

تأثیر مدل‌سازی تراک^۱ در محاسبه خواص موج بلاست ناشی از انفجار ابر هوا- سوخت

کیومرث مظاهری*^۱ و علی تارخ^۲

^۱ دانشیار بخش مهندسی مکانیک - دانشکده فنی مهندسی - دانشگاه تربیت مدرس

^۲ دانش آموخته کارشناسی ارشد تبدیل انرژی - دانشکده فنی مهندسی - دانشگاه تربیت مدرس

(تاریخ دریافت ۸۵/۴/۲۶، تاریخ دریافت روایت اصلاح شده ۸۷/۹/۲۵، تاریخ تصویب ۸۷/۱۲/۱۸)

چکیده

هدف کار حاضر بررسی تأثیر دقت شبیه‌سازی موج تراک ایجاد شده در یک ابر هوا- سوخت در شبیه‌سازی عددی موج بلاست ناشی از آن می‌باشد. در کار حاضر از سینتیک شیمیایی کامل در مدل‌سازی تراک استفاده شده است. برای این منظور از یک مکانیزم سینتیکی کوتاه شده ۲۵ مرحله‌ای برای واکنش استیلن، اکسیژن و رقیق‌کننده آرگون، استفاده گردیده است. در راستای هدف کار حاضر مشخصات بلاست ناشی از این مدل‌سازی سینتیکی، با مشخصات بلاست به دست آمده از مدل‌های ساده‌تر نظیر مدل تشابهی تیلر، مدل حجم ثابت و مدل سوزش حجمی CJ مقایسه شده است. بررسی‌های صورت گرفته در این تحقیق نشان می‌دهد که نتایج حاصل از مدل تشابهی تیلر مطابقت بسیار خوبی با مدل سینتیکی دارد، در صورتی که نتایج به دست آمده از مدل حجم ثابت اختلاف بسیار زیادی به خصوص در لبه ابر هوا- سوخت با مدل سینتیکی نشان می‌دهد. هم چنین مدل CJ نیز نسبت به مدل سینتیکی و تیلر اختلاف فاحشی نشان نمی‌دهد. با توجه به زمان بر بودن مدل دقیق (مدل سینتیکی)، و نزدیکی نتایج مربوط به مدل تیلر با حل دقیق، استفاده از این مدل در شبیه‌سازی بلاست حاصل از ابر هوا- سوخت پیشنهاد شده است.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی عددی، سینتیک شیمیایی، موج تراک، موج بلاست، ابر هوا، سوخت، روش PPM

مقدمه

توجه به پیشرفت سال‌های اخیر در شبیه‌سازی امواج ضربه‌ای^۳، قابل حصول است. یکی از مشکلاتی که در این مدل‌سازی وجود دارد به دست آوردن شرایط اولیه موج بلاست می‌باشد. خواص موج تراک در ابر، شرایط اولیه موج بلاست را تشکیل می‌دهند. بنابراین برای مدل‌سازی بلاست و به دست آوردن خواص آن، باید ابتدا تراک در ابر هوا- سوخت مدل شود تا شرایط اولیه برای مدل‌سازی بلاست فراهم آید. به دلیل پیچیدگی‌های فراوان شبیه‌سازی تراک، در تمام شبیه‌سازی گذشته امواج بلاست از مدل‌های بسیار ساده به عنوان شرایط اولیه استفاده شده است. هدف تحقیق حاضر مقایسه مدل‌های مختلف و یافتن کارایی آنها نسبت به شبیه‌سازی کامل موج تراک تشکیل شده در ابر اولیه می‌باشد.

