

An Investigation on the Effect of Chemical Kinetics Mechanisms in the Modeling of Combustive Gaseous Oxidizer Flow on a Solid Fuel Surface

M. Ahangar^{1*} and R. Ebrahimi²

1,2. Department of Aerospace Engineering, K. N. Toosi University of Technology

*Eastern Vafadar St. Tehranpars, Tehran, IRAN

mahdy700@yahoo.com

In this study, the combustion process of gaseous Oxygen on the surface of HTPB solid fuel has been investigated. To simulate the chemically reactive flow, Navier-Stokes equations and species transport equations were solved using LU-SW implicit scheme. Modeling this kind of combustion process demands a deep understanding of the pyrolysis phenomenon on the solid fuel surface. Experimental studies conducted in this field show that the main gaseous product of the pyrolysis process is C_4H_6 . An experimental equation which is dependent to the temperature of the fuel surface is used to determine the gas production rate during pyrolysis process. The temperature of the fuel surface can be obtained by applying energy equation in gas-solid interface. The combustion process of gaseous Oxygen and C_4H_6 has been described by two quasi-global chemical kinetics models. According to the obtained results, the main characteristic parameters of combustive flow such as the flame temperature and mass fraction of chemical species are strongly affiliated to the applied chemical kinetic model. Finally, the results of modeling based on two different models of chemical kinetics are presented and solid fuel surface regression rate is compared with other numerical results.

Keywords: hybrid combustion process, numerical modeling, regression rate, solid fuel pyrolysis, chemical kinetics model.

1. PhD. Student (Corresponding Author)
2. Associate Professor

بررسی اثر سینتیک شیمیایی در مدل سازی جریان محترق اکسندۀ گازی بر روی سوخت جامد

مهدی آهنگر^{۱*} و رضا ابراهیمی^۲

۱ و ۲- دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

*تهران، فلکه چهارم تهرانپارس، خ. وفادارشرقی

mahdy700@yahoo.com

در این پژوهش مکانیزم احتراق اکسیژن گازی بر روی سطح سوخت جامد HTPB مطالعه شده است. به منظور شبیه سازی جریان محترق، معادلات ناویر-استوکس و انتقال اجزای شیمیایی با استفاده از روند ضمنی LU-SW حل شده است. مدل سازی این نوع فرآیند احتراقی نیازمند شناخت پدیده پیرولیز در سطح سوخت جامد است. مطالعات تجربی صورت گرفته در این زمینه بیانگر آن است که جزء شیمیایی C_4H_6 عمده محصول گازی حاصل از فرآیند پیرولیز است. به منظور تعیین نرخ تولید محصولات گازی حاصل از فرآیند پیرولیز، از یک رابطه تجربی استفاده شده است که خود تابع دمای سطح سوخت است. دمای سطح سوخت را نیز می توان با نوشتن معادله انرژی در سطح مشترک گاز- جامد محاسبه کرد. مکانیزم احتراق بین اکسیژن گازی و هیدروکربن C_4H_6 توسط دو مدل سینتیک شیمیایی شبه کلی توصیف شده است. نتایج نشان می دهند که مشخصه های اصلی جریان محترق مثل دمای شعله و کسر جرمی محصولات به شدت به مدل سینتیکی در نظر گرفته شده وابسته اند. در نهایت، نتایج حاصل از مدل سازی بر اساس هر دو مدل سینتیک شیمیایی ارائه شده و نرخ پسروری سطح سوخت جامد با دیگر نتایج عددی مقایسه شده است.

واژه های کلیدی: احتراق هیبریدی، مدل سازی عددی، نرخ پسروری، پیرولیز سوخت جامد، مدل سینتیک شیمیایی

فهرست علائم

$\Delta H_{f,i}^\circ$	آنتالپی تشکیل جز شیمیایی i -ام	\dot{r}	نرخ پسروری سطح سوخت جامد
Y_i	کسر جرمی جز شیمیایی i -ام	A	ثابت تجزیه
$C_{p,i}$	گرمای ویژه جز شیمیایی i -ام در فشار ثابت	E_a	انرژی فعال سازی
Q_{tot}	مقدار کل حرارت انتقال یافته به سطح سوخت جامد	R_u	ثابت جهانی گازها
		T_s	دمای سطح سوخت جامد
		ρ_g	چگالی محصولات گازی حاصل از پیرولیز
		ρ_f	چگالی سوخت جامد
		v_g	سرعت محصولات گازی حاصل از پیرولیز
		k_g	ضریب هدایت حرارتی محصولات گازی حاصل از پیرولیز

مقدمه

احتراق جریان اکسندۀ گازی بر روی سطح سوخت جامد که به احتراق هیبریدی نیز موسوم است، یکی از مکانیزم هایی است که در فرآیند احتراق برخی سیستم های هوافضایی به کار گرفته می شود. از نمونه های این سیستم ها می توان به احتراق در موتورهای موشک هیبریدی، عایق های فناشونده درون نازل ها و پوشش های محافظ فیرینگ ماهواره برها اشاره کرد. در این فرآیند احتراقی، بر اثر عبور جریان اکسندۀ گازی بر روی سطح سوخت جامد و واکنش شیمیایی

۱. دانشجوی دکتری (نویسنده مخاطب)

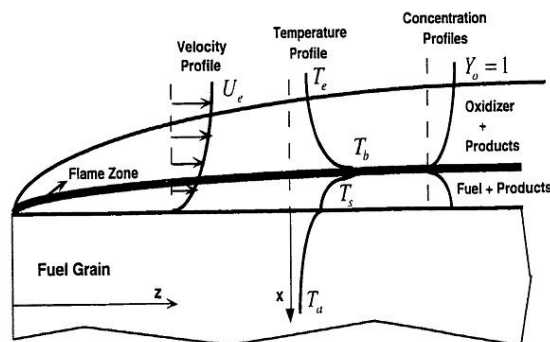
۲. دانشیار

حاصل از این جریان با اجزای شیمیایی حاصل از پیرولیز سوخت، یک شعله نفوذی در مجاورت سطح سوخت جامد و در ناحیه داخلی لایه مرزی شکل می‌گیرد. به دلیل نفوذی بودن ساختار شعله در موتورهای هیبریدی، فرآیندهایی نظیر تراک و انفجار که اغلب در شعله‌های پیش مخلوط موجود در موتورهای سوخت مایع و جامد دیده می‌شود، وجود ندارد. شکل (۱) مکانیزم فرآیند احتراق هیبریدی را برای سوخت‌های غیرفلزی (بدون اثر تابش) نشان می‌دهد. انتقال حرارت از منطقه شعله به سطح سوخت، باعث تأمین انرژی مورد نیاز برای شکست پیوندهای شیمیایی موجود در سوخت پلیمری می‌شود و به تبع آن سوخت تبخیر می‌گردد. بخار سوخت به سمت بالا جابه‌جا می‌شود و به طرف منطقه شعله حرکت می‌کند و از طرف دیگر جریان آزاد اکسنده (هسته جریان) نیز به منطقه شعله نفوذ می‌کند و از برخورد این دو توده در ناحیه داخلی لایه مرزی واکنش شیمیایی رخ می‌دهد و شعله برقرار می‌شود. ضخامت شعله عمدتاً توسط نرخ واکنش اکسیداسیون تعیین می‌شود. این نرخ تا حد زیادی به فشار و رابطه آرنیوس وابسته است.

همان‌طور که در شکل (۱) دیده می‌شود، منطقه احتراق در بالادست گرین سوخت با شعله‌ای باریک که در داخل لایه مرزی تشکیل می‌گردد، محدود می‌شود. فاکتورهای اثر گذار بر توسعه لایه مرزی در گرین سوخت و به نوعی مشخصه‌های پسروری گرین سوخت عبارتند از:

- ۱- فشار
- ۲- دمای گاز
- ۳- ترکیبات گرین سوخت
- ۴- شار جرمی عبوری از پورت‌های احتراقی
- ۵- طول پورت احتراقی

