3 - VARIÁVEIS ADIMENSIONAIS	2
4 - O ALGORITMO NUMÉRICO	2
5 - OS RESULTADOS NUMÉRICOS	3
6 - COMPORTAMENTO TRANSIENTE DO MICRO REATOR	3
REFERÊNCIAS	3

RESUMO

Neste trabalho estudamos o comportamento transiente de um micro-propulsor a decomposição catalítica da hidrazina. Consideramos um modelo simplificado mediante a hipótese de resposta quasi-estacionária na fase gasosa e tempo de pressurização pequeno em relação à inércia térmica do catalisador. Descrevemos um algoritmo numérico para integrar o sistema de equações diferenciais resultante e apresentamos os resultados para o regime contínuo de operação.

INTRODUÇÃO

Micro-propulsores a hidrazina são frequentemente utilizados no controle de órbita e atitude de satélites artificiais. O terceiro satélite da Missão Espacial Completa Brasileira, previsto para ser lançado em 1993, utilizará este tipo de propulsão.

A figura 1 mostra um diagrama simplificado de um micro-propulsor. Consiste basicamente de um injetor, um leito fixo carregado com partículas de catalisador e uma tubeira convergente-divergente. As partículas são de alumina porosa impregnada de irídio, que é o catalizador propriamente dito. A hidrazina líquida (N_2H_4) é injetada no leito catalítico onde se decompõe gerando uma mistura de gases a alta temperatura que ao acelerar-se através da tubeira dá como resultado o empuxo desejado.

Inicialmente, no controle de órbita, o sistema propulsivo é operado em forma contínua e, posteriormente, no controle de atitude, em forma de pulsos. Daí em tão a necessidade de se ter um modelo transiente. Em [2] apresentamos um modelo simplificado que reflete as principais características do processo e estudamos o caso estacionário. Neste trabalho, apresentamos um algoritmo para integrar numericamente o sistema de equações diferenciais resultantes e mostramos os resultados para o regime transiente contínuo. Este algoritmo está sendo adaptado para o caso de regime pulsado.

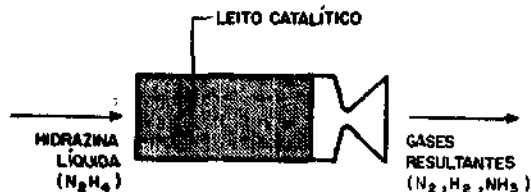
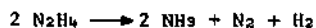


Figura 1. Esquema simplificado de um micro-propulsor.

O MODELO

Dentro das condições normais de operação, o processo de decomposição catalítica pode ser representado em dois passos. O primeiro é a decomposição exotérmica da hidrazina



Esta reação é tão rápida que a taxa de reação é controlada pela difusão da hidrazina através da camada gasosa que circunda as partículas. O segundo passo é a decomposição da amônia



que é mais lenta e só é importante quando a temperatura do catalizador for suficientemente alta.

Devido à complexidade do processo foi formulado um modelo simplificado que reflete os aspectos mais significativos (cf. [2]). É um modelo unidimensional. São consideradas equações tanto para a fase gasosa quanto para a fase sólida (o catalisador) sendo que a temperatura e a concentração dos gases são assumidas constantes no interior das partículas. O transporte de calor e massa dos interstícios para a superfície do catalisador ocorre por difusão, representado por meio de coeficientes de transferência, sendo contrabalanceado pela taxa de reação catalítica. Não são consideradas difusão axial de calor e massa, decomposição homogênea da hidrazina nem perda de calor através das paredes do reator. Todos os coeficientes de transferência, calores específicos e de reação são considerados constantes. É assumida ainda resposta quasi-estacionária na fase gasosa, tempo de pressurização muito pequeno em relação ao tempo de aquecimento do catalisador e vazão de massa constante.

Na entrada do reator exista uma pequena região onde a hidrazina líquida é vaporizada. O nosso modelo começa onde esta região termina. Assim começamos com uma mistura gasosa a uma temperatura igual a T_b , a temperatura de vaporização da hidrazina correspondente à pressão do reator. A fração de massa da hidrazina Y_b^I neste ponto pode ser calculada pela correlação

$$Y_b^I = 0,87 - 0,0006T_b$$

obtida a partir do balanço global da energia necessária para a vaporização e para elevar a temperatura até T_b . As frações de massa dos demais componentes são determinadas pela estequiometria da decomposição da hidrazina (a decomposição da amônia ainda não é significativa) (cf. [1]).