ساده‌ترین مدلی که برای تراک پیشنهاد شده است، در نظر گرفتن موج تراک به صورت یک ناپیوستگی بین بالادست و پایین دست جریان می‌باشد. این نظریه که توسط چاپمن و جوگت در اوایل قرن بیستم ارائه شد، به تئوری CJ مشهور گردید. این نظریه ترمودینامیکی با

در صورتی که مقداری سوخت در هوا پراکنده و با آن مخلوط گردد می‌تواند توده قابل انفجاری را ایجاد نماید که ابر هوا- سوخت نامیده می‌شود. تحلیل و بررسی احتمال و چگونگی انفجار ابر ایجاد شده، در مراکز تولید مواد گازی قابل انفجار از نظر ایمنی و در مقاصد نظامی در طراحی انواع سلاح‌ها دارای اهمیت می‌باشد. در اغلب موارد شعاع ابر ایجاد شده چندان زیاد نبوده ولی در صورت انفجار آن، موج تراک ایجاد شده در ابر پس از گذشتن از لبه ابر، به صورت یک موج بلاست^۴ در محیط اطراف منتشر می‌شود.

امروزه مدل‌سازی بسیاری از پدیده‌های سیالاتی و از جمله موج شاک با استفاده از روش‌های پیشرفته عددی امکان پذیر شده است. این گونه شبیه‌سازی‌ها می‌توانند جایگزین آزمایش‌هایی شوند که علاوه بر آن که پیچیده و خطرناک هستند، انجام آنها مستلزم هزینه‌های بسیار زیادی می‌باشد. با توجه به این که بلاست تنها یک موج شاک میرا می‌باشد که در محیط حرکت می‌نماید، مدل‌سازی آن با استفاده از روش‌های مختلف عددی، با

کرد. وی مدل‌سازی های خود را برای مخلوط هیدروژن-اکسیژن انجام داد.

اولین شبیه سازی عددی تراک گازی با استفاده از حل معادلات غیر پایای اولر در سال ۱۹۶۶ به وسیله فیکت و همکاران وی صورت گرفت. آنها با استفاده از یک مدل ساده واکنشی یک مرحله‌ای و با استفاده از روش مشخصه ها به این کار اقدام نمودند [۵]. این مدل بعد ها مورد استفاده بسیاری از محققین واقع گردید. اولین کوشش در جهت استفاده از مدل‌های کامل تر توسط کروونیکوو و همکارانش صورت گرفت [۶]. ایشان یک مدل دو مرحله‌ای تجربی را ارائه نمودند. تاکی و فوجی وارا از این مدل برای اولین شبیه سازی دو بعدی تراک استفاده کردند [۷].

تحقیقات متعدد در دهه ۹۰ میلادی برای به دست آوردن طبیعت واقعی پدیده آغازش در تراک به این نتیجه منجر گردید که مدل های سینتیکی کلی مانند مدل های یک مرحله ای و دو مرحله ای برای شبیه سازی این پدیده دینامیکی کفایت نمی کنند [۹،۸].

در ادامه این تحقیقات، فدکیو با استفاده از سینتیک شیمیایی تفصیلی هیدروژن، اکسیژن و آرگون تراک در لوله شاک^۶ را با استفاده از روش عددی TVD مدل‌سازی نمود [۱۰]. وی در کار خود از روش جداسازی متغیرها^۷ و در قسمت سینتیکی از زیربرنامه LSODE استفاده کرد.

واریتاراجان و ویلیامز در سال ۲۰۰۱ با استفاده از روش‌های خاص، سینتیک تفصیلی برای اشتعال مخلوط اکسیژن و استیلن را (با ۱۱۸ واکنش مقدماتی و ۲۸ گونه شیمیایی) به یک مکانیزم کوتاه تر (با ۲۱ واکنش مقدماتی و ۱۵ گونه شیمیایی) خلاصه نموده [۱۱]، سپس همین مکانیزم خلاصه را نیز به یک مکانیزم هفت مرحله‌ای و به دنبال آن یک مکانیزم دو مرحله‌ای کاهش دادند که نرخ واکنش‌های مقدماتی این دو مکانیزم با استفاده از نرخ واکنش‌های مکانیزم ۲۵ مرحله‌ای به دست می‌آمد. آنها با استفاده از آنالیزهای مشابه برای سوخت اتیلن نیز این کار را تکرار نمودند [۱۲]. در کار حاضر از مکانیزم ۲۵ مرحله ای ارائه شده به وسیله واریتاراجان و ویلیامز برای شبیه سازی تراک در مخلوط استیلن و اکسیژن استفاده شده است.