به‌طور کلی کارهای عددی صورت گرفته در زمینه مدل‌سازی و تحلیل مکانیزم احتراق هیبریدی محدود هستند. پژوهش‌های اولیه صورت گرفته در این زمینه، حاوی تحلیل‌هایی هستند که با به‌کارگیری مفاهیم اصول تئوری لایه مرزی، برای یک جریان محترق روی سطح سوخت جامد بسط داده شده‌اند. اولین پژوهش در این زمینه توسط مارکس من [۲] انجام شد. وی توانست با تعیین شار حرارتی به سطح، رابطه‌ای برای نرخ پسروری تعیین کند. در سال ۱۹۷۰، اُمری [۳] با استفاده از تشابه رایلی معادلات دوبعدی لایه مرزی را برای جریان محترق حل کرد. مجدولانی از دیگر محققانی است که در این زمینه تلاش‌های بسیار زیادی انجام داده است. او توانست، با ساده‌سازی معادلات ناویر-استوکس و تبدیل آنها به معادلات دیفرانسیل معمولی غیرخطی، برای پارامترهای میدان جریان در احتراق هیبریدی، حل‌های تحلیلی ارائه دهد [۴]. با توسعه مفاهیم لایه مرزی در مکانیزم احتراق موتورهای هیبریدی توسط مارکس من، روابط اصلاح شده دیگری نیز براساس نتایج تجربی توسط افرادی همچون آلمن [۵]، اسموت [۶]، موزی [۷] و چپاورینی [۸] برای تعیین نرخ پسروری سوخت جامد، ارائه شد. همچنین، تاکنون پژوهش‌های عددی متنوع اما در عین حال محدودی در زمینه مدل‌سازی جریان درون موتورهای هیبریدی صورت گرفته است [۹-۱۳]. جزئیات پژوهش‌های اخیر (شامل هندسه موتور، شرایط کاری موتور، معادلات به کار گرفته شده برای مدل‌سازی جریان محترق درون موتور و همچنین روش حل معادلات حاکم) در مرجع [۱۴] به طور کامل بررسی شده‌اند. با این وجود در زمینه مدل‌سازی جریان اکسنده گازی بر روی سوخت جامد در شرایط اتمسفریک، پژوهش عددی شاخصی صورت نگرفته و مطالعات در حد تحلیل‌های لایه مرزی جریان محترق باقی‌مانده است.



شکل ۱- توصیف کیفی پدیده احتراق هیبریدی [۱]

با توجه به کاربردهای جریان محترق هیبریدی در سیستم‌های هوافضایی، مطالعه عددی این نوع جریان خاص جهت بررسی و شناخت پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی موجود در این فرآیند امری ضروری به نظر می‌رسد. در این پژوهش با به‌کارگیری یک روش عددی دوبعدی از خانواده روندهای ضمنی، موسوم به روش فاکتورگیری تقریبی

انتقال حرارت بین فاز گاز و جامد به آرام یا آشفته بودن لایه مرزی وابسته است. در یک نوع از موتورهای هیبریدی که از اکسیژن به عنوان اکسیدایزر استفاده می‌کند؛ عدد رینولدز بر واحد طول در محدوده 1×10^5 تا 2×10^5 (بر اینچ) برای شار جرمی

کمیات مربوط به پارامترهای سینتیک را تعیین کنند [۱۷]. آریساوا و بریل، ۱۳ محصول گازی حاصل از پیرولیز لایه‌ای را گزارش دادند (۶ محصول اصلی و ۷ محصول جانبی) [۱۸].

چیاورینی [۱۹]، یکی دیگر از کسانی است که در زمینه پیرولیز پلیمر HTPB نتایج بسیار خوبی را ارائه کرده است. وی برای انجام تست‌های خود از ترکیب روش پیرولیز لایه‌ای (با استفاده از انتقال حرارت هدایتی توسط یک میله مسی) به همراه آنالیز حرارتی TGA و DTA استفاده کرد. نتایج چیاورینی نشان می‌دهند که نرخ تشکیل محصولات گازی در حین فرآیند پیرولیز مستقل از فشار است و به صورت نمایی با معکوس دمای سطح در حال پیرولیز، متناسب است. همچنین، مطالعات وی حاکی از آن است که سهم عمده محصولات پیرولیز سوخت جامد HTPB را ماده بوتادین-۳، ۱ (C₄H₆) تشکیل می‌دهد.

عموماً برای نشان دادن چگونگی ارتباط نرخ پسروری سطح سوخت جامد ناشی از فرآیند پیرولیز با سینتیک تولید محصولات گازی حاصل از تجزیه پلیمرهای سوخت‌های کامپوزیتی، از روابطی شبیه به معادله آرنیوس استفاده می‌شود. این رابطه تجربی به صورت زیر است:

$$\dot{r} = A \exp(-E_a/R_u T_s) \quad (1)$$

در رابطه (۱)، \dot{r} نرخ پسروری، E_a انرژی فعال‌سازی، T_s دمای سطح سوخت، R_u ثابت جهانی گازها و A ثابت تجزیه است. کوهن [۱۵] و چیاورینی [۱۶] ضرایب مربوط به این رابطه را برای سوخت جامد HTPB ارائه کرده‌اند که در جدول (۱) آمده است. در این پژوهش برای مدل‌سازی نرخ پسروری از نتایج ارائه شده توسط چیاورینی استفاده شده است.

جدول ۱- ضرایب رابطه (۱) پیشنهاد شده توسط کوهن و چیاورینی [۱۵] و [۱۶]

محقق	A	E_a
کوهن	$299 \text{ (g/cm}^2\text{s)}$	$16/9 \text{ (kcal/mol)}$
چیاورینی	$11/04 \text{ (mm/s)}$	$4/91 \text{ (kcal/mol)}$
	3965 (mm/s)	$13/35 \text{ (kcal/mol)}$

روش حل

معادلات حاکم بر جریان محترق هیبریدی، شامل معادلات دویعدی تراکم‌پذیر متوسط‌گیری شده ناویر-استوکس به همراه معادلات انتقال اجزای شیمیایی است [۲۰]. در این پژوهش، مشخصه‌های جریان و نیز رفتار پارامترهایی نظیر نرخ پسروری و دمای سطح سوخت، با به‌کارگیری یک روند از دسته روش‌های پیشرفته کاهش تعبیرات کلی (تی.وی.دی) مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور، برای تفکیک

جریان احتراق هیبریدی بین اکسیژن گازی و سوخت HTPB^۴ مدل‌سازی شده است. نکته قابل تأمل در این پژوهش بررسی تأثیر مدل سینتیک شیمیایی بر روی حل جریان است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که اگرچه ماهیت اصلی رفتار جریان به واسطه مدل‌های سینتیکی متفاوت دستخوش تغییر نمی‌شود، اما مقدار کمیت‌هایی نظیر دمای شعله و غلظت محصولات وابسته به این زیرمدل شیمیایی است. البته قابل ذکر است که این موضوع مستقل از روش حل عددی معادلات حاکم می‌باشد و هیچ خدشه‌ای را متوجه این ناحیه نمی‌کند. در ادامه پس از بررسی اجمالی مطالعات صورت گرفته در زمینه پدیده پیرولیز، روش‌های عددی به کارگرفته شده برای محاسبات مکانی و زمانی بیان می‌گردد. سپس شرایط مرزی به‌کارگرفته شده بر روی سطح مشترک گاز-جامد تشریح می‌گردد و در نهایت دو مدل سینتیک شیمیایی استفاده شده در این پژوهش معرفی و نتایج به دست آمده برای هر کدام از این مدل‌ها ارائه شده و بر روی آنها بحث خواهد شد.

پیرولیز سوخت جامد HTPB

سوخت HTPB یکی از مرسوم‌ترین پلیمرهایی است که در سوخت‌های جامد کامپوزیتی استفاده می‌شود. به‌طور کلی، پلیمرها در پیشران‌های جامد کامپوزیتی دو نقش اصلی را برعهده دارند: ۱- به‌عنوان باینده عمل می‌کنند (به‌منظور نگهداری اجزای ترکیبی همچون اکسیدایزرها، ذرات فلزی و دیگر بهبوددهنده‌های نرخ پسروری در کامپوزیت‌های سوخت جامد). ۲- می‌توانند در طی فرآیند تجزیه و پیرولیز، محصولات گازی تولید کنند.

فرآیند پیرولیز مهم‌ترین تأثیر را در کنترل نرخ پسروری در مکانیزم احتراق موتورهای هیبریدی و رم‌جت‌ها دارد. این موضوع در بیست و پنج سال اخیر همواره مورد مطالعه تجربی محققان قرارگرفته است [۱۵]. عموماً برای آنالیز محصولات گازی فرآیند پیرولیز، از شیوه‌های گوناگونی استفاده می‌شود. یکی از معروف‌ترین روش‌ها، روش آنالیز حرارتی است. در این روش، تکنیک‌هایی نظیر TGA^۵، DTA^۶ و DSC^۸ برای نمونه‌هایی با نرخ‌های انتقال حرارت پایین (°C/min) ۱۰^۲-۱۰^۳ به کار می‌رود [۱۶]. آریساوا و بریل از جمله کسانی هستند که توانستند روش پیرولیز لایه‌ای را با موفقیت به کار گیرند. آن‌ها توانستند با ترکیب روش پیرولیز لایه‌ای و تکنیک طیف‌بینی^۹ موسوم به T-jump/FTIR عمده محصولات گازی، دما و

- Lower-Upper
- Hydroxyl Terminated Polybutadiene
- Binder
- Thermo-Gravimetric Analysis
- Differential Thermal Analysis
- Differential Scanning Calometry
- Spectroscopy