As equações resultantes são as seguintes.
Energia na fase gasosa:

$$Gc_p \frac{\partial T}{\partial x} = -hA(T-T_g)$$

. Energia no sólido:

$$\rho_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} = - \left[H^1 r_{het}^1 + H^2 r_{het}^2 \right] + \frac{3h}{r} (T - T_s)$$

. Concentração dos reagentes na fase gasosa:

$$G \frac{\partial Y^1}{\partial x} = - k^1 A (Y^1 - Y_s^1)$$

$$G \frac{\partial Y^2}{\partial x} = - k^2 A (Y^2 - Y_s^2)$$

. Interface sólido-gás:

$$r_{het}^1 = \frac{3k^1}{r} (Y^1 - Y_s^1)$$

$$r_{het}^2 - \frac{17}{32} r_{het}^1 = \frac{3k^2}{r} (Y^2 - Y_s^2)$$

. Equação de estado:

$$P = \frac{\rho RT}{M}$$

mais a condição inicial

$$T_s = T_s^0 \quad \text{em } t = 0,$$

e as condições de contorno

$$T = T_b, \quad Y^1 = Y_b^1 \text{ e } Y^2 = Y_b^2 \text{ em } x = 0$$

Nas equações acima T é temperatura Y é fração de massa e ρ é densidade. O subíndice s refere-se ao sólido, b às condições de vaporização e superíndice 0 às condições iniciais. Os superíndices 1 e 2 referem-se à hidrazina e à amônia respectivamente. As constantes A , r , c_p , h , k e H denotam a superfície do catalizador por unidade de volume, raio médio das partículas, calor específico, coeficiente de transferência de calor, de massa e calor de reação respectivamente. G é a vazão de massa, R é a constante dos gases, M é o peso molecular médio da mistura gasosa, P é a pressão de operação do reator e r_{het} denota taxa de reação catalítica. x é a distância axial ao longo do leito catalítico e t é o tempo.

Observações. 1) Não é necessário considerar equações para o hidrogênio e nitrogênio pois suas frações de massa podem ser obtidas como combinações lineares das frações de massa da amônia e da hidrazina. 2) Lembrando que a reação catalítica da hidrazina é extremamente rápida, podemos assumir que $Y_s^1 = 0$. 3) A taxa de reação da amônia, segundo [3], pode ser considerada igual a

$$r_{het}^2 = 10^{-14} \rho_s^2 \exp(-27778/T_s) \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$$

VARIÁVEIS ADIMENSIONAIS

É conveniente introduzir as seguintes variáveis adimensionais:

$$\theta = \frac{(T - T_b) c_p}{(-H)^1 Y_b^1} \quad \theta_s = \frac{(T_s - T_b) c_p}{(-H)^1 Y_b^1}$$

$$\psi = \frac{32 k^2 Y_s^2}{17 k^1 Y_b^1} \quad \psi_s = \frac{32 k^2 Y_s^2}{17 k^1 Y_b^1}$$

$$\phi = \frac{Y^1}{Y_b^1} \quad \zeta = \frac{\rho}{\rho_b}$$

$$Z = \frac{x}{L_c} = \frac{Ahx}{Gc_p} \quad \text{e } \tau = \frac{3h}{r\rho_s c_p} t$$

As equações adimensionais correspondentes são

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = -(\theta - \theta_s) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = \alpha \left(\phi - \omega D \tau \exp \left[\frac{-Z(\alpha - \theta_s)}{(1 + \beta \alpha)(1 + \beta \theta_s)} \right] \right) \psi_s + (\theta - \theta_s) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial Z} = -\alpha \phi \quad (3)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial Z} = -\mu (\psi - \psi_s) \quad (4)$$

$$(\psi - \psi_s) = D \tau \exp \left[\frac{-Z(\alpha - \theta_s)}{(1 + \beta \alpha)(1 + \beta \theta_s)} \right] \psi_s - \phi \quad (5)$$

$$\theta(0, \tau) = 0, \phi(0, \tau) = 1, \psi(0, \tau) = \psi_b \text{ e } \theta_s(x, 0) = \theta_s^0 \quad (6)$$

α , μ , β , ω , D e Z são parâmetros adimensionais. $D \ll 1$ é o número catalítico de Damkohler e $Z \gg 1$ é o número de Zeldovich.

