

تحلیل عددی-پارامتری عملکرد شیمیایی بسترهای کاتالیزوری پراکسید هیدروژن برای استفاده در رانشگرهای تک پیش‌رانه فضایی

پژوهش‌های کاربردی
مهندسی شیمی-پلیمر

محمد ندافی پور میبیدی^۱، هادی حسینی اناری^۲، حسن ناصح^۳، فتح اله امی^۴

۱- تهران، پژوهشگاه هوا فضا، مهندسی هوا فضا، دانشجوی دکتری

۲- تهران، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، مهندسی مکانیک، کارشناس ارشد

۳- تهران، استادیار پژوهشگاه هوا فضا

۴- تهران، پژوهشگاه هوا فضا و دانشگاه تربیت مدرس، مهندسی مکانیک، دانشیار

فصلنامه علمی - پژوهشی بین‌رشته‌ای

سال اول، شماره ۲، نسخه ۱،

زمستان ۱۳۹۶، صفحه ۲۴-۱۵

چکیده

هدف از ارائه این مقاله، تحلیل عملکرد شیمیایی بسترهای کاتالیستی پراکسید هیدروژن به دو روش عددی و پارامتری است. عملکرد شیمیایی مناسب بستر کاتالیزوری، به‌عنوان یکی از اجزای اصلی رانشگرهای تک‌پیش‌رانه، نقش به‌سزایی در رسیدن به دو هدف اصلی در طراحی (کمینه‌سازی وزن و بیشینه‌سازی ضربه ویژه) ایفا می‌کند. بنابراین، به‌منظور بررسی تأثیر قطر گرانول (گوی‌های) کاتالیزوری بر نحوه عملکرد شیمیایی بستر، طول بهینه و میزان افت فشار، شبیه‌سازی‌هایی برای بسترهای با قطرهای مختلف گوی‌های کاتالیزوری به قطرهای ۰/۴ الی ۰/۹ میلی‌متر صورت پذیرفته است. در شبیه‌سازی‌ها، پراکسید هیدروژن ۹۰٪، با سرعت ۰/۱۴ متر بر ثانیه به‌عنوان سیال ورودی تعریف شده است. در هر شبیه‌سازی، تغییرات غلظت اجزای واکنش در طول بستر کاتالیزوری برای ورودی جریان پراکسید هیدروژن مایع تعیین شده است. محاسبه افت فشار در اثر عبور جریان در طول بستر کاتالیزوری، از دیگر فعالیت‌های این مطالعه است. نتایج این مطالعه حاکی از آن است که با افزایش قطر گوی‌های کاتالیزوری، میزان سطح مؤثر واکنش کاهش پیدا کرده و طول موردنیاز بستر کاتالیزوری به‌منظور تجزیه کامل پیش‌رانه نیز افزایش می‌یابد. علاوه بر طول موردنیاز برای تجزیه کامل پراکسید هیدروژن، افت فشار ایجادشده در بسترهای کاتالیزوری مختلف نیز محاسبه و مورد ارزیابی قرار گرفته است. نتایج بررسی افت فشار بستر کاتالیزوری نشان می‌دهد که در سرعت مشخص پیش‌رانه، در قطر خاصی کمینه افت فشار ایجاد خواهد شد. دلیل این امر برهم‌کنش تأثیرات میزان سطح واکنش و طول بستر کاتالیزوری بر افت فشار ایجادشده در طی فرایند تجزیه پیش‌رانه است. نتایج حاصل از تحلیل توسط نتایج تجربی تأیید شده است.

واژه‌های کلیدی

عملکرد شیمیایی
بسترهای کاتالیزوری
پراکسید هیدروژن
رانشگرهای تک پیش‌رانه فضایی

*مسئول مکاتبات:

hnaseh@ari.ac.ir

۱ مقدمه

کاربرد پراکسید هیدروژن با غلظت بالا یا پراکسید هیدروژن با کیفیت پیش‌رانه (HTP) با توجه به سهولت کاربری، سمیت و قیمت نسبتاً پایین از دیرباز مورد توجه پژوهشگران حوزه پیش‌رانش بوده است [۱]. این ماده به‌عنوان پیش‌رانه مایع به‌صورت تک-پیش‌رانه و همچنین به‌عنوان اکسنده در رانشگرهای پیش‌رانه مایع [۲] و هیبریدی [۳]، به کار گرفته شده است.

پراکسید هیدروژن ماده‌ای نسبتاً ناپایدار است و در مجاورت برخی فلزات، از جمله نقره و پلاتین، به آب و اکسیژن تجزیه می‌شود. علی‌رغم بالا بودن انرژی فعال‌سازی تجزیه پراکسید هیدروژن، این ماده در مجاورت کاتالیزورهای فلزی با کاهش انرژی فعال‌سازی مواجه شده و سرعت این واکنش افزایش می‌یابد. فرایند تجزیه پراکسید هیدروژن، گرمازا است. انرژی آزاد شده طی این فرایند در حدود 98 kJ/mol است. بخشی از گرمای آزاد شده در واکنش، در حدود 44 kJ/mol ، صرف تبخیر آب حاصل از واکنش می‌شود و مقدار انرژی باقی‌مانده، در حدود kJ/mol 54 ، به صورت گرمای محسوس، موجب افزایش دمای بستر کاتالیزوری می‌شود. این افزایش دما در حالت بی‌دررو، افزایش دمای بستر تا حدود $1250\text{K} - 850$ را در پی خواهد داشت.