از جمله تحقیقات مهم دیگر در این زمینه می توان به کار دیتردینگ اشاره کرد که در سال ۲۰۰۲ برای مدل سازی تراک در مخلوط هیدروژن، اکسیژن و آرگون

فرض این که موج تراک با سرعت ثابت حرکت می‌کند، خواص استاتیکی موج تراک (سرعت، فشار و ...) را محاسبه می‌نماید که مطابقت خوبی با نتایج تجربی دارد [۱].

در گام بعدی در جهت ارائه مدل بهتر برای مدل‌سازی تراک، ضخامت تراک و نرخ آزاد سازی انرژی در واکنش شیمیایی مد نظر قرار گرفت که نتیجه آن مدلی بود که جداگانه توسط زلدویچ، نیومن و دورینگ ارائه گردید که به مدل ZND مشهور می باشد [۱]. در این مدل با فرض دائم بودن تراک (حرکت موج با سرعت CJ)، ضخامتی برای ناحیه واکنش در نظر گرفته می‌شود.

معادلاتی که برای مدل‌سازی تراک در نظر گرفته می‌شوند، معادلات اولر واکنشی^۴ می باشند. پدیده احتراق به عنوان یک پدیده حرارتی-سیالاتی-سینتیکی شبیه سازی عددی مسئله را بسیار پیچیده می‌سازد. در حالت کلی به علت سخت^۵ بودن معادلات سینتیکی، علاوه بر پیچیده بودن روش حل این معادلات، زمان حل نیز بسیار طولانی خواهد بود.

ساده ترین مدل احتراقی آن است که، به جای حل معادلات سینتیکی، تنها گرمای واکنش های شیمیایی به صورت یک جمله ثابت به معادلات اضافه شود. در این صورت گرمای واکنش یا خواص محصولات احتراق را می توان از روابط تعادلی به دست آورد. از جمله این مدل‌ها می توان به مدل سوزش حجمی CJ و مدل حجم ثابت اشاره نمود که برای به دست آوردن شرایط اولیه بلاست مورد استفاده قرار گرفته‌اند. مدل سوزش حجمی CJ اغلب در مدل سازی تراک حاصل از مواد شدیدالانفجار مورد استفاده قرار می‌گیرد [۲]. برای به دست آوردن شرایط انبساطی پشت امواج تراک، یک حل تحلیلی توسط تیلر در سال ۱۹۵۰ با فرض انبساط آیزنتروپیک در پشت شاک تراک و با استفاده از معادله حالت گاز ایده آل ارائه شد [۳]. در روش مذکور برای به دست آوردن این پروفیل باید از خواص CJ در شاک پیشرو استفاده شود.

فیشبرن مدل‌های مختلفی که شرایط اولیه بلاست ناشی از انفجار توده گازی را مدل می‌کردند (مانند مدل تشابهی تیلر و مدل حجم ثابت)، مورد بررسی قرار داد [۴] و مقادیر فشار حداکثری و ایمپالس موج بلاست ناشی از انفجار گازی را با نتایج حاصل از انفجار TNT مقایسه

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} u^2 \right) \quad (5)$$

که در آن e انرژی داخلی بر واحد جرم می باشد. مخلوط اولیه، هوای اطراف، و محصولات احتراق از معادله حالت گاز کامل پیروی می کنند که به صورت زیر مورد استفاده قرار می گیرد:

$$p = \frac{\rho(\gamma - 1)}{\tau} \quad (6)$$

که در آن γ نسبت گرما های ویژه می باشد. مدل های متفاوت برای مدل کردن احتراق را می توان به دو دسته کلی تقسیم کرد. در روش اول معادله ای برای احتراق حل شده و گرمای حاصل از واکنش احتراقی به صورت ترم چشمه به معادله انرژی اضافه می گردد و خواص مربوط به محصولات واکنش با استفاده از محاسبات تعادلی به دست می آید.