نرخ پسروی صورت می‌گیرد. بنابراین، قانون پیوستگی نتیجه می‌دهد که:

$$\rho_{g+} v_{g+} = -\rho_f \dot{r} \quad (2)$$

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، مؤلفه عمود بر سطح سرعت گازهای خروجی از ناحیه پیرولیز به داخل قلمرو حل را می‌توان از رابطه بالا تعیین کرد. مؤلفه محوری سرعت باید به گونه‌ای اعمال شود، که مقدار آن در گره‌های محاسباتی بر روی سطح سوخت جامد صفر گردد. با نوشتن معادله تعادل انرژی در مرز مشترک گاز - جامد رابطه زیر حاصل خواهد شد [۲۷].

$$Q_{tot} = \rho_f \dot{r} \left[\left(\sum_{i=1}^{N_S} Y_{i+} \Delta H_{f,i}^0 \right) - \Delta H_{f,HTPB}^0 \right] + \rho_f \dot{r} \sum_{i=1}^{N_S} Y_{i+} \left[\int_{T_{ref}}^{T_S} C_{p,i} dT \right] \quad (3)$$

جمله اول سمت راست رابطه بالا، بیانگر حرارت تجزیه یا میزان حرارت مورد نیاز برای تبدیل فاز جامد به فاز گازی محصولات پیرولیز است. جمله دوم نیز بیانگر آنتالپی محسوس محصولات گازی است. آنتالپی تشکیل و دانسیته سوخت HTPB به ترتیب برابر 1630 J/Kg و 920 Kg/m^3 است. در معادله انرژی دو کمیت دمای سطح T_S و نرخ پسروی \dot{r} مجهول هستند. با جایگذاری رابطه (۱) در معادله (۳)، معادله ضمنی زیر بر حسب دمای سطح به دست می‌آید:

$$Q_{tot} = \rho_f A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T_S}\right) \times \left\{ \left[\left(\sum_i^n Y_{i+} \Delta H_{f,i}^0 \right) - \Delta H_{f,HTPB}^0 \right] + \sum_i^n Y_{i+} \left[\int_{T_{ref}}^{T_S} C_{p,i} dT \right] \right\} \quad (4)$$

در این پژوهش از اثرات انتقال حرارت تشعشی صرف‌نظر شده است، بنابراین Q_{tot} تنها شامل انتقال حرارت هدایتی است [۴]. برای حل عددی معادله غیرخطی (۴) از روش نیوتن استفاده شده است.

$$T_S^{k+1} = T_S^k - \frac{F(T_S^k)}{F'(T_S^k)} \quad (5)$$

که در آن $F(T_S)$ به صورت زیر است:

$$F(T_S) = k_{g+} \frac{T_{g+} - T_S}{\Delta y} - \rho_f A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T_S}\right) \times \left\{ \left[\left(\sum_i^n Y_{i+} \Delta H_{f,i}^0 \right) - \Delta H_{f,HTPB}^0 \right] + \sum_i^n Y_{i+} \left[\int_{T_{ref}}^{T_S} C_{p,i} dT \right] \right\} \quad (6)$$

بردارهای شار در سمت راست معادلات از روش ون لیر [۲۱] و برای گسسته‌سازی مشتقات مکانی از روش اختلاف رو به باد مرتبه سه MUSCL [۲۲] استفاده شده است. همچنین، برای حل معادلات حاکم در گام زمانی روند ضمنی فاکتورگیری تقریبی LU به کار گرفته شده است [۲۳]. البته ژاکوبین‌های حاصل از خطی‌سازی که در سمت چپ معادلات ظاهر می‌شوند، توسط روش تفکیک بردار شار استگر- وارمینگ [۲۴] محاسبه شده‌اند. از این‌رو به این روش، روند ضمنی LU-SW نیز گفته می‌شود. برای حل معادلات حاکم بر جریان محترق از فرض شیمی غیرتعادلی و گاز حقیقی گرمایی استفاده شده است. به منظور مدل‌سازی آشفته‌گی، روش جبری گردابه بالدوین- لومکس [۲۵] به کار گرفته شده است. این روش به علت سهولت اعمال در معادلات، در بسیاری از پژوهش‌های عددی صورت گرفته در زمینه مسائل هوافضایی مورد استفاده قرار گرفته است. مؤلفه‌های سرعت نفوذی هر جزء شیمیایی با استفاده از قانون فیک به دست می‌آیند. خواص ترموفیزیکی مانند گرمای مخصوص در فشار ثابت، لزجت و ضریب هدایت حرارتی به صورت چندجمله‌ای‌هایی از دما بیان شده است و در نهایت خواص مخلوط گاز بر مبنای قانون اختلاط ویلک از طریق مقادیر خواص مربوط به هر جزء، محاسبه شده‌اند. ضرایب نفوذ دوتایی جرم نیز براساس تئوری چاپمن- انسکوگ به دست آمده است [۲۶].

سطح مشترک گاز - جامد

به‌طورکلی در مکانیزم احتراق هیبریدی، سطح سوخت جامد درگیر فرآیند پیرولیز است. بر اثر این پدیده به علت انتقال حرارت از ناحیه شعله به سطح سوخت جامد، پلیمرهای سوخت دچار از هم پاشیدگی^{۱۱} و در نهایت واجذبی^{۱۲} و شکست پیوندها می‌شوند. هر یک از این پدیده‌ها دارای پیچیدگی‌هایی هستند، که شناخت جزئیات آن‌ها برای تعیین شرایط مرزی روی سطح سوخت جامد ضرورتی ندارد.

در ناحیه پیرولیز (که به صورت نواری بسیار باریک با ضخامت ناچیز و چسبیده به سطح سوخت جامد در نظر گرفته می‌شود) دو رویداد مهم وجود دارد: (۱) تزریق جرم توسط بخارات سوخت جامد گازی شده از این ناحیه به سمت شعله (۲) انتقال حرارت با ناحیه شعله و همین‌طور سوخت جامد. بنابراین بر طبق قوانین بقا باید تعادل انرژی و جرم، در ناحیه سطح مشترک گاز- جامد برقرار باشد. برای سهولت در استخراج معادلات فرض می‌شود که سطح سوخت ثابت است و تزریق جرم از سوخت جامد به ناحیه پیرولیز با سرعتی برابر

واکنش‌های رفت بیان شده‌است و برای واکنش برگشت محاسبات بر اساس ثابت تعادل پیشنهاد شده‌است که خود مستلزم محاسبه تغییرات تابع گیبس برای هر واکنش در هر سلول محاسباتی با دمای متفاوت است. این مسئله علاوه بر افزایش پیچیدگی‌های کد نویسی، ازدیاد هزینه‌های زمانی را نیز در پی خواهد داشت.

در این پژوهش از دو مدل مختلف برای توصیف مکانیزم سینتیک شیمیایی استفاده شده است. در مدل (۱) برای اکسیداسیون C_4H_6 از مدل ارائه شده توسط بابوشاک [۴۰] و برای واکنش‌های مقدماتی بین $CO/O_2/H_2$ از مدل سینتیک ارائه شده توسط وستبروک [۴۱] استفاده شده است. در مدل (۲) برای اکسیداسیون C_4H_6 همانند مدل (۱) عمل می‌شود ولی برای اکسیداسیون H_2 از مدل ارائه شده توسط برابرس [۴۲] و برای اکسیداسیون CO از مکانیزم تک‌مرحله‌ای ارائه شده توسط وستبروک و درایر [۲۸] استفاده شده است. مکانیزم‌های مذکور در پیوست ارائه شده‌اند.

قابل ذکر است که در راستای انجام این پژوهش بیش از ده‌ها مدل سینتیک شیمیایی مورد استفاده قرار گرفت که عمدتاً دارای سه مشکل اساسی بودند: (۱) نرخ واکنش برگشت برخی از این مدل‌ها؛ همان‌طور که در قبل به آن‌ها اشاره شده، در مراجع مربوطه ارائه نشده است؛ (۲) برخی از این مدل‌ها به علت بالا بردن سختی^{۱۳} حل مسئله، سبب واگرایی حل می‌شدند؛ (۳) بعضی دیگر از این مدل‌ها دمای شعله را بیش از ۵۰۰۰ کلونین پیش‌بینی می‌کردند که این مقادیر با فیزیک مسئله سازگاری ندارد. مهم آن است که اغلب این مدل‌ها واکنش‌های مشترک دارند (به خصوص در واکنش‌های مربوط به $H_2/O_2/H_2O$). با بررسی واکنش‌های در نظر گرفته شده در این مدل‌ها، می‌توان آن‌ها را به دو دسته اصلی تقسیم کرد. (۱) مدل‌هایی که برای اکسایش CO از یک واکنش کلی استفاده می‌کنند؛ (۲) مدل‌هایی که برای اکسایش CO از چند واکنش مقدماتی استفاده می‌کنند. لذا برای مقایسه کارایی این دو دسته، دو مدل توصیف شده در بالا مورد استفاده قرار گرفتند.