واکنش تجزیه خودبه‌خودی پراکسید هیدروژن با انرژی آزاد شده نسبتاً بالا، در رانشگرهای شیمیایی به خصوص رانشگرهای تک‌پیش‌رانه، بسیار متداول است. رانشگرهای تک‌پیش‌رانه معمولاً در مأموریت‌های فضایی به عنوان یکی از عملگرهای زیرسامانه کنترل وضعیت و موقعیت فضاپیما مورد استفاده قرار می‌گیرند. با توجه به کارکرد فضایی، دست‌یابی به عناصر بهینه، با بیشینه کارایی و کمینه وزن، از اهداف طراحان رانشگرها است. لذا تجزیه کامل پراکسید هیدروژن در بستر کاتالیزوری با قید بهینه بودن سایر متغیرهای عملکردی رانشگر (فشار و دمای محفظه رانش)، به خصوص در کاربردهای فضایی به منظور افزایش هرچه بیشتر ضربه ویژه و کاهش جرم

رانشگر بسیار حائز اهمیت است [۴].

نوع، شکل، سطح مخصوص و نحوه چیدمان کاتالیزور در بستر، بر نرخ تجزیه پیش‌رانه تأثیرگذار است. طراحی و توسعه رانشگرهایی با قید دست‌یابی به بیشینه خواص مربوط به انرژی پیش‌رانه در عین کمینه کردن وزن رانشگر، نیازمند طراحی مناسب، تعیین اندازه بستر و شناسایی عملکرد بسترهای کاتالیزوری است [۵]. کوتاه بودن طول بستر، تجزیه ناقص و کاهش کارایی بستر و در نهایت کاهش ضربه ویژه رانشگر را به دنبال خواهد داشت [۶]. طولانی بودن طول بستر کاتالیزوری نیز باعث افزایش وزن بستر و رانشگر و در صورت عدم عایق‌کاری حرارتی مناسب، کاهش دمای محصولات واکنش، حتی میعان بخار آب و نهایتاً کاهش کارایی بستر و ضربه ویژه رانشگر را به دنبال خواهد داشت [۷]. در سال‌های گذشته مطالعات بسیاری به شکل مطالعات تجربی و عددی برای رسیدن به این مهم صورت پذیرفته است.

در سال ۱۹۵۴ آزمون‌هایی در خصوص نحوه تجزیه پراکسید هیدروژن در راکتور لوله‌ای توسط ساترفیلد (Satterfield) و همکاران انجام شد [۱]. در سال ۲۰۰۰ شبیه‌سازی عددی جریان پراکسید هیدروژن با تجزیه کاتالیزوری در عبور از بستر توری نقره توسط چیپتا (Chiappetta) و همکاران انجام شد [۸]. در این مطالعه از فرض جریان متقارن محوری، انجام سینتیک واکنش شیمیایی تجزیه پراکسید هیدروژن در واکنش تک‌مرحله‌ای و استفاده از قانون دارسی برای محیط متخلخل به منظور محاسبه افت فشار صورت گرفت. در این مطالعه تغییرات ضریب ثابت نمایی قانون آرنیوس در تناسب خطی با نسبت سطح به حجم بستر و همچنین انرژی فعال‌سازی واکنش، 5032 ژول بر مول فرض شد.

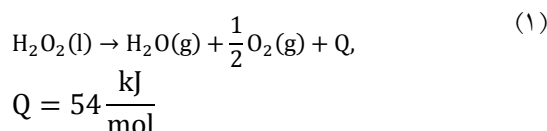
کورپنینگ (Corpening) و همکارانش نیز در سال ۲۰۰۴ تجزیه گرمایی پراکسید هیدروژن مایع را که در جریان داغ محصولات تجزیه پراکسید هیدروژن تزریق می‌شد مورد ارزیابی قرار دادند [۸-۱۰]. مدل آن‌ها پایا، جریان بی‌دررویک‌بعدی و دربرگیرنده تبخیر قطره، سینتیک

۲ شبیه‌سازی

در این تحقیق شناسایی خواص مربوط به انرژی پراکسید هیدروژن و شناسایی سامانه‌ای عملکرد کاتالیزور به ترتیب در مدل‌سازی صفر بعدی و یک دسته شبیه‌سازی سه بعدی مورد ارزیابی قرار گرفت.

۱-۲ مدل‌سازی صفر بعدی

به منظور شناسایی ماهیت تجزیه پراکسید هیدروژن، معادله ۱، مدل تجزیه بی‌بعد این واکنش در نرم افزار MATLAB تهیه شد. در این مدل واکنش پایای پراکسید هیدروژن با فرض فرایند بی‌دررو پیاده شده است.