Observações. 1) Da equação (3) e da condição de contorno, segue-se que $\phi(z, \tau) = \phi(z) = \exp(-\alpha z)$. 2) É conveniente escrever a equação (5) na forma

$$\psi_s = \frac{\psi + \phi}{1 + \zeta F(\theta_s)}$$

$$\text{onde } F(\theta_s) = D \exp \left[\frac{-Z(\alpha - \theta_s)}{(1 + \beta \alpha)(1 + \beta \theta_s)} \right]$$

O ALGORITMO NUMÉRICO

Para calcular a solução do sistema acima em um determinado nível de tempo τ consideramos subníveis intermediários $0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_M = \tau$ e adotamos um método implícito de discretização usando aproximação de Euler retardada para a derivada no tempo. Conhecendo o valor das variáveis em um nível m o valor no nível $m+1$ deve satisfazer a seguinte versão semi-discreta do sistema (1)-(6):

$$\frac{d\theta^{m+1}}{d\tau} = -(\theta^{m+1} - \theta_s^{m+1})$$

$$\frac{\theta^{m+1} - \theta^m}{\Delta\tau^{m+1}} = \alpha \phi - \alpha \omega \zeta^{-m} \frac{\psi^{m+1} + \phi}{1 + \zeta^m F(\theta_s^{m+1})} F(\theta_s^{m+1})$$

$$\frac{d\psi^{m+1}}{dZ} = -\mu \psi^{m+1} + \mu \frac{\psi^{m+1} + \phi}{1 + \zeta^m F(\theta_s^{m+1})}$$

$$\theta^{m+1}(0) = 0, \quad \psi^{m+1}(0) = \psi_b$$

para $m = 0, 1, 2, \dots, M-1$, onde $\Delta\tau^{m+1} = \tau^{m+1} - \tau^m$.

Usamos aqui a notação $g^m(z) = g(z, t^m)$. Agora consideramos uma rede de pontos equidistantes na variável z , $M = \{0 = z_0 < z_1 < \dots < z_N = z\}$ onde $z = L/L_c$ e aproximamos as derivadas na variável z por diferenças finitas da forma

$$\left(\frac{dg}{dz}\right)_j = \frac{g_j - g_{j-1}}{\delta}$$

onde $\delta = z/N$ (O subíndice j representa que estamos tomando o valor da função em $z = z_j$). Desta maneira, o nosso problema consiste em determinar θ_j^{m+1} , ψ_j^{m+1} e v_j^{m+1} para $m = 1, 2, \dots$ tais que

$$\theta_j^{m+1} (1+\delta) - \theta_{j-1}^{m+1} - \theta_{s_j}^{m+1} = 0$$

$$\theta_{s_j}^{m+1} (1+\Delta^{m+1}) - \theta_j^{m+1} = \Delta^{m+1} \alpha \phi_j + \theta_{s_j}^m -$$

$$\Delta^{m+1} \alpha \omega \zeta_j^m \frac{\psi_j^{m+1} + \phi_j}{1 + \zeta_j^m F(\theta_{s_j}^{m+1})} F(\theta_{s_j}^{m+1})$$

$$v_j^{m+1} (1+\mu\delta) - v_{j-1}^{m+1} = \delta \mu \frac{\psi_j^{m+1} + \phi_j}{1 + \zeta_j^m F(\theta_{s_j}^{m+1})},$$

mais as condições de contorno. A segunda das equações acima é válida para $j \geq 1$ e a primeira e a terceira para $j \geq 2$.