هندسه و شرایط مرزی

در این پژوهش، گرین سوخت جامد به صورت دو صفحه موازی مسطح است. فاصله این دو صفحه از یکدیگر ۲۰ میلی‌متر و طول سوخت HTPB ۱۰ سانتی‌متر در نظر گرفته شده است. در حین انجام این پژوهش بنا به تجربه معلوم شد؛ در صورتی که از شروع لبه حمله، شرط متناظر با سوخت جامد اعمال گردد، حل مسئله در ورودی با مشکل رو به رو خواهد شد. این مسئله به این علت است که در تعیین مقدار اولین گره محاسباتی در لبه حمله، از دو سلول

این معادله باید برای هر گره روی سطح سوخت جامد در هر تکرار زمانی حل شود. بعد از حل این معادله با شرط همگرایی $|T_s^{K+1} - T_s^K| \leq \epsilon$ ، می‌توان نرخ پسروری را از رابطه (۱) محاسبه کرد.

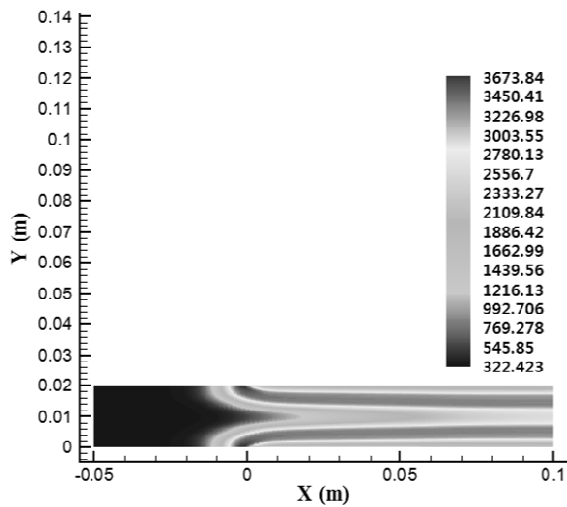
مقدار کمیت فشار برای گره محاسباتی روی مرز گاز- جامد برابر با فشار سلول مجاور در نظر گرفته می‌شود که در قلمرو حل قرار دارد. با محاسبه دمای ناحیه پیرولیز که به علت ناچیز بودن ضخامت، برابر با دمای سطح است و همین‌طور تعیین شدن فشار، می‌توان چگالی را به دست آورد.

سینتیک شیمیایی

به منظور محاسبه عبارت مولد در معادلات انتقال اجزای شیمیایی از قانون آرنیوس استفاده شده است. مکانیزم‌های شیمیایی متفاوتی در پژوهش‌های صورت گرفته پیشنهاد شده‌اند. در این پژوهش‌ها، واکنش‌های شیمیایی بر اساس دو رویکرد مکانیزم‌های کلی و شبه کلی ارائه شده‌اند. به طور معمول در مکانیزم‌های کلی، احتراق سوخت‌های هیدروکربنی دو مرحله اصلی دارند. در مرحله اول، بر اثر اکسیداسیون هیدروکربن، CO و آب تولید و در مرحله دوم CO اکسید شده و به CO_2 تبدیل می‌شود. وستبروک و درایر [۲۸] مکانیزم‌های کلی یک مرحله‌ای و دو مرحله‌ای را برای چند هیدروکربن پرکاربرد، ارائه کردند. سنکاران [۲۹] و چنگ [۹] مکانیزم دومرحله‌ای آن‌ها را برای شبیه‌سازی عددی بالستیک داخلی یک موتور هیبریدی استفاده کردند. بر اساس این مکانیزم دومرحله‌ای، در ابتدا C_4H_6 بر اثر واکنش با اکسیژن گازی تولید آب و CO می‌کند و در مرحله دوم CO بر اثر سوختن با اکسیژن اضافی تبدیل به CO_2 می‌شود.

در مکانیزم‌های شبه کلی در گام اول هیدروکربن تحت واکنش با اکسیژن گازی تبدیل به H_2 و CO می‌شود. این واکنش توسط یک مکانیزم کلی تک‌مرحله‌ای مدل می‌شود. در مرحله بعد H_2 و CO تحت چند واکنش مقدماتی به اجزائی نظیر H ، O ، OH ، H_2O_2 ، H_2O و CO_2 تبدیل می‌شوند. چنگ در پژوهش خود علاوه بر مکانیزم کلی دومرحله‌ای از یک مکانیزم شبه کلی ۱۳ مرحله‌ای نیز بهره جست [۹]. نتایج وی نشان می‌دهند که مکانیزم دو مرحله‌ای مقدار دما را بیشتر از مکانیزم شبه کلی پیش‌بینی می‌کند.

برای واکنش بین $CO/O_2/H_2$ مدل‌های مختلفی توسط پتر و درایر [۳۰]، جاجیموسکی [۳۱]، وستبروک و درایر [۳۲]، لاسکین و وانگ [۳۳]، مولر و پتر [۳۴]، پتر و رایبتر [۳۵]، هنگیان و یانگ [۳۶]، میشر [۳۷]، هندری [۳۸] و پترسن [۳۹] ارائه شده است. این مدل‌ها به دو قسمت اصلی تقسیم می‌شوند. در بخش اول، مکانیزم تولید آب و در بخش دوم مکانیزم تولید CO_2 بیان می‌شود. در مراجع مذکور پارامترهای مربوط به ثابت نرخ



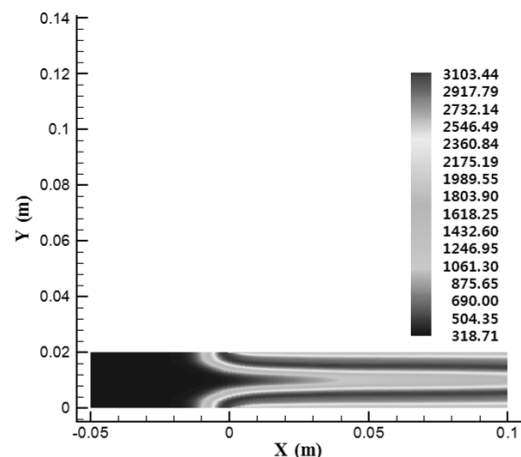
شکل ۳- توزیع دما (برحسب کلوین، مدل شیمی ۲)

در شکل‌های (۴) تا (۹) توزیع کسر جرمی آب، مونواکسید کربن و دی‌اکسید کربن بر اساس محاسبات صورت گرفته با استفاده از مدل‌های شیمی (۱) و (۲) نشان داده شده‌اند. همان‌طور که در این کانتورها دیده می‌شود، نحوه توزیع کسر جرمی محصولات احتراق برای هر دو مدل با هم مشابه است ولی (همانند کانتورهای دما) مقادیر آنها با هم متفاوت است. این اختلاف در کانتورهای مربوط به کسر جرمی آب اندک است، اما در کانتورهای مربوط به مونواکسید کربن و دی‌اکسید کربن این اختلاف فاحش است. مقدار بیشینه کسر جرمی آب در مدل شیمی (۱) برابر 0.165 و در مدل شیمی (۲) برابر 0.21 است. این مقادیر برای کسر جرمی مونواکسید کربن و دی‌اکسید کربن در حالت بیشینه برای مدل (۱)، 0.51 و 0.4 و برای مدل (۲) به ترتیب برابر 0.14 و 0.67 است. علت اصلی این اختلاف در مقادیر کسر جرمی و دما، به رفتار متفاوت مکانیزم‌های مربوط به اکسیداسیون مونواکسید کربن در هر یک از مدل‌های شیمی مربوط می‌شود. در مدل شیمی (۲) به علت آن که مقادیر بیشتری از مونواکسید کربن به دی‌اکسید کربن تبدیل می‌شود و از طرفی این واکنش بسیار انرژی‌زاست، لذا مقدار دمای به‌دست آمده توسط این مدل از مدل (۱) بیشتر است. در حالی که در مدل شیمی (۱) واکنش‌های پیش‌بینی شده قادر به مصرف عمده مونواکسید کربن تولیدی نیستند و احتراق به صورت ناقص انجام می‌شود. بنابراین دمای شعله به‌دست آمده توسط این مدل کمتر از مقدار مربوط به مدل (۲) است.