مدل‌سازی بی‌بعد واکنش تجزیه با استفاده از مدل آرنیوس، مطابق دسته معادلات ۲ و ۳، انجام شد. طبق معادلات مرتبه اول سینتیک آرنیوس، سرعت واکنش (r) به صورت ضرب ثابت سرعت سینتیک شیمیایی (k) در غلظت گونه (C_i) تعریف می‌شوند. ضرب ثابت سرعت سینتیک شیمیایی، معادله ۳ به صورت تابع نمایی از انرژی فعال‌سازی (E_a)، دما (T)، ثابت جهانی گازها و ضریب تابع نمایی (A) تعریف می‌شود.

$$r_i = kC_i \quad (2)$$

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3)$$

انرژی فعال‌سازی تنها تابعی از ماهیت واکنش و نوع کاتالیزور استفاده شده در واکنش است و از هندسه و شرایط واکنش تأثیر نمی‌پذیرد. برای تجزیه پراکسید هیدروژن با کاتالیزور نقره انرژی فعال‌سازی واکنش در حدود $52/5 \text{ kJ/mol}$ است. A ضریب تابع نمایی بوده و واحد آن sec^{-1} است. این عامل مانند ضریب مقیاس عمل می‌کند. ضریب تابع نمایی برخلاف انرژی فعال‌سازی

تجزیه فاز گازی، قوانین پایستگی جرم و گشتاور برای هر دو فاز بود.

پاسینی (Pasini) و همکارانش در سال ۲۰۰۸ مدل پایای یک بعدی از تجزیه پراکسید هیدروژن را در بستر کاتالیزوری از نوع گلوله‌ای (Pellet Type) به منظور کاربرد در طراحی پارامتری بستر کاتالیزوری متداول رانشگرهای تک پیش‌رانه کوچک‌رانه کردند [۱۱]. در این مدل جریان دو فاز، مایع-گاز-بخار، پیش‌رانه درون بستر کاتالیزوری با فرض جریان همگن، بی‌دررو، واکنش شیمیایی که مشخصه‌های آن به ترکیبات محلی وابسته است، ارزیابی و گزارش شد.

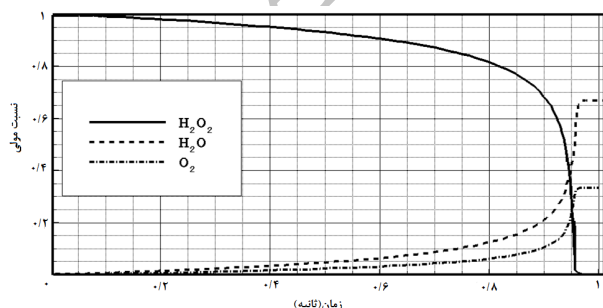
در ایران نیز اولین نمونه از رانشگرهای تک پیش‌رانه، توسط قاسمی و همکاران در سال ۱۳۹۰ ساخته شد و مورد آزمایش قرار گرفت [۱۲]. آزمون‌های انجام شده در این مطالعه به منظور امکان‌سنجی ساخت موتور تک پیش‌رانه برای کاربردهای فضایی انجام شده است. همچنین در این مطالعه با تغییر طول بستر کاتالیزوری و محاسبه سرعت مشخصه برای هر آزمون، طول بستر مناسب برای تجزیه کامل پیش‌رانه استخراج شده است. پراکسید هیدروژن ۹۲٪ به عنوان پیش‌رانه و توری‌های نقره به عنوان بستر کاتالیزوری استفاده شدند.

با توجه به روند فناوری در ساخت و پرتاب ماهواره‌های کشور، نیازمندی به طراحی، ساخت، آزمون و استفاده از زیرسامانه‌های پیش‌رانشی تک پیش‌رانه دور احساس می‌شود. دست‌یابی به دانش فنی ساخت و طراحی بسترهای کاتالیزوری به عنوان یکی از گلوگاه‌های دست‌یابی به چین زیرسامانه‌هایی مطرح است. در تحقیق حاضر برای درک صحیح از عملکرد بسترهای کاتالیزوری گلوله‌ای، مطالعه‌ای در خصوص تأثیر قطر گوی‌های کاتالیزوری بر نحوه عملکرد بستر، طول بهینه و میزان افت فشار، انجام شد. هدف این مطالعه ارائه روشی برای طراحی هندسه مناسب بستر کاتالیزوری گلوله‌ای و تعیین کمینه طول آن برای تجزیه کامل پیش‌رانه است.

پراکسید هیدروژن در شکل ۱ نمایش داده شده است. همانطور که انتظار می رود با پیشرفت واکنش و مصرف پراکسید هیدروژن، آب و اکسیژن تولید می شود. نرخ مصرف پراکسید هیدروژن برابر با نرخ تولید آب است؛ اما اکسیژن با نصف سرعت تجزیه پراکسید هیدروژن تولید می شود. با تجزیه کامل پراکسید هیدروژن محصولات در دمایی در حدود ۱۲۵۰ کلوین به تعادل می رسند. منحنی پیشرفت واکنش شیمیایی و تجزیه پراکسید هیدروژن به آب و اکسیژن در روند پیشرفت واکنش به صورت شکل ۲ است. زمان استخراج شده از این نمودار برای تجزیه کامل پراکسید هیدروژن معرفی زمان ماند تجزیه پراکسید هیدروژن در بستر تجزیه است. به منظور بررسی تأثیر تغییرات ضریب تابع نمایی A بر سرعت واکنش مطالعه پارامتری انجام شد. نتایج این مطالعه در شکل ۳ ارائه شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش این ضریب سرعت انجام واکنش افزایش می یابد؛ به نحوی که برای ضرایب تابع نمایی بزرگتر از 10^8 ، زمان ماند کوچکتر از ۱ میلی ثانیه خواهد بود.