در این تحقیق از میان روش هایی که در آنها از معادلات تعادلی برای محاسبه گرمای واکنش استفاده می شود مدل سوزش حجمی CJ مورد استفاده قرار گرفته است.

در روش دوم برای مدل کردن واکنش احتراقی معادلات مربوط به سینتیک واکنش مورد حل قرار می گیرند. در این حالت گونه ها و خواص محصولات با استفاده از حل هم زمان معادلات بقای (جرم، ممنتوم، انرژی و گونه ها) به دست می آیند.

مدل هایی مانند مدل حجم ثابت نیز وجود دارند که در آنها احتراق در ابر مدل نشده و تنها، با کمک یک حلگر تعادلی، شرایط ابر پس از اتمام احتراق به دست می آید. در ادامه در مورد مدل های مختلف توضیح بیشتری ارائه می گردد.

مدل انفجار حجم ثابت

در این مدل فرض می شود که کل ابر به صورت آدیاباتیک در یک لحظه سوخته و به توده گازی پر فشاری که حاوی محصولات احتراق است تبدیل شده است. بنابراین حجم اولیه برابر حجم محصولات احتراق خواهد بود. برای تعیین خواص در محصولات احتراق از روابط تعادل ترمودینامیکی استفاده می شود. در این حالت با در نظر گرفتن قانون اول ترمودینامیک و با توجه به فرض آدیاباتیک و حجم ثابت بودن فرایند خواهیم داشت:

در لوله شاک از الگوریتم AMR⁹ استفاده نمود که با استفاده از این الگوریتم زمان حل برنامه بسیار کم گردید ضمن این که وی از سینتیک تفصیلی برای مدل سازی احتراق استفاده کرد [۱۳].

تاریخچه مختصر بالا به دو مسئله شبیه سازی بلاست با استفاده از مدل های ساده و سعی در استفاده از مدل های متنوع سینتیکی در شبیه سازی تراک گازی اشاره نموده است. با توجه به آخرین اطلاعات نگارنده مقایسه مدل های غیر سینتیکی و سینتیکی تراک برای شبیه سازی امواج بلاست برای اولین بار صورت می گیرد. اخیراً، برای بررسی تأثیر دتونیشن بر بارگذاری لوله های شامل مخلوط های گازی، کیراک و همکاران مدل تیلر را با مدل سینتیکی ساده شده یک مرحله ای مقایسه کرده اند و نتیجه گرفته اند که، بدلیل زمان اجرای بسیار بالای مدل سینتیکی و دقت نزدیک هر دو مدل، مدل از ارجحیت بیشتری برخوردار می باشد [۱۴].

معادلات حاکم

معادلاتی که برای مدل سازی تراک به کار گرفته می شوند معادلات اولر واکنشی^۸ می باشند. این معادلات در حالت یک بعدی و در مختصات لاگرانژی به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} - \frac{\partial (r^\alpha u)}{\partial m} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + r^\alpha \frac{\partial p}{\partial m} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial (r^\alpha u p)}{\partial m} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \tau_i}{\partial t} - \frac{\partial (r^\alpha u)}{\partial m} = W_i \dot{\omega}_i \quad i = 1, \dots, N \quad (4)$$

در روابط مذکور τ حجم مخصوص، u سرعت و p فشار، t و m به ترتیب زمان، مختصات جرم، مختصات فضایی و W_i جرم مولکولی گونه i ، $\dot{\omega}_i$ نرخ تولید گونه i و N تعداد گونه ها می باشد که در آنها از نیروی جاذبه صرف نظر و مشخصه α تعیین کننده هندسه مسئله است. مقادیر $\alpha = 0$ برای مختصات صفحه ای، $\alpha = 1$ برای مختصات استوانه ای و $\alpha = 2$ برای مختصات کروی به کار می روند. E انرژی کل در واحد حجم است که به صورت زیر تعریف می گردد:

محصولات احتراق (از نقطه تراک CJ) توزیع خواص در محصولات احتراق را پس از عبور موج تراک از ماده منفجره به دست آورد که نتایج به دست آمده تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی داشت. مدل تحلیلی تیلر تنها برای هندسه‌های صفحه‌ای و کروی قابل استفاده بوده و برای هندسه استوانه‌ای جواب ندارد. روابط کامل مربوط به این مدل در پیوست (۱) آورده شده است. برای استفاده از این مدل تحلیلی باید ابتدا شرایط CJ را برای مخلوط مورد نظر به دست آورد. در این صورت شرایط موج در ابر هوا- سوخت که دراصل شرایط اولیه بلاست است، به دست می‌آید. این مدل اخیراً به وسیله محققین مختلفی برای بار گذاری داخلی به وسیله تراک گازی مورد استفاده قرار گرفته است [۱۴ و ۱۵].

مدل‌های سینتیکی

سینتیک شیمیایی واکنش عبارت است از مجموعه‌ای از واکنش‌های اولیه که مجموعاً واکنش کلی را سبب می‌شوند. شکل کلی واکنش‌های اولیه به صورت عبارت (۱۰) می‌باشد.

$$\sum_{j=1}^N v'_{ji} X_j \xrightarrow{K} \sum_{j=1}^N v''_{ji} X_j \quad \text{for } i=1, \dots, L \quad (10)$$

که در آن v'_{ji} و v''_{ji} ضرایب استیوکیومتریک گونه‌ها در واکنش‌های اولیه و N و L به ترتیب تعداد گونه‌ها و تعداد واکنش‌های اولیه می‌باشد. K ثابت نرخ واکنش است که معمولاً به صورت آرنیوسی در نظر گرفته شده و به شکل زیر خواهد بود.

$$K = AT^n \exp(-E_a / R_u T) \quad (11)$$

در معادله (۱۱) A ، n و E_a ضرایب ثابتی هستند که از آزمایش به دست می‌آیند. برای استفاده از سینتیک شیمیایی در مدل سازی تراک از معادلات اولر به اضافه ترم‌های مربوط به بقاء گونه‌های شیمیایی (معادلات اولر واکنشی)، استفاده می‌شود. در این صورت باید نرخ تولید گونه‌ها $\dot{\omega}_i$ که به صورت ترم چشمه در معادله بقاء جرم گونه‌ها وجود دارد محاسبه گردد. نرخ تولید گونه‌ها برای واکنشی مانند (۱۱) از عبارت زیر قابل محاسبه می‌باشد.

$$\dot{\omega}_i = \sum_{j=1}^L (v''_{ji} - v'_{ji}) \left\{ K_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - K_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \right\} \quad (12)$$

که در آن K_{fi} و K_{ri} به ترتیب ثابت نرخ واکنش رفت و

$$E_{product} = E_{reactant} \quad (7)$$

با توجه به رابطه فوق با داشتن انرژی مواد اولیه ابر و استفاده از روابط ترمودینامیکی و شرط تعادل می‌توان خواص محصولات احتراق، مانند فشار و دما، را بدست آورد، که از این اطلاعات به عنوان شرایط اولیه بلاست استفاده می‌شود. در این مدل توزیع خواص در تمام ابر (محصولات احتراق) ثابت فرض گردیده است [۴].

مدل سوزش حجمی CJ

یکی از مدل‌هایی که برای مدل‌سازی تراک مورد استفاده قرار می‌گیرد، مدل سوزش حجمی CJ است. در مدل سوزش حجمی CJ فرض می‌شود که کسر جرمی مواد اولیه رابطه خطی با حجم مخصوص دارد:

$$F(\tau) = 1 - \frac{\tau_0 - \tau_i}{\tau_0 - \tau_{CJ}} \quad (8)$$

که در آن τ_0 حجم مخصوص مواد سوخته نشده (ابر هوا- سوخت) و τ_{CJ} حجم مخصوص محصولات احتراق در شرایط CJ می‌باشد. همان‌طور که در رابطه فوق مشخص است در حالتی که $\tau_i = \tau_0$ می‌باشد مقدار F برابر با یک می‌شود و اگر $\tau_i = \tau_{CJ}$ باشد F برابر با صفر خواهد شد. به عبارت دیگر F در سلول حاوی ماده سوخته نشده برابر یک و در سلول حاوی گازهای حاصل از احتراق برابر صفر و در سلول‌هایی که سوزش در آنها صورت می‌گیرد $0 < F < 1$ خواهد بود و فشار در آنها از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$p = (1 - F)p' \quad (9)$$

p' فشار محصولات انفجار در شرایط $F=0$ است که از معادله حالت به دست می‌آید. در این روش معادلات (۱) تا (۳) به صورت همگن حل می‌شوند. مقدار گرمای واکنش با ورود موج شاک به سلول آزاد گردیده و به انرژی کل اضافه می‌شود. تا هنگامی که موج در آن سلول مخصوص قرار دارد فشار از رابطه (۹) قابل محاسبه می‌باشد [۲].

مدل تشابهی تیلر

این مدل در سال ۱۹۵۰ میلادی توسط تیلردانشمند برجسته انگلیسی ارائه گردیده است [۳]. وی با استفاده از معادلات بقاء و با فرض آیزنروپیک بودن انبساط

برگشت واکنش آم و $[X_i]$ غلظت گونه زام می باشد.

DVODE [۱۸] حل شده است.

مزیت مهم روش جداسازی اوپراتورها این است که می توان از گام های زمانی متفاوت در دو مرحله سینتیکی و هیدرودینامیکی استفاده نمود.

نتایج

برای کسب اطمینان از صحت عملکرد کد تهیه شده قسمت های مختلف کد، با حل مسائل گوناگون، مورد بررسی قرار گرفتند. قبل از بررسی تراک در ابر هوا سوخت مورد نظر، به چند آزمایش انجام شده اشاره می گردد.

الف- احتراق فشار ثابت مخلوط استیلن- اکسیژن- رقیق کننده

در این آزمایش واکنش شیمیایی احتراق استیلن و هوا در فرآیند فشار ثابت مدل شده است. در این مسئله یک مخلوط همگن با ترکیب استیوکیومتریک با دما و فشار اولیه ۱۵۰۰ درجه کلوین و ۱ اتمسفر مورد بررسی قرار گرفته است.

برای حل چنین مسئله ای کافی است علاوه بر معادلات سینتیکی (۱۴) از معادله انرژی استفاده شود. در صورت ساده کردن معادله انرژی، معادله (۱۵) برحسب دما به دست می آید. در این جا نیتروژن به عنوان رقیق کننده در نظر گرفته شده است.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{-\sum_{i=1}^K (W_i h_i(T)) \dot{\omega}_i}{\sum_i ([X_i] W_i C_{p,i})} \quad (15)$$

در شکل (۱) نتیجه حل به صورت تغییرات دما برای سه فشار متفاوت در زمان های مختلف نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود ابتدا دمای مخلوط تغییر محسوسی نخواهد داشت ولی با گذشت زمان ناگهان افزایش می یابد که علت آن فعالیت واکنش های زنجیره ای شاخه ای موجود در سینتیک می باشد.

با افزایش فشار، واکنش های زنجیره ای شاخه ای زودتر فعال شده و پرش ناگهانی دما زودتر رخ می دهد. نتایج به دست آمده از این شبیه سازی تطابق بسیار خوبی را با نتایج مرجع [۱۱] نشان می دهند

روش عددی حل معادلات

برای حل عددی معادلات اولر واکنشی از روش جداسازی اوپراتورها استفاده شده است. در این روش چنین فرض می شود که در هر گام زمانی در مرحله اول سیال حرکت می کند و در طی حرکت آن واکنشی صورت نمی گیرد و در مرحله دوم در سیال واکنش رخ می دهد [۱۶ و ۱۰]. بنابراین حل مسئله در یک گام زمانی دو مرحله خواهد داشت:

الف- مرحله هیدرودینامیک که مربوط به حرکت سیال است. در این مرحله با توجه به این که واکنشی رخ نمی دهد ترم منبع در معادلات جریان صفر شده و معادلات جریان به صورت همگن در می آیند که در معادلات (۱۳) نشان داده شده است که می توان آنها را با روش های مختلف عددی حل نمود.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau}{\partial t} - \frac{\partial (r^\alpha u)}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + r^\alpha \frac{\partial p}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial (r^\alpha u p)}{\partial m} &= 0 \\ \frac{\partial \tau_i}{\partial t} - \frac{\partial (r^\alpha u)}{\partial m} &= 0 \quad i = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (13)$$

در این تحقیق برای شبیه سازی جریان و حل معادلات اولر همگن از روش PPM^۹ استفاده شده است [۱۷] که در زمره روش های گودنفی مرتبه بالا می باشد.

ب- در مرحله سینتیک شیمیایی معادلات مربوط به واکنش شیمیایی باید حل شوند (معادلات (۱۴)).

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{\dot{\omega}_i M_i}{\rho_0}, \quad i = 1, \dots, N \quad (14)$$

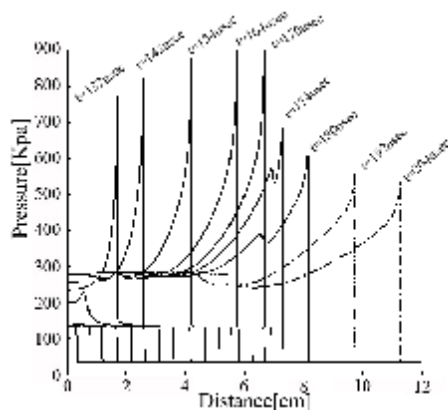
در این مرحله سیال ساکن است و خواص ترمودینامیکی آن تغییری ننموده و تنها غلظت گونه ها تغییر خواهد کرد که اثر خود را در محاسبه دما در گام زمانی بعدی می گذارد. معادلات مربوط به انجام واکنش، یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی را ایجاد می کند که معمولاً سخت^{۱۰} بوده و نیازمند انتگرال گیری های ویژه با گام زمانی بسیار کوچک می باشد. در کار حاضر دستگاه معادلات دیفرانسیل ایجاد شده، با استفاده از زیر برنامه

در جدول (۱) آمده است. هدف از این شبیه‌سازی اطمینان از عمل کرد صحیح کد مورد استفاده بوده است. نتایج حاصل از این شبیه‌سازی در شکل (۲) ارائه شده است.

جدول ۱: خواص مربوط به پشت شاک رفت و پشت شاک انعکاسی.

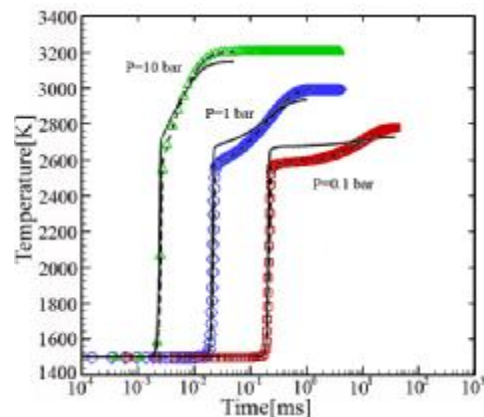
	شاک رفت	شاک انعکاسی
ρ [Kg/m]	۰/۲۲۳۱۲۸	۰/۴۸۸۹
U [m/s]	-۴۷۸/۵	صفر
P [Pa]	۳۶۶۷۹	۱۳۱۸۲۰
T [°K]	۶۲۴	۱۰۳۶
$X_{H_2}:X_{O_2}:X_{Ar}$	۰/۲ : ۰/۱ : ۰/۷	۰/۲ : ۰/۱ : ۰/۷
W [Kg/mol]	۳/۱۵۶۶۶۷	۳/۱۵۶۶۶۷

موج شاک پس از برخورد به دیواره منعکس شده و در مخلوط شروع به حرکت می‌کند. پس از گذشت زمان در حدود $120 \mu\text{sec}$ ، واکنش در نزدیکی دیواره شدت می‌گیرد و در زمان $140 \mu\text{sec}$ یک موج تراک نزدیک دیواره شکل می‌گیرد (شکل ۲).