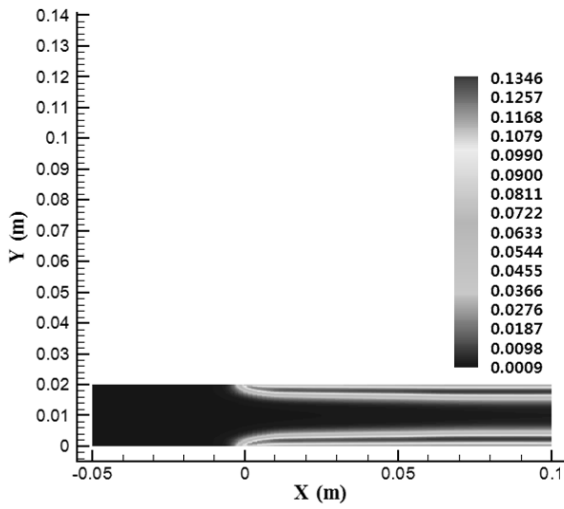
مجازی که توسط دو شرط مرزی متفاوت محاسبه می‌شوند، استفاده می‌شود. لذا این گره یک نقطه منفرد به حساب می‌آید. برای رفع این مشکل از تجربه مشخص شد که باید در ابتدای لبه حمله از طول اضافی با شرط دیواره آدیاباتیک استفاده کرد تا مشخصه‌های جریان اکسند به حد کافی توسعه یابند. بعد از این طول اضافی مطلوب می‌توان شرط متناظر با سوخت جامد را بر روی دیواره اعمال کرد. در این تحقیق در ورودی، ۵ سانتی‌متر طول اضافی در نظر گرفته شده است. این طول از منفی ۵ سانتی‌متر تا صفر امتداد پیدا می‌کند و نقطه صفر شروع مرز متناظر با سوخت جامد است که تا نقطه ۱۰ سانتی‌متر ادامه می‌یابد. برای حل معادلات از یک شبکه 101×31 استفاده شده است [۲۹]. برای حصول دقت بیشتر در حل، شبکه در نزدیکی دیواره متراکم شده است. همچنین به علت تقارن در شکل، از نصف هندسه در فرآیند حل استفاده شده است. شرایط در ورودی و خروجی گرین مادون صوت است. فشار و دمای سکون اکسیژن گازی در ورودی به ترتیب برابر $1/0.1$ بار و 300 کلوین در نظر گرفته شده‌اند.

نتایج

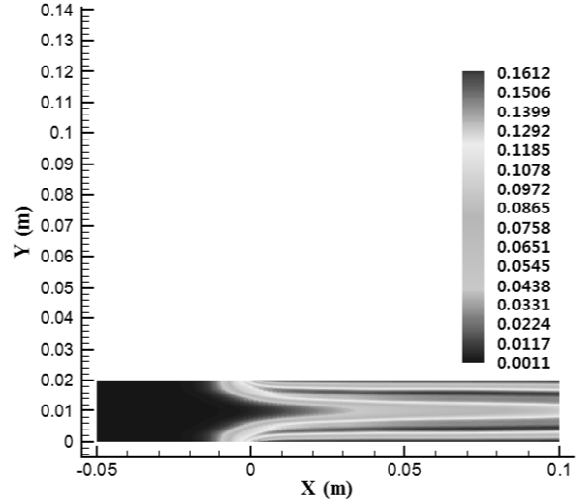
در شکل (۲) و (۳) به ترتیب توزیع دما بر اساس مدل شیمی (۱) و (۲) به نمایش در آمده است. این کانتورها رفتاری کاملاً مشابه را برای جریان محترق نشان می‌دهند، با این تفاوت که حل حاصل از مدل شیمی (۲) دما را در ناحیه شعله بیشتر از حل حاصل از مدل شیمی (۱) پیش‌بینی می‌کند، به طوری که بیشینه دما در شکل (۲) حدود 3105 کلوین و در شکل (۳) حدود 3675 کلوین است. همان‌طور که در این شکل‌ها دیده می‌شود در ابتدای گرین سوخت، هسته جریان به علت حضور اکسیژن سرد دمای پائین‌تری دارد اما با پیشروی جریان به سمت انتهای گرین و مصرف اکسیژن، دما در هسته جریان افزایش می‌یابد.



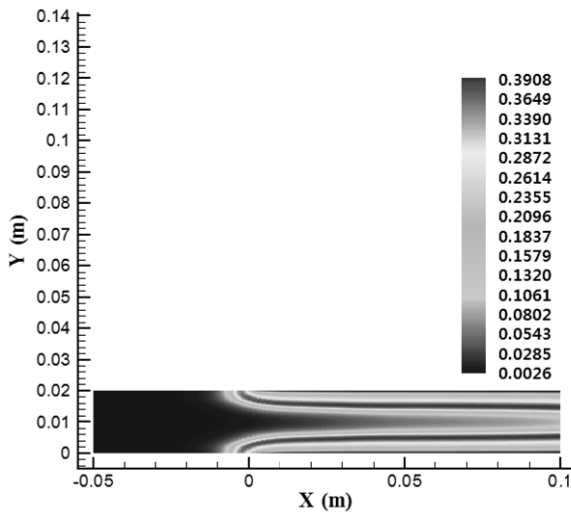
شکل ۲- توزیع دما (برحسب کلوین، مدل شیمی ۱)



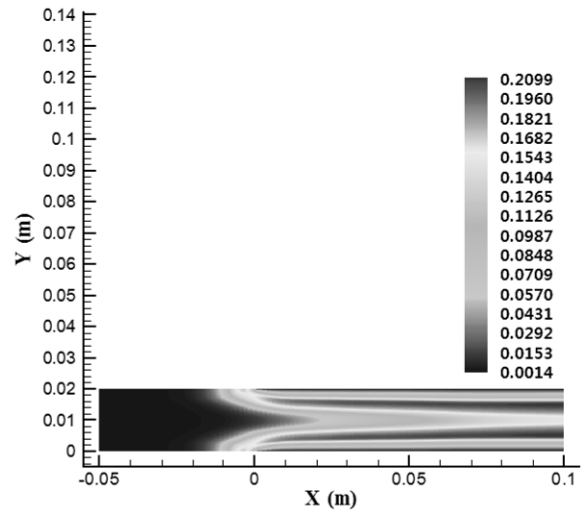
شکل ۷- توزیع کسر جرمی CO (مدل شیمی ۲)



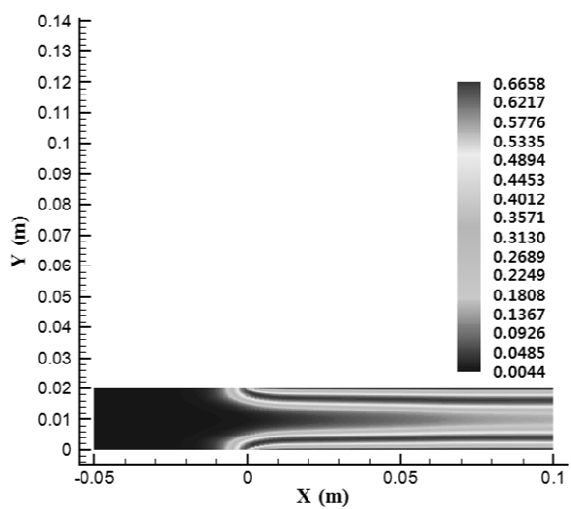
شکل ۴- توزیع کسر جرمی آب (مدل شیمی ۱)



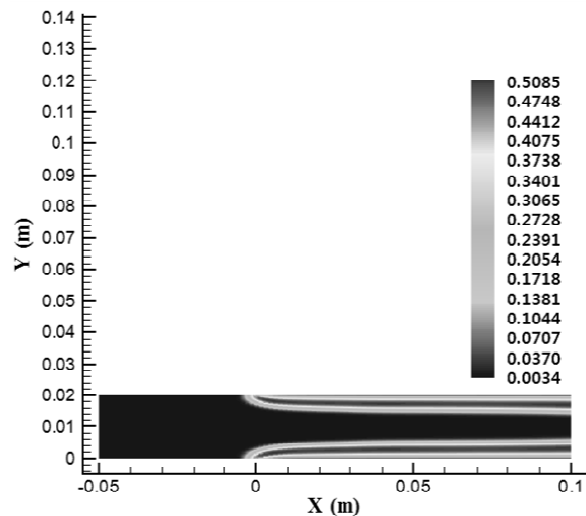
شکل ۸- توزیع کسر جرمی CO2 (مدل شیمی ۱)



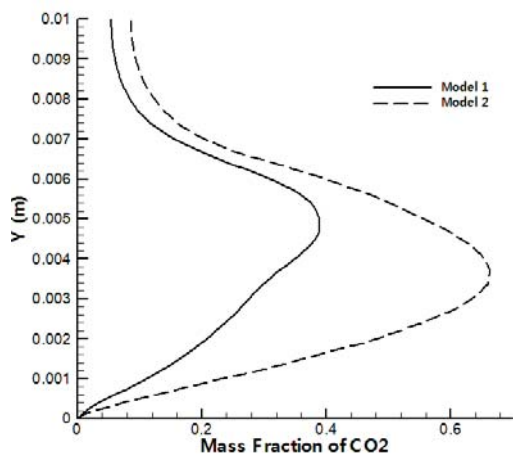
شکل ۵- توزیع کسر جرمی آب (مدل شیمی ۲)