Observação. Para usar este algoritmo, e como só temos valores iniciais para θ_s , necessitamos inicializar as outras variáveis. Para $\theta_s = \theta_s^0$ e desprezando a decomposição da amônia ($F(\theta_s) \approx 0$), a escolha natural é

$$\theta = \theta_s^0 [1 - \exp(-z)],$$

$$\psi = \frac{\mu}{\alpha} [1 - \exp(-\alpha z)] + \psi_b \text{ e } \psi_s = \psi + \phi.$$

Denotamos $V^m = (v_i^m)_{i=1,2,\dots,3(N+1)}$ o vetor definido por

$$v_{3j} = v_j^m, v_{3(j-1)} = \theta_{s_j} \text{ e } v_{3(j-2)} = \theta_j,$$

$j = 1, 2, \dots, N+1$. Desta maneira, V^{m+1} é a solução de um sistema de equações não lineares da forma

$$M V^{m+1} = R(V^m) + H(V^{m+1}). \quad (7)$$

M é uma matriz $3(N+1) \times 3(N+1)$ com apenas 5 diagonais não identicamente nulas, $H(V^{m+1})$ corresponde aos termos não lineares que aparecem no segundo membro das equações e $R(V^m)$ é um vetor que depende apenas de V^m . Para resolver (7) usamos o método iterativo de Newton: a partir de um valor inicial V^{m+1} , que tomamos igual a V^m , calculamos V_k^{m+1} a solução do sistema linear

$$\left(M - \frac{\partial H}{\partial V}(V_k^{m+1})\right)(V_k^{m+1} - V_{k-1}^{m+1}) = R(V^m) - M V_{k-1}^{m+1} + H(V_{k-1}^{m+1})$$

para $k = 1, 2, \dots$ até que o erro de iteração $\|V_k^{m+1} - V_{k-1}^{m+1}\|$ seja suficientemente pequeno. Usamos também um critério adaptativo na escolha de Δ^{m+1} baseado na convergência do método de Newton no passo m .

REFERÊNCIAS

- [1] Crespo A., Fraga E., Muñoz A. "Steady state behavior of hydrazine catalytic thrusters". Report AFOSR-TR 75-1238. Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial "Esteban Terrados", Madrid, 1975.
- [2] Gomes, S.M., Pavlu, L.C., Treviño, C. "Modelo Transitorio Simplificado de um micro propulsor a hidrazina". 3er Congreso Latinoamericano de Transferencia de Color y Materia. Guanajuato, México, 4-8 de 1988.
- [3] Kesten, A.S. Analytical study of catalytic reactors for hydrazine decomposition. Report NASA E910461-6 1966, F910461-12 1967, G910461-24 1968 e H910461-38 1969.
- [4] Bird, R.B., Stewart W.E. e Lightfoot E.N. "Transport Phenomena". John Wiley & Sons, Inc., New York, 1960.

OS RESULTADOS NUMÉRICOS

Apresentamos a seguir os resultados numéricos obtidos usando a seguinte configuração: o leito catalítico possui um comprimento $L = 2,5$ cm e todas as partículas são de Shell 405 20-30 mesh; a pressão de operação é 15 bar e a vazão de massa é $17,5$ kg/m².sec; a temperatura inicial do leito é assumida constante igual a 400°K .

Os coeficientes de transferência de calor e massa dependem de várias variáveis entre as quais as propriedades dos gases, a geometria do sistema e a velocidade do escoamento. Calculamos h e k usando as equações ([4] e [3]):

$$h = 0.74(\text{Re})^{-0.41} c_p G \quad \text{J/m}^2.\text{sec}$$

$$k^i = 0.61 G(\text{Re})^{-0.41} (\text{Sc}^i)^{-2/3} \quad \text{kg/m}^2.\text{sec},$$

onde $i = 1, 2$, $\text{Re} = \frac{G}{\mu}$ e $\text{Sc}^i = \frac{\mu}{\rho D^i}$. μ é a viscosidade da mistura gasosa e D^i é o coeficiente de difusão binária do gás i na mistura gasosa. Nos cálculos usamos valores médios tanto para c_p quanto para μ e D^i .

As figuras abaixo mostram como a temperatura do sólido, a temperatura do gás e as frações de massa dos componentes evoluem com o tempo.