۲-۲ شبیه سازی سه بعدی

در این مطالعه پس از استخراج معادلات حاکم، هندسه، شبکه بندی مسأله تعریف، و شبیه سازی سه بعدی به منظور استخراج حل جریان انجام پیاده سازی شد.



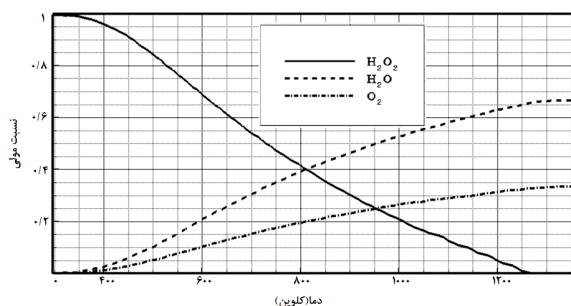
شکل ۲- منحنی پیشرفت واکنش تجزیه پراکسید هیدروژن با فرض مساوی 10^8 s^{-1}

علاوه بر نوع واکنش، تابعی از نوع کاتالیزور، هندسه و شرایط واکنش است. ژو (Zhou) و همکارانش در سال ۲۰۰۵ برای واکنش تجزیه پراکسید هیدروژن با کاتالیزور نقره اندازه ضریب نمایی را 10^9 s^{-1} تخمین زدند [۷]. هم چنین در سال ۲۰۱۴، رایان (Ryan) و همکاران مقدار 10^8 s^{-1} را برای تجزیه پراکسید هیدروژن در بستریهای کاتالیزوری فلزی استفاده شده در میکرو رانشگر خود پیشنهاد دادند [۱۳].

با فرض فرایند بی درروی واکنش، تغییرات دمای واکنش، همانند آنچه در رابطه ۴ ارائه شده است، به صورت نسبت تغییرات آنتالپی پیشرفت واکنش به ضریب گرمای ویژه کل واکنش، واکنش دهنده ها و محصولات، در هر لحظه محاسبه خواهد شد.

$$(4) \quad \frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{i=1}^n -\dot{r}_i h_i}{\sum_{i=1}^n -C_i C_{P_i}}$$

با استفاده از برنامه توسعه داده شده، دما و غلظت اجزای واکنش متناسب با پیشرفت تجزیه به عنوان تابعی از زمان قابل محاسبه خواهد بود. نمونه ای از نتایج محاسبات انجام شده برای تجزیه پراکسید هیدروژن خالص ۱۰۰٪ با دمای اولیه ۳۰۰ K، با فرض تجزیه در شرایط بی دررودر شکل ۱ تا شکل ۳ نمایش داده شده است. منحنی تغییرات دما نسبت به پیشرفت واکنش تجزیه



شکل ۱- منحنی تغییرات دما نسبت به پیشرفت واکنش تجزیه پراکسید هیدروژن

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (5)$$

$$\rho C_p \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pI + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot u)I] + F \quad (6)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (7)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (D_i \nabla c_i) + R_i \quad (8)$$

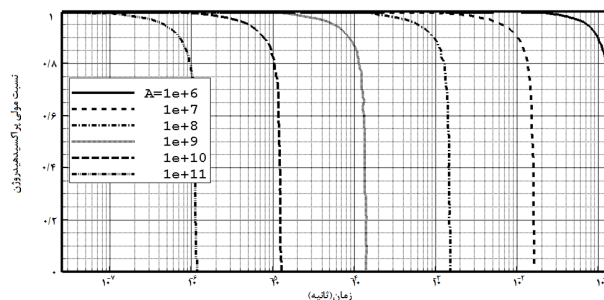
در تحقیق حاضر حل معادلات حاکم برای محاسبه و پیش‌بینی فیزیک جریان همراه با تجزیه شیمیایی در بستر کاتالیزوری با استفاده از نرم‌افزار تجاری کامسول (Comsol) که حلگری بر پایه تحلیل اجزای محدود است؛ انجام شده است. مدل تعادل شیمیایی و مدل آرنیوس برای مدل‌سازی تجزیه روی سطوح واکنش مورد استفاده قرار گرفت. همچنین برای مدل‌سازی خصوصیات آشفته‌گی جریان با استفاده از مدل کی-امگا (K- ω) محاسبه شد.

۲-۲-۲ هندسه و شبکه بندی

برای شبیه‌سازی نحوه قرارگیری گوی‌های کاتالیزوری در بستر، حالات مختلف چیدمان کره‌های همسان در استوانه مورد ارزیابی قرار گرفت. نمونه‌ای از این چیدمان‌ها در شکل ۴ نمایش داده شده است. با توجه به کوچک بودن ابعاد گوی‌ها و عدم امکان چیدمان منظم گوی‌ها در حالت واقعی و هم‌چنین به منظور دستیابی به بیش‌ترین گوی در حجم مشخص، چیدمان (ج) برای شبیه‌سازی انتخاب شد.

شبیه‌سازی چیدمان گوی‌های کاتالیزوری در حجم بستر، با قرارگیری و تکرار صفحات گوی به صورت شکل ۵ انجام پذیرفت.