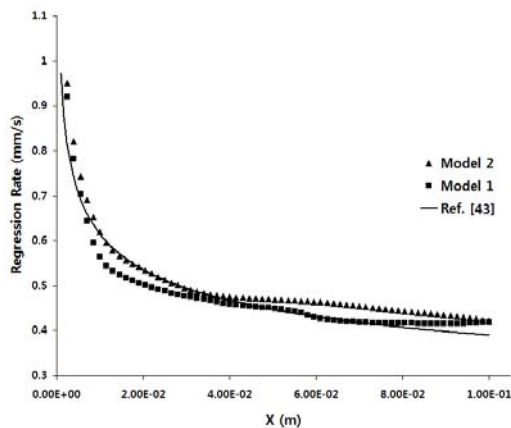
شکل ۹- توزیع کسر جرمی CO2 (مدل شیمی ۲)



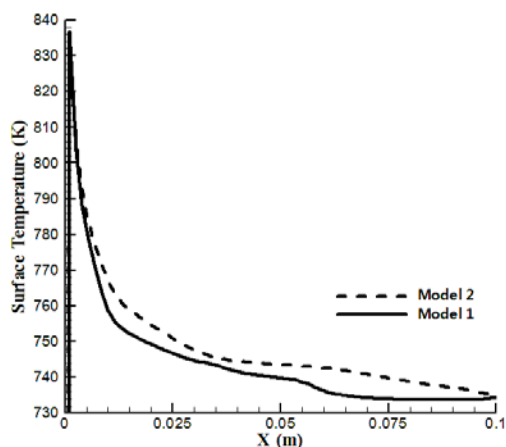
شکل ۶- توزیع کسر جرمی CO (مدل شیمی ۱)



شکل ۱۲- مقایسه توزیع کسر جرمی CO₂ در مقطع $x = 0.05m$ برای مدل‌های شیمی (۱) و (۲)



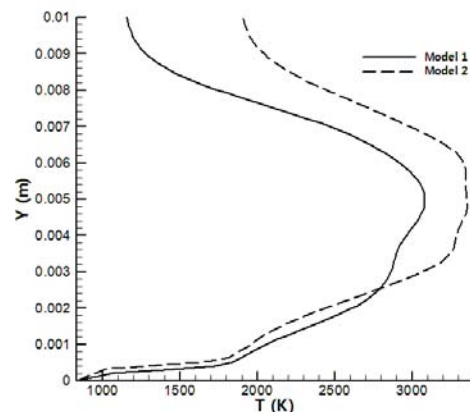
شکل ۱۳- مقایسه تغییرات نرخ پسروی در طول سوخت، برای مدل‌های شیمی (۱) و (۲) با نتایج مرجع [۴۳]



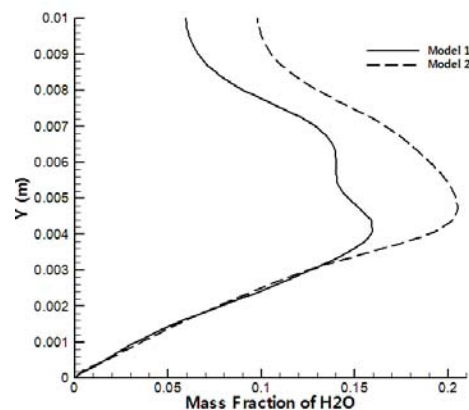
شکل ۱۴- مقایسه تغییرات دمای سطح در طول سوخت برای مدل‌های شیمی (۱) و (۲)

یکی از مهم‌ترین مشخصه‌ها در تعیین عملکرد مکانیزم احتراق هیبریدی، پارامتر نرخ پسروی سطح سوخت جامد است. تغییرات نرخ

در شکل‌های (۱۰-۱۲) به ترتیب تغییرات دما، کسر جرمی آب و دی‌اکسید کربن در مقطع $x = 0.05m$ نمایش داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، مقادیر دما و کسر جرمی آب تا ناحیه تشکیل شعله اختلاف کمی نسبت به یکدیگر دارند، اما این اختلاف در ناحیه شعله زیاد می‌شود. نمودارهای مربوط به کسر جرمی دی‌اکسید کربن نیز اختلافات زیادی را نشان می‌دهند. علت اصلی این اختلافات در واکنش‌های به کار گرفته شده در دو مدل مذکور برای تولید دی‌اکسید کربن است. واکنش تک‌مرحله‌ای کلی به کار گرفته شده در مدل (۲) برخلاف چهار واکنش مقدماتی استفاده شده در مدل (۱) میزان بیشتری از مونواکسید کربن را تبدیل به دی‌اکسید کربن می‌کند و به تبع آن انرژی بیشتری آزاد شده و دمای شعله همان‌طور که ملاحظه شد، افزایش یافته است. بنابراین از آنجا که قسمتی از واکنش‌های مربوط به $O_2/H_2/H_2O$ در این دو مدل با یکدیگر مشترکند و همچنین با توجه به تفاوت مقادیر دی‌اکسید کربن پیش‌بینی شده توسط دو مدل، می‌توان گفت که اختلاف اصلی در مقادیر پیش‌بینی شده توسط دو مدل ناشی از تفاوت رفتار واکنش‌های به کار گرفته شده برای اکسایش مونواکسید کربن است.



شکل ۱۵- مقایسه توزیع دما در مقطع $x = 0.05m$ برای مدل‌های شیمی (۱) و (۲)



شکل ۱۶- مقایسه توزیع کسر جرمی آب در مقطع $x = 0.05m$ برای مدل‌های شیمی (۱) و (۲)

از خانواده آلکین‌ها^{۱۴} است. علاوه بر این، نتایج حاصل از پژوهش‌های نویسندگان مقاله حاضر در به کارگیری مدل شیمی (۲) برای مدل‌سازی عددی فرآیند احتراق HTPB/O₂ در یک موتور موشک هیبریدی، گویای دقت و سازگاری مدل مذکور در مدل‌سازی این نوع جریان‌های محترق است [۱۴].

مراجع

- [1] Sutton, G. P., *Rocket Propulsion Elements*, 7th Edition., John Wiley & Sons, New York, 2001.
- [2] Marxman, G. and Gilbert, M., "Turbulent Boundary Layer Combustion in the Hybrid Rocket," *Ninth International Symposium on Combustion*, pp. 371-383, New York, 1963.
- [3] Omori, S., *Hybrid Combustion with Surface Pyrolysis*, Institute of Space and Aeronautical Science, University of Tokyo, Report No. 450, 1970.
- [4] Chiaverini, M. J. and Kuo, K. K., *Fundamentals of Hybrid Rocket Combustion and Propulsion*, AIAA Publication, 1st Edition, 650 page, 2007.
- [5] Estey, P., Altman, D. and McFarlane, J., "An Evaluation of Scaling Effects for Hybrid Rocket Motors," *AIAA/SAE/ASME 27th Joint Propulsion Conference*, Sacramento, June 24-26, 1991.
- [6] Smoot, L. D. and Price, F. C., "Regression Rate of Nonmetalized Hybrid Fuel Systems," *AIAA Journal*, Vol. 3, No. 8, pp. 1408-1413, 1965.
- [7] Muzzy, R. J., "Applied Hybrid Combustion Theory," *Proceedings of the 8th AIAA/SAE Joint Propulsion Specialist Conference*, New Orleans, Louisiana, USA, November-December 1972, Paper No. 72 1143.
- [8] Chiaverini, M. J., Kuo, K. K., Peretz, A. and Harting, G. C., "Regression Rate and Heat Transfer Correlations for HTPB/GOX Combustion in a Hybrid Rocket Motor," *AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 34th, Cleveland, OH, July 13-15, 1998.
- [9] Cheng, G. C., Farmer, R. C., Jones, H. S. and McFarlane, J. S., "Numerical Simulation of the Internal Ballistics of a Hybrid Rocket Motor," *32nd Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, Reno, 1994.
- [10] Liang, P. Y., Ungewitter, R. J. and Claflin, S. E., "CFD Analysis of the 24-Inch JIRAD Hybrid Rocket Motor," *31st AIAA ASME/SAE /ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Sandiego, 1995.
- [11] Venkateswaran, S., and Merkle, C. L., "Size Scale-up in Hybrid Rocket Motors," *AIAA 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, AIAA-96-0647, Reno, Jan 15-18, 1996.
- [12] Serin, N. and Gogus, Y. A., "Navier-Stokes Investigation on Reacting Flow Field of HTPB/O₂ Hybrid Motor and Regression Rate Evaluation," *39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, Huntsville, Alabama, 20-23 July 2003.
- [13] Lung Lin, J., "Two-Phase Flow Effect on Hybrid Rocket Combustion," *Acta Astronautica*, Vol. 65, Issue 7-8, pp. 1042-1057, March 2009.