COMPORTAMENTO TRANSIENTE DO MICRO REATOR

- - Temperatura na fase gasosa
- - Temperatura no sólido
- ◆ - Fração de massa de N_2H_4 na fase gasosa
- ◇ - Fração de massa de NH_3 na fase gasosa

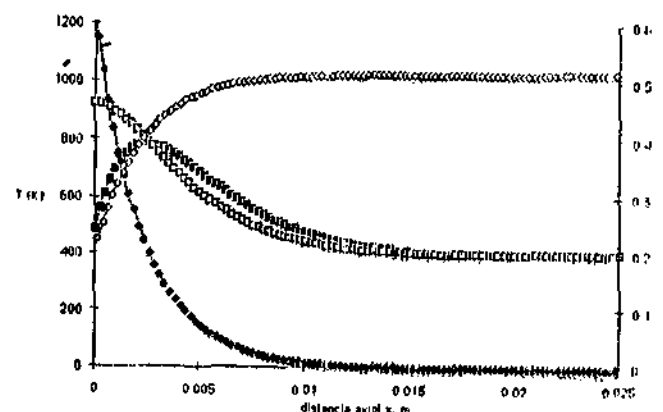


Figura 2 - Tempo = 0.06 segundos

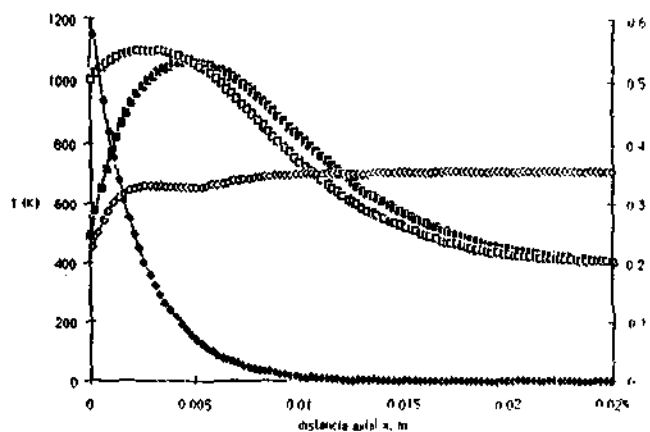


Figura 3 - Tempo = 0.18 segundos

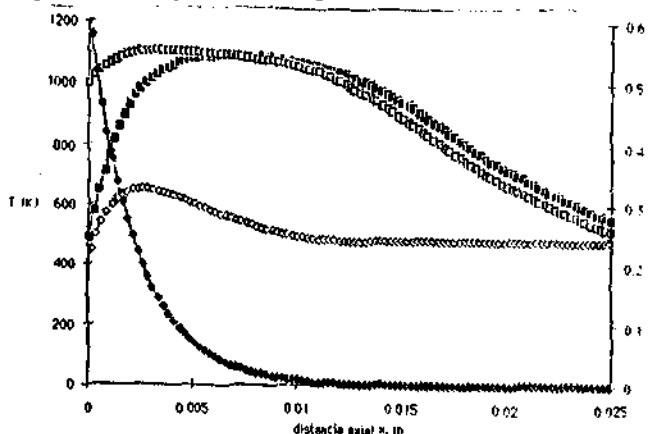


Figura 4 - Tempo = 0.35 segundos

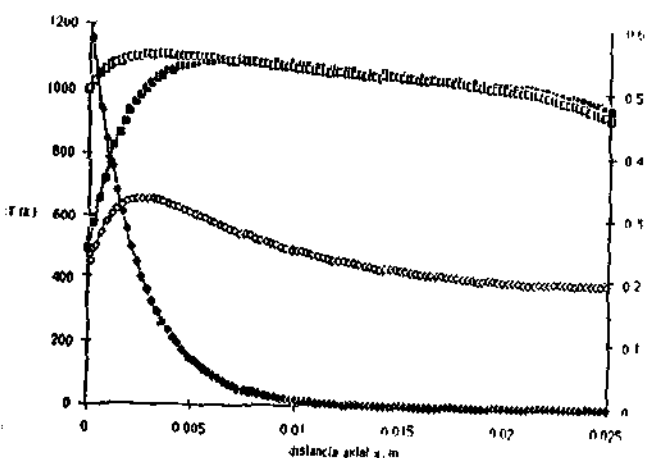


Figura 5 - Tempo = 0.65 segundos

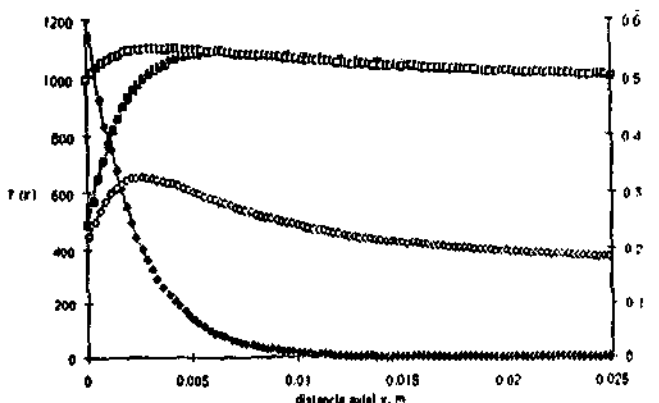


Figura 6 - Tempo = 0.88 segundos

Os resultados refletem bem as hipóteses feitas no modelo. Como podemos observar, a decomposição da hidrazina se concentra no início do reator. O calor liberado por esta reação química na superfície do catalisador faz a temperatura do sólido crescer rapidamente nesta região. Há então um fluxo de calor do sólido para o gás devido a diferença de temperaturas. O gás aquecido, por sua vez, irá aquecer as partículas do catalisador do final do leito onde quase não existe hidrazina se decompondo. A fração de massa da amônia cresce inicialmente devido à decomposição da hidrazina mas depois, quando a temperatura do sólido é suficientemente alta e a decomposição da amônia passa a ser significativa, a fração de amônia começa a decrescer ao longo do leito. Por sua vez, por ser endotérmica, a decomposição catalítica da amônia fará com que a temperatura no sólido diminua. Isto significa que, mesmo aumentando o comprimento do leito, não haveria uma decomposição total da amônia.

ABSTRACT