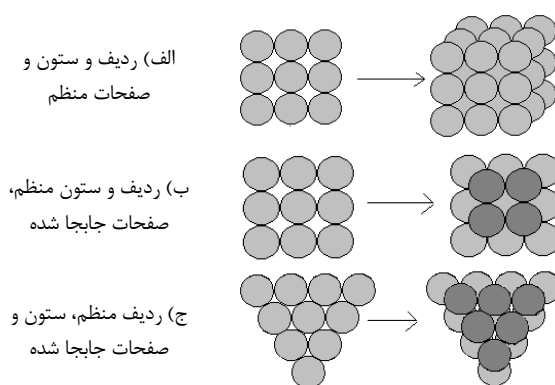
برای ساده‌سازی هندسه و کاهش محاسبات انجام شده مسیر عبور جریان از بین گوی‌ها به صورت شکل ۶ در نظر گرفته شد. در نهایت هندسه شبیه‌سازی از کم کردن حجم کاتالیست‌ها از مکعب مستطیلی با قاعده مربعی و طول ضلع معادل قطر گوی‌های کاتالیستی استخراج می‌شود. طول بستر در شبیه‌سازی‌های مختلف با قید تجزیه کامل پیش‌رانه به دست می‌آید.



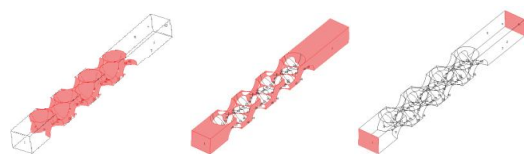
شکل ۳- تأثیر ضریب نمایی در سرعت واکنش تجزیه پراکسید هیدروژن

۱-۲-۲ معادلات حاکم

معادلات حاکم بر مسأله شبیه‌سازی تجزیه کاتالیزوری جریان سیال مانند هر واکنش شیمیایی دیگر، معادله پیوستگی در جهات مختلف، معادلات نویراستوکس، معادلات انرژی و معادلات گونه‌ها را شامل می‌شود. این معادلات به صورت دسته معادلات ۵ الی ۸ نشان داده شده است. در این معادلات u سرعت سیال، ρ چگالی، μ ویسکوزیته، P فشار و F نیروی کشش سطحی است. ضریب نفوذ (Diffusion Coefficient) برای پراکسید هیدروژن مایع، برابر با $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ در نظر گرفته می‌شود [۱۳].

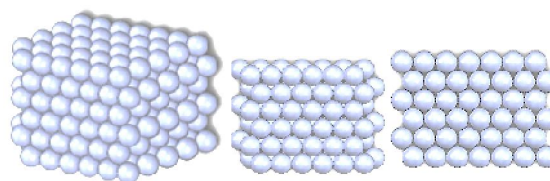


شکل ۴- حالت‌های مختلف چیدمان گوی‌ها در کنار یکدیگر



شکل ۷- (الف) ورودی و خروجی و تقارن (ب) تقارن (ج) سطوح واکنش دهنده

شکل ۷- طرح واره معرفی شرایط مرزی در شبیه‌سازی عددی بستر کاتالیزوری



شکل ۵- نحوه شبیه‌سازی چیدمان گوی

۲-۲-۲ شرایط مرزی

با توجه به هندسه انتخاب شده سه شرط مرزی ورودی و خروجی، تقارن و سطح واکنش برای حل مسأله معرفی شد. نحوه معرفی شرایط مرزی در شکل ۷ نمایش داده شده است. در شرط مرزی ورودی مشخصات و سرعت پیش‌رانه ورودی به بستر معرفی می‌شود. شرط مرزی خروجی نیز توسعه یافتگی جریان است. در سطوح واکنش ضریب تابع نمایی و انرژی فعال‌سازی واکنش ارائه شده است.

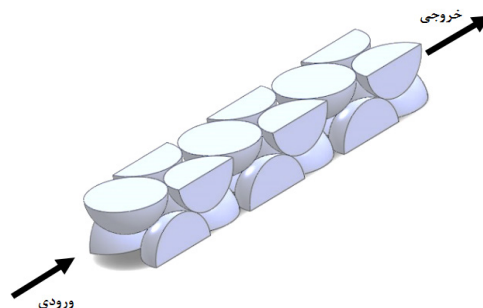
۲-۲-۳ اعتبارسنجی

به منظور اعتبارسنجی شبیه‌سازی انجام شده در تحقیق حاضر به دلیل نبود مطالعه مشابه برای تصدیق نتایج مربوط، مقایسه‌ای بین نتایج آزمون‌های پاسینی و همکارانش [۱۴] با شبیه‌سازی پیاده شده با شرایط عملکرد متناظر موتور آزمایش شد. آن‌ها در آزمایش‌های خود از کاتالیزورهای کروی شکل با قطر تقریبی در حدود ۰/۶ میلی‌متر که از پلاتین لایه نشانی شده بر پایه سرامیکی گاما آلومینا تشکیل شده بود، همانند آنچه در شکل ۸ نمایش داده شده، استفاده کردند.

مجموعه‌ای از بستر کاتالیزوری در موتور آزمایشگاهی که مشخصات آن به طور خلاصه در جدول ۱ آمده است، برای آزمون‌ها چیده شد.