پسروی محاسبه شده در طول سوخت جامد در شکل (۱۳) نشان داده شده است. نتایج مربوط به مدل شیمی (۱) و (۲) به ترتیب با نقاط مربعی و مثلثی شکل نمایش داده شده‌اند. به منظور اعتبارسنجی برای تغییرات طولی نرخ پسروی، نتایج حاصله با نتایج گزارش شده در مرجع [۴۳] (خط ممتد) مقایسه شده است. نتایج این مرجع براساس رابطه تجربی $\dot{r}=aG^n x^m$ به دست آمده‌اند. در این رابطه a ، m و n ضرایب تجربی هستند که بر اساس نوع سوخت و اکسیدایزر تعیین می‌شوند. G و x به ترتیب بیانگر شار جرمی عبوری و طول گرین در هر مقطع هستند. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، نتایج قرابت بسیار نزدیکی نسبت به هم دارند. منحنی‌ها از یک مقدار بیشینه، یعنی جایی که شعله تقریباً به سطح سوخت چسبیده، شروع و با پیشروی در طول گرین کاهش می‌یابند. با توسعه و رشد لایه مرزی، شعله به سمت هسته جریان کشیده شده و از سطح سوخت فاصله می‌گیرد. این مسئله سبب می‌شود تا انتقال حرارت به سطح سوخت کاهش یابد و طبق معادله انرژی دمای سطح سوخت کم می‌شود و به تبع آن نرخ پسروی نیز کاهش پیدا می‌کند. شکل (۱۴) نشان‌دهنده تغییرات دمای سطح در طول سوخت جامد است. همان‌طور که انتظار می‌رود تغییرات این پارامتر بر اساس معادله (۱) متناظر با تغییرات نرخ پسروی در شکل (۱۳) است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش جریان محترق بین اکسیژن‌گازی و سوخت جامد HTPB مدل‌سازی شد. محاسبات بر اساس دو مدل سینتیک شیمیایی متفاوت صورت گرفت و نتایج مربوطه ارائه شدند. به علت در دسترس نبودن نتایج تجربی و عددی تنها نرخ پسروی سطح سوخت جامد مورد صحت‌گذاری و مقایسه واقع شد. این مقایسه بیانگر سازگاری بسیار خوب نتایج مربوط به نرخ پسروی با دیگر داده‌های عددی است.

همان‌طور که در قسمت نتایج ملاحظه شد، مقادیر دمای شعله و کسر جرمی محصولات به شدت متأثر از مکانیزم‌های در نظر گرفته شده برای واکنش‌های شیمیایی است. نتایج نشان می‌دهند که مدل شیمی (۱) احتراق را به صورت ناقص پیش‌بینی می‌کند. بنابراین قسمت عمده CO به صورت نسوخته باقی می‌ماند و به همین دلیل مقدار دمای شعله محاسبه شده توسط این مدل نسبت به مدل شیمی (۲) کمتر است. علت ضعف مدل شیمی (۱) در پیش‌بینی دقیق رفتار شیمیایی جریان این است که مدل مذکور براساس نتایج آزمایشگاهی سوخت‌هایی ارائه شده است که از خانواده آلکان‌ها^{۱۴} و آلکن‌ها^{۱۵} هستند [۴۱]. این در حالی است که سوخت مورد استفاده در این پژوهش

14. Alkane
15. Alkene

16. Alkyne

- Propulsion and Power*, Vol. 17, No. 1, pp. 99-110, January-February 2001.
- [28] Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., "Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames," *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, Issue 1, pp. 31-43, Dec. 1981.
- [29] Merkle, C. L. and Venkateswaran, S., *Fundamental Phenomena on Fuel Decomposition and Boundary Layer Combustion Processes with Applications to Hybrid Rocket Motors, Part II*, 106 Research Building East, Pennsylvania, Final Report 16801, 1996.
- [30] Yetter, R. A., Dryer, F. L. and Rabitz, H., "Flow Reactor Studies of Carbon Monoxide/ Hydrogen/Oxygen Kinetics," *Combustion Science and Technology*, Vol. 79, Issue 1, pp. 129-140, 1991.
- [31] Jachimowski, C. J., "A Simplified Hydrocarbon Reaction Mechanism for Combustion Applications," *Journal of Propulsion*, Vol. 1, No. 5, pp. 329-335, sep.Oct. 1985.
- [32] Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., "Comprehensive Mechanism for Methanol Oxidation," *Combustion Science and Technology*, Vol. 20, Issue 3, pp. 125-140, Sep. 1991.
- [33] Laskin, A., Wang, H. and Law, C. K., *Detailed Kinetic Modeling of 1,3-Butadiene Oxidation at High Temperature*, John Wiley & Sons, pp. 589-614, May 2000.
- [34] Mueller, M. A., Yetter, R. A. and Dryer, F. L., *Flow Reactor Studies and Kinetic Modeling of the H₂ / O₂ / NO_x and CO/ H₂O/ O₂/ NO_x Reactions*, John Wiley & Sons, pp. 7059-724, June 1999.
- [35] Yetter, R. A., Dryer, F. L. and Rabitz, H., "A Comprehensive Reaction Mechanism for Carbon Monoxide/ Hydrogen / Oxygen Kinetics," *Combustion Science and Technology*, Vol. 79, Issue 1, pp. 97-128, sep. 1991.
- [36] Hongyan, S., Yang, S. I., Jomaas, G. and Law, C. K., "High-Pressure Laminar Flame Speeds and Kinetic Modeling of Carbon Monoxide / Hydrogen Combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 31, Issue 1, pp. 439-446, 2007.
- [37] Mishra, M. K., Yetter, R., Reuven, Y., Rabitz, H. and Smook, M. D., "On the Role of Transport in the Combustion Kinetics of a Steady-State Premixed Laminar CO + H₂ + O₂ Flame," *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol. 26, Issue 4, pp. 437-453, 1994.
- [38] Hendry, D. G., Mayo, R F. and Scheutzle, D., "Oxidation of 1,3-Butadiene," *Industrial and Engineering Chemistry Product Research and Development*, ACS Publication, Vol. 7, Issue 2, pp. 136-145, 1968.
- [39] Petersen, E. L., Davidson, D. F. and Hanson, R. K., *Reduced Kinetics Mechanisms for Ram Accelerator Combustion*, AIAA Publication, 1997.
- [40] Babushok, V. I. and Dakdancha, A. N., "Global Kinetic Parameters for High-Temperature Gas-Phase Reactions," *Translated from Fizika Goreniya i Vzryva*, Vol. 29, No. 4, pp. 48-80, Jul.-Aug. 1993.
- [۱۴] آهنگر، مهدی، ابراهیمی، رضا و غفوریان، اکبر. «مدل‌سازی فرآیند احتراق HTPB/O₂ در یک موتور موشک هیبریدی به منظور تعیین نرخ پسروی سطح سوخت جامد،» نشریه علمی- پژوهشی سوخت و احتراق، سال دوم، شماره دوم، پاییز و زمستان ۱۳۸۸.
- [15] Cohen, N. S., Fleming, R. W. and Derr, R. L., "Role of Binders in Solid Propellant Combustion," *AIAA Journal*, Vol. 12, Issue 2, pp. 212-218, Feb, 1974.
- [16] Chiaverini, M. J., Harting, G. C., Lu, Y. C., Kuo, K. K. and Peretz, A., "Pyrolysis Behavior of Hybrid-Rocket Solid Fuels Under Rapid Heating Conditions," *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 15, No. 6, pp. 888-895, Nov.-Dec. 1999.
- [17] Arisawa, H. and Brill, T. B., "Flash Pyrolysis of Hydroxyl-Terminated Polybutadiene (HTPB) I: Analysis and Implications of the Gaseous Products," *Combustion and Flame*, Vol. 106, Issue 1-2, pp. 131-143, 1996.
- [18] Arisawa, H. and Brill, T. B., "Flash Pyrolysis of Hydroxyl-Terminated Polybutadiene (HTPB) II: Implications of the Kinetics to Combustion of Organic Polymers," *Combustion and Flame*, Vol. 106, Issue 1-2, pp. 144-154, 1996.
- [19] Chiaverini, M. J., et al., "Thermal Pyrolysis and Combustion of HTPB-Based Solid Fuels for Hybrid Rocket Motor Applications," *32nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, AIAA-96-2845, July 1996.
- [20] Shuen, J. S. and Yoon, S., *Numerical Study of Chemically Reacting Flows Using an LU Scheme*, Report No.: AIAA-88-0436 & NASA CR-180882, Jan. 1988.
- [21] Van Leer, B., Liou, M. S., and Shuen, J. S., "Splitting of Inviscid Fluxes for Real Gases," *Journal of Computational Physics*, Vol. 87, Issue 1, pp. 1-24, 1990.
- [22] Van Leer, B., "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme V. A Second-Order Sequel to Godunov's Method," *Journal of Computational Physics*, Vol. 32, Issue 1, pp. 229-248, 1997.
- [23] Yu, S. T., Tsai, Y. L. and Shuen, J. S., "Three-Dimensional Calculation of Supersonic Reacting Flows Using an LU Scheme," *27th Aerospace Sciences Meeting*, Reno, Nevada, 1989.
- [24] Steger, J. L. and Warming, R. F., "Flux Vector Splitting of the Inviscid Gas Dynamic Equations with Application to Finite Difference Methods," *Journal of Computational Physics*, Vol. 40, Issue 2, pp. 263-293, Apr. 1981.
- [25] Baldwin, B. and Lomax, H., "Thin Layer Approximation and Algebraic Model for Separated Turbulent Flows," *AIAA-78-257, Aerospace Sciences Meeting*, 16th, Huntsville, Ala., Jan. 16-18, 1978.
- [26] Reid, R. C., Prausnitz, J. M. and Sherwood, T. K., *Properties of Gases and Liquids*, 3rd Edition, McGraw-Hill, 1977.
- [27] Chiaverini, M. J., Kuo, K.K., Peretz A. and Harting G. C., "Regression-Rate and Heat-Transfer Correlations for Hybrid Rocket Combustion," *Journal of*

Non-Equilibrium Reacting Flows,” 28th Aerospace Sciences Meeting, Nevada, January 1990.