Analytical and numerical studies of catalysed hydrazine decomposition reaction chamber are performed in order to establish procedures capable of predicting the transient behavior of the system in continuous operation.

We base our analysis on a simplified model which takes into account the main aspects of the process.

We develop an implicit finite differences algorithm to integrate the resulting non linear balance equations.

We show the results of calculations for standard bed configuration and operation conditions.



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS

PROPOSTA PARA
PUBLICAÇÃO

- ☐ DISSERTAÇÃO
☐ TESE
☒ RELATÓRIO
☐ OUTROS

TÍTULO

Simulação numérica de modelo transiente de micro
propulsores a hidrazina

IDENTIFICAÇÃO

AUTOR(ES)

Serie M. Jones
Cesar Gavina

ORIENTADOR

CO-ORIENTADOR

DIVULGAÇÃO

- ☒ EXTERNA ☐ INTERNA ☐ RESTRITA
EVENTO/MEIO
☒ CONGRESSO ☐ REVISTA ☐ OUTROS

LIMITE

DEFESA

CURSO

ORGÃO

— / — / —

— / — / —

NOME DO REVISOR

NOME DO RESPONSÁVEL

REV. TÉCNICA

RECEBIDO

DEVOLVIDO

ASSINATURA

— / — / —

— / — / —

APROVADO

DATA

ASSINATURA

☐ SIM
☐ NÃO

— / — / —

REV. LINGUAGEM

Nº

PRIOR.

RECEBIDO

NOME DO REVISOR

PÁG.

DEVOLVIDO

ASSINATURA

— / — / —

OS AUTORES DEVEM MENCIONAR NO VERSO INSTRU-
ÇÕES ESPECÍFICAS, ANEXANDO NORMAS, SE HOUVER

RECEBIDO

DEVOLVIDO

NOME DA DATILÓGRAFA

29/09/88

mylene

AUTORIZO A PUBLICAÇÃO

Nº DA PUBLICAÇÃO:

PÁG.:

CÓPIAS:

Nº DISCO:

LOCAL:

☐ SIM

☐ NÃO

— / — / —

DISS. OU TESE

APROVAÇÃO

DATILÓGRAFA

DIRETOR

OBSERVAÇÕES E NOTAS

Submetido pt II ENCIT 88