این مجموعه در دو آزمون با پیش‌رانه پراکسید هیدروژن با غلظت‌های وزنی متفاوت، ۷۰ و ۸۷/۵٪، با دبی جرمی به ترتیب ۳/۸۵ و ۳/۶۵ گرم بر ثانیه مورد آزمون قرار گرفت. به منظور اعتبارسنجی شبیه‌سازی انجام شده در این تحقیق با شرایط آزمون‌های فوق دو

شبکه بندی استفاده شده در این مطالعه از نوع شکل نیافته (Unstructured) بود. بررسی سامانه‌ای با کوچک کردن شبکه برای اطمینان از استقلال نتایج ریز شدن بیشتر شبکه انجام شد. در این مطالعه بستری با طول دوازده میلی‌متر از گوی‌هایی با قطر ۰/۶ میلی‌متر در نظر گرفته شد. هندسه در سه حل با حداکثر طول المان ۰/۰۶، ۰/۰۰۶ و ۰/۰۰۰۶ روی سطوح واکنش و حداکثر طول ۱۰ برابری برای سطوح غیر واکنشی برای شرایط ورودی یکسان مورد ارزیابی قرار گرفت. غلظت پیش‌رانه در خروجی به عنوان معیار ارزیابی در راه‌حل‌های با المان‌های سطح واکنش ۰/۰۰۶ و ۰/۰۰۰۶ کمتر از ۱/۲ درصد اختلاف داشتند. بنابراین در این مطالعه سطوح غیر واکنش و سطوح واکنش به ترتیب با طول المان کمتر از یک دهم و یک صدم قطر گوی‌ها شبکه بندی شده و در نهایت شبکه بندی روی حجم مسأله انجام شد.



شکل ۶- طرح واره هندسه مورد مطالعه در شبیه‌سازی عددی بستر کاتالیزوری

جدول ۲- نتایج شبیه‌سازی تحقیق فعلی و آزمون‌های انجام‌شده توسط پاسینی [۱۴]

مقدار		متغیر
٪۸۷.۵	٪۷۰	غلظت پیش‌رانه
۴۶	۳۵	طول محاسبه شده در شبیه‌سازی (mm)
٪۵۲	٪۷۳	بازده سرعت مشخصه در آزمایش [۱۴]



شکل ۸- نمونه‌ای از کاتالیزورهای استفاده شده توسط پاسینی و

همکاران [۱۴]

گوی‌های کاتالیزوری به قطرهای ۰/۴ الی ۰/۹ میلی‌متر صورت گرفت. در کلیه شبیه‌سازی‌ها پراکسید هیدروژن با غلظت مولی ۴۲ کیلومول بر متر مکعب، معادل غلظت وزنی ۹۰٪، با سرعت ۰/۱۴ متر بر ثانیه به‌عنوان سیال ورودی تعریف شد. نمونه‌ای از نتایج تغییرات غلظت پراکسید هیدروژن در فرایند تجزیه روی بستر کاتالیستی در یکی از شبیه‌سازی‌ها در شکل ۹ نمایش داده شده‌است. تغییرات غلظت پراکسید هیدروژن در طول بستر کاتالیزوری برای بستر کاتالیزوری با گوی‌های مختلف در نمودار شکل ۱۰ ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در طول معینی از بستر کاتالیزوری با کاهش قطر گوی‌ها، تجزیه پراکسید هیدروژن افزایش می‌یابد. دلیل افزایش نرخ واکنش در واحد طول بستر را می‌توان به افزایش میزان سطح تماس کل گوی‌ها با پراکسید هیدروژن نسبت داد. در نتیجه واکنش سریع‌تر

شبیه‌سازی برای تعیین طول مناسب برای تجزیه کامل پیش‌رانه انجام شد. نتایج این شبیه‌سازی‌ها به همراه نتایج آزمون‌های پاسینی و همکارانش در جدول ۲ ارائه شده است. با فرض طول بستر کاتالیستی در حدود ۳۲ میلی‌متر برای هر دو آزمایش، نتایج شبیه‌سازی نیازمندی به طول بستر بیشتر برای هر دو آزمون را نشان می‌دهد. همان‌طور که بازده سرعت مشخصه نیز نشان می‌دهد، کوچک بودن طول لازم برای تجزیه پیش‌رانه به کاهش کارایی موتور در هر دو آزمون منجر شده است.

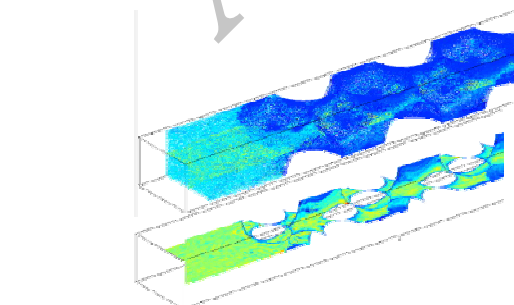
۳ نتایج و بحث

به‌منظور بررسی تأثیر قطر گوی‌های کاتالیزوری بر نحوه عملکرد بستر، طول بهینه و میزان افت فشار، شبیه‌سازی‌هایی برای بستری‌های با قطرهای مختلف

جدول ۱- مشخصات اصلی موتور آزموده شده توسط پاسینی و

همکاران [۱۴]

مقدار	متغیر
۸	قطر داخلی موتور (میلی‌متر)
۴	نسبت طول به قطر موتور
۲	قطر گلوگاه نازل
۳/۴۸	نسبت انبساط نازل