[۴۳] طهماسبی، احسان‌اله. طراحی مفهومی موتور هیبرید بر اساس بهینه‌سازی پارامترهای اصلی آن، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، شهریور ۱۳۸۸.

[41] Westbrook, C. K. and Pitz, W., “A Comprehensive Chemical Kinetic Reaction Mechanism for Oxidation and Pyrolysis of Propane and Propene,” *Combustion Science and Technology*, Vol. 37, Issue 3, pp. 117-152, 1984.

[42] Tsai, Y. L. and Hsieh, K. C., “Comparative Study of Computational Efficiency of Two LU Schemes for

پیوست

جدول پ-۱- مکانیزم واکنش هیدروژن، اکسیژن، مونواکسیدکربن پیشنهاد شده توسط وستبروک [۴۱]

واکنش	$\log A_f$	n_f	E_f	$\log A_b$	n_b	(واحدها بر حسب (Kcal, mol, K, cm E_b)
$H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$	14.34	0	16.79	13.24	0	0.68
$H_2+O \rightleftharpoons H+OH$	10.26	1	8.90	9.92	1	6.95
$H_2O+O \rightleftharpoons OH+OH$	13.83	0	18.35	12.80	0	1.10
$H_2O+H \rightleftharpoons H_2+OH$	13.98	0	20.30	13.34	0	5.15
$H_2O_2+OH \rightleftharpoons H_2O+HO_2$	13.00	0	1.80	13.45	0	32.79
$H_2O+M \rightleftharpoons H+OH+M$	16.34	0	105.0	23.15	-2	0.0
$H+O_2+M \rightleftharpoons HO_2+M$	15.22	0	-1.0	15.36	0	45.9
$HO_2+O \rightleftharpoons OH+O_2$	13.70	0	1.00	13.81	0	56.61
$HO_2+H \rightleftharpoons OH+OH$	14.40	0	1.90	13.08	0	40.1
$HO_2+H \rightleftharpoons H_2+O_2$	13.40	0	0.7	13.74	0	57.8
$HO_2+OH \rightleftharpoons H_2O+O_2$	13.70	0	1.00	14.80	0	73.86
$H_2O_2+O_2 \rightleftharpoons HO_2+HO_2$	13.6	0	42.6	13.0	0	1.0
$H_2O_2+M \rightleftharpoons OH+OH+M$	17.08	0	45.50	14.96	0	-5.07
$H_2O_2+H \rightleftharpoons HO_2+H_2$	12.23	0	3.75	11.86	0	18.70
$O+H+M \rightleftharpoons OH+M$	16.00	0	0.00	19.90	-1	103.7
$O_2+M \rightleftharpoons O+O+M$	15.71	0	115	15.67	-0.28	0.0
$H_2+M \rightleftharpoons H+H+M$	14.34	0	96.00	15.48	0	0.0

واکنش	$\log A_f$	n_f	E_f	$\log A_b$	n_b	(واحدها بر حسب (Kcal, mol, K, cm E_b)
$\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$	7.18	1.3	-0.77	9.23	1.3	21.58
$\text{CO} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$	14.18	0	23.65	15.23	0	85.5
$\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{M}$	15.77	0	4.1	21.74	-1	131.8
$\text{CO}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{O}_2$	12.44	0	43.83	11.5	0	37.60

جدول پ-۲- مکانیزم واکنش هیدروژن، اکسیژن پیشنهاد شده توسط برابیس [۴۲]

واکنش	k_f	(واحدها بر حسب (mol, K, m k_b)
$\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$4.74 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-3068.95}{T}\right)$	$2.03138 \times 10^{12} T^{-0.274934} \exp\left(\frac{-10985.23}{T}\right)$
$\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	$1.85 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-8253.65}{T}\right)$	$4.52315 \times 10^8 T^{0.410439} \exp\left(\frac{412.94}{T}\right)$
$\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	$4.2 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-6919.98}{T}\right)$	$2.2825 \times 10^{11} T^{-0.0246801} \exp\left(\frac{-5998.64}{T}\right)$
$\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2$	$1.35 \times 10^9 \exp\left(\frac{503.27}{T}\right)$	$5.1015 \times 10^{13} T^{-0.4236663} \exp\left(\frac{-25765.13}{T}\right)$
$\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{H}$	$2.2 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-48314.074}{T}\right)$	$4.38485 \times 10^7 T^{0.0320618} \exp\left(\frac{-4166.86}{T}\right)$
$\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{O}$	$1.8 \times 10^{15} T^{-1} \exp\left(\frac{-59369.074}{T}\right)$	$1.51713 \times 10^9 T^{-0.525515} \exp\left(\frac{840.326}{T}\right)$
$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	$1.3 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-1509.814}{T}\right)$	$1.275 \times 10^{10} T^{-0.427332} \exp\left(\frac{-27672.11}{T}\right)$
$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	$1.3 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-52913.94}{T}\right)$	$5.73655 \times 10^6 T^{0.313192} \exp\left(\frac{7491.96}{T}\right)$
$\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	$6.8 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-9242.577}{T}\right)$	$8.613 \times 10^8 T^{0.250384} \exp\left(\frac{-404.780}{T}\right)$
$\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$	$5.0 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-503.27}{T}\right)$	$2.6504 \times 10^9 T^{0.403293} \exp\left(\frac{-25743.37}{T}\right)$
$\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	$2.04 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-538.5}{T}\right)$	$2.768 \times 10^7 T^{0.808315} \exp\left(\frac{-17119.5}{T}\right)$
$\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$8.0 \times 10^9 \exp\left(\frac{-1499.75}{T}\right)$	$4.05365 \times 10^{10} T^{0.130335} \exp\left(\frac{-35609.15}{T}\right)$
$\text{H}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{H}_2\text{O}_2$	$7.91 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-12581.78}{T}\right)$	$5.07334 \times 10^{12} T^{0.411882} \exp\left(\frac{-3160.89}{T}\right)$
$\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	$6.1 \times 10^9 \exp\left(\frac{-719.678}{T}\right)$	$3.761 \times 10^9 T^{0.14644} \exp\left(\frac{-18043.1}{T}\right)$
$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}_2$	1.8×10^9	$1.0845 \times 10^{10} T^{0.0205195} \exp\left(\frac{-16734.1}{T}\right)$
$\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}_2\text{O}$	7.8×10^8	$1.04212 \times 10^5 T^{0.89952} \exp\left(\frac{-33982.3}{T}\right)$
$\text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	$1.44 \times 10^{14} \exp\left(\frac{-22903.875}{T}\right)$	$8.487 \times 10^4 T^{1.21277} \exp\left(\frac{3519.125}{T}\right)$
$\text{H} + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH}$	$7.1 \times 10^{12} T^{-1}$	$2.1057 \times 10^{16} T^{-1.0666587} \exp\left(\frac{-51573.5}{T}\right)$

جدول پ-۳- مکانیزم های کلی تک مرحله ای [۴۰] و [۲۸] (واحدها بر حسب mol, K, cm)

واکنش	k_f	k_b
$C_4H_6 + 2O_2 \longrightarrow 4CO + 3H_2$	$3.8 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-1.52 \times 10^4}{T}\right) \times [C_4H_6]^{0.5} [O_2]^{1.25}$	0
$CO + 0.5O_2 \rightleftharpoons CO_2$	$10^{14.6} \times \exp\left(\frac{-2.0143 \times 10^4}{T}\right) \times [CO]^1 [H_2O]^{0.5} [O_2]^{0.25}$	$5 \times 10^8 \exp\left(\frac{-2.0143 \times 10^4}{T}\right) \times [CO_2]^{-1}$