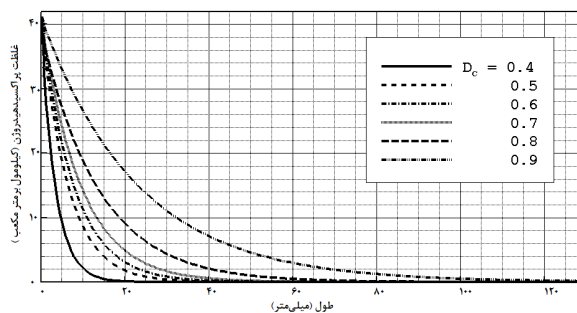
شکل ۹- فرایند تجزیه شدن و تغییرات غلظت پراکسید هیدروژن در بخشی از بستر کاتالیزوری

علاوه بر طول مورد نیاز برای تجزیه کامل پراکسید هیدروژن، افت فشار ایجاد شده در بسترهای کاتالیزوری مختلف نیز محاسبه و مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج تغییرات افت فشار بستر کاتالیزوری نسبت به قطر گوی‌ها برای رسیدن به تجزیه کامل پیش‌رانه در شکل ۱۱ نمایش داده شده است. بررسی افت فشار بستر کاتالیزوری نشان می‌دهد که در سرعت پیش‌رانه مشخص، در قطر خاصی کمینه افت فشار ایجاد خواهد شد.

همان‌طور که در شکل ۱۲ نمایش داده شده است، با کاهش قطر گوی‌های کاتالیزوری نرخ افت فشار در واحد طول بستر کاتالیزوری افزایش می‌یابد. از سوی دیگر هرچند افزایش قطر گوی‌ها، افت فشار واحد طول بستر را کاهش می‌دهد اما طول بیشتری از بستر کاتالیزوری را برای انجام کامل واکنش تجزیه نیاز دارد، لذا در قطرهای بزرگ افزایش قطر به افزایش افت فشار کل بستر کاتالیزوری می‌انجامد.

۴ نتیجه‌گیری

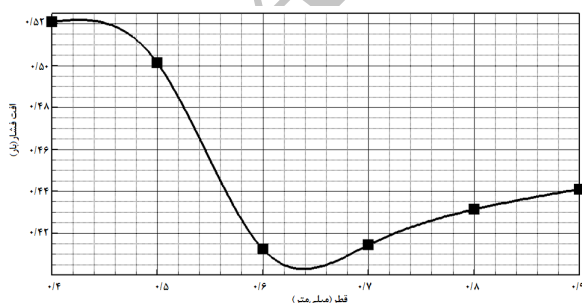
برای درک صحیح عملکرد شیمیایی بسترهای کاتالیزوری گلوله‌ای، مطالعه‌ای در خصوص تأثیر قطر گوی‌های کاتالیزوری بر نحوه عملکرد شیمیایی بستر، طول بهینه و میزان افت فشار، انجام شد. در این مطالعه پس از



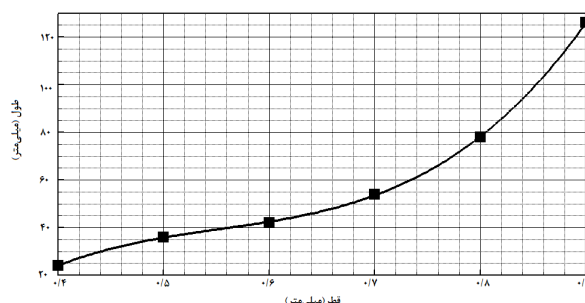
شکل ۱۰- تغییرات غلظت پراکسید هیدروژن در طول بستر برای قطر گوی‌های مختلف

و طول بستر کاتالیزوری مورد نیاز برای انجام کامل واکنش شیمیایی تجزیه، کاهش می‌یابد. از طرف دیگر با افزایش قطر گوی‌های کاتالیزوری فضاهای خالی بین گوی‌ها افزایش یافته و میزان تماس کاهش پیدا کرده و طول مورد نیاز برای بستر کاتالیزوری افزایش می‌یابد.

منحنی تغییرات طول مورد نیاز برای تجزیه کامل پراکسید هیدروژن بر حسب قطر گوی‌های کاتالیزوری در طول بستر کاتالیزوری در شکل ۱۱ ارائه شده است. همان‌طور که در شکل ۱۱ نشان داده شده است هر چه اندازه قطر گوی‌ها کوچک‌تر باشد تجزیه پیش‌رانه در طول کم‌تری انجام می‌شود.



شکل ۱۲- منحنی تغییرات افت فشار کاتالیزوری بر حسب قطر گوی‌های کاتالیزوری



شکل ۱۱- منحنی تغییرات طول مورد نیاز برای تجزیه کامل پراکسید هیدروژن بر حسب قطر گوی‌های کاتالیزوری در طول بستر کاتالیزوری

که تمام پراکسید هیدروژن تجزیه شود، تغییر داده شد. نتایج این مطالعه حاکی است که با افزایش قطر گوی‌های کاتالیزوری، میزان سطح مؤثر واکنش کاهش پیدا کرده و طول موردنیاز بستر کاتالیزوری برای تجزیه کامل پیش‌رانه نیز افزایش می‌یابد. علاوه بر طول موردنیاز برای تجزیه کامل پراکسید هیدروژن، میزان تخلخل و افت فشار ایجادشده در بسترهای کاتالیزوری مختلف نیز محاسبه و مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج بررسی افت فشار بستر کاتالیزوری نشان می‌دهد که در سرعت پیش‌رانه مشخص، در قطر خاصی کمینه افت فشار ایجاد خواهد شد. دلیل این امر برهم‌کنش تأثیرات میزان تخلخل و طول بستر کاتالیزوری برافت فشار ایجادشده در طی فرایند تجزیه پیش‌رانه است.

استخراج معادلات حاکم بر مسأله تجزیه پیش‌رانه در بسترهای کاتالیزوری، شبیه‌سازی‌های صفر بعدی و سه بعدی برای مطالعه پارامتریانجام شد. در کلیه شبیه‌سازی‌ها پراکسید هیدروژن ۹۰٪، به‌عنوان پیش‌رانه مورد ارزیابی قرار گرفت. در شبیه‌سازی صفر بعدی تأثیر متغیرهای مدل‌سازی احتراقی بر نرخ انجام واکنش مورد مطالعه قرار گرفت. در شبیه‌سازی‌های سه بعدی سرعت پیش‌رانه ورودی در حدود ۰/۰۱۴ متر بر ثانیه برای بسترهای با قطرهای مختلف گوی‌های کاتالیزوری به قطرهای ۰/۴ الی ۰/۹ میلی‌متر به‌صورت شکل ۱۰ صورت گرفت. برای هر شبیه‌سازی تغییرات غلظت اجزای واکنش در طول بستر کاتالیزوری هر یک برای ورودی جریان پراکسید هیدروژن مایع استخراج شد. برای هر قطر گوی کاتالیزوری، طول بستر تاجایی

فهرست علائم

A	ضریب تابع نمایی (s^{-1})
C	غلظت مولی
C_p	ضریب گرمای ویژه
D	قطر کاتالیزور (mm)
Ea	انرژی فعال‌سازی
F	نیروی کشش سطحی
k	سرعت سینتیک شیمیایی
L	طول بستر کاتالیزوری (mm)
P	فشار ($kgm^{-1}s^{-2}$)
r	سرعت واکنش ($mols^{-1}$)
R	ثابت گاز
T	دما (K)
u	سرعت سیال
علائم یونانی	
ρ	چگالی
μ	لزجت دینامیکی ($kgm^{-1}s^{-1}$)

مراجع

- 1- Mark Ventura P., Wernimont E., Heister S., and Steve Yuan P., "Rocket Grade Hydrogen Peroxide (RGHP) for Use in Propulsion and Power Devices-historical Discussion of Hazards," 43rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit. 2007.
- 2- S. Schneider, Hawkins T., Ahmed Y., Rosander M., Hudgens L., and Mills J., "Green Bipropellants: Hydrogen Rich Ionic Liquids that Are Hypergolic with Hydrogen Peroxide," *Angewandte Chemie International Edition*, 50, 5886-5888, 2011.
- 3- Ghassemi H., Meibody M., and Shaabani Lakeh K., "Experimental Investigation on the Hybrid Motor Using HTPB/AP Composite Fuel and Hydrogen Peroxide Oxidizer," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, 229, 1171-1182, 2015.
- 4- Sutton G. P. and Biblarz O., *Rocket Propulsion Elements*. John Wiley & Sons, 2010.
- 5- Jung H., Kim J. H., and Kim J. S., "An Approach to the Optimization of Catalyst-bed L/D Configuration in 70 N-class Hydrazine Thruster," *Journal of the Korean Society of Propulsion Engineers*, 17, 30-37, 2013.
- 6- Jo S., "Response Characteristics of H₂O₂ Monopropellant Thrusters with MnO₂-mixed PbO Catalyst," *Aerospace Science and Technology*, 60, 1-8, 2017.
- 7- Hitt D. and Zhou X., "One-dimensional Modeling of Catalyzed H₂O₂ Decomposition in Microchannel Flows," *AIAA Paper*, 2584, 33, 2003.
- 8- Chiappetta L., Spadaccini L., Huang H., Watkins W., and A. Crocker, "Modeling a Hydrogen Peroxide Gas Generator for Rockets," *AIAA Paper*, 3223, 17-19, 2000.
- 9- Corpening J., Heister S. D., Anderson W., and Austin B., "Thermal Decomposition of Hydrogen Peroxide, Part 2: Modeling Studies," *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 22, No. 5, PP. 996-1005, 2006.
- 10- Heister S., Anderson W., Corpening J., and Austin B., "A Model for Thermal Decomposition of Hydrogen Peroxide," *DTIC Document* 2004.
- 11- Pasini A., Torre L., Romeo L., and d'Agostino L., "Performance Modeling and Analysis of H₂O₂ Catalytic Pellet Reactors," *AIAA Paper*, 5025, 2008, 2008.
- 12- Ghassemi H. M., M. N.P.; Asghari, I., "Experimental Investigation on Specific Velocity of Hydrogenperoxid Monopropellant Thruster," Presented at the 11 th Iranian Aerospace Society Conference, Tehran, Iran, March 1-3, 2011.
- 13- McDevitt M. R. and Hitt D. L., "Liquid Phase Hydrogen Peroxide Decomposition for Micro-propulsion Applications," *Advances in Aircraft and Spacecraft Science*, 4, 21-35, 2017.
- 14- Pasini A., Torre L., Romeo L., Cervone A., and d'Agostino L., "Performance Characterization of Pellet Catalytic Beds for Hydrogen Peroxide Monopropellant Rockets," *Journal of Propulsion and Power*, 27, 428-436, 2011.