شکل ۲: نمودار فشار بر حسب مکان در زمان‌های مختلف که تشکیل موج تراک در پشت شاک انعکاسی برای لوله شاک حاوی هیدروژن، اکسیژن و آرگون را نشان می‌دهد.

در شکل (۳) مقایسه پروفیل فشار به دست آمده از کار حاضر و نتایج مرجع [۱۳] نشان داده شده است که مطابقت خوبی را نشان می‌دهد. مقادیر فشار و محل جبهه تراک با نتایج مرجع کاملاً همخوانی دارند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که کد تهیه شده مسئله یک بعدی ایجاد تراک در مخلوط گازی با به کارگیری سینتیک شیمیایی را با دقت خوبی شبیه‌سازی می‌کند و می‌توان از آن برای شبیه‌سازی مسایل مشابه بهره گرفت.



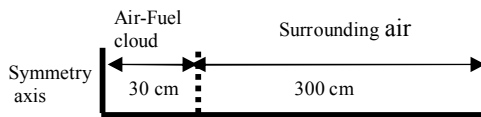
شکل ۱: تغییرات دما بر حسب زمان در فشارهای مختلف، خط پر شبیه‌سازی با مکانیزم تفصیلی، خط چین شبیه‌سازی با مکانیزم کوتاه ۲۵ مرحله‌ای و علامت‌ها نتایج کار حاضر (مکانیزم کوتاه ۲۵ مرحله‌ای) می‌باشد.

ب- مدل‌سازی تراک در لوله شاک محتوی هیدروژن، اکسیژن و آرگون

مدل‌سازی عددی تراک در لوله شاک حاوی هیدروژن، اکسیژن و آرگون در سال ۱۹۸۲ توسط اورانو همکارانش صورت گرفت [۱۹] و با نتایج به دست آمده از مشاهدات آزمایشگاهی مقایسه شد. دیترینگ از الگوریتم عددی AMR^{۱۱} برای مدل‌سازی تراک استفاده کرد و برای اطمینان از صحت نتایج کد خود آنها را با نتایج اوران مقایسه نمود [۱۳]. در مرجع [۱۶] نیز از نتایج اوران برای بررسی صحت عملکرد کد استفاده شده است. در کار حاضر نیز برای اطمینان از صحت عملکرد کد، نتایج موجود با نتایج مراجع [۱۳] و [۱۶] مقایسه به عمل آمده است. در این مسئله یک لوله شاک با طول ۱۲ سانتی متر که حاوی مخلوط هیدروژن، اکسیژن و آرگون می‌باشد مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این لوله ابتدا یک موج شاک به سمت چپ حرکت کرده و پس از برخورد به دیواره انتهایی لوله به سمت راست منعکس می‌شود. پس از گذشت مدت زمانی پشت شاک انعکاسی^{۱۲} یک موج تراک شکل می‌گیرد. به دلیل سرعت بالاتر موج تراک نسبت به شاک انعکاسی، موج تراک به شاک رسیده و تشکیل یک موج واحد می‌دهد. در کار حاضر هدف بررسی و مدل‌سازی تراک ایجاد شده در پشت شاک انعکاسی است. با توجه به اینکه تمرکز اصلی بر پدیده تراک می‌باشد مدل‌سازی دقیقاً از زمانی شروع گردیده که شاک اولیه^{۱۳} به دیواره برخورد نموده و منعکس شده است. شرایط اولیه مسئله

کلوین و نسبت هم‌ارزی^{۱۴} نزدیک به یک پیشنهاد شده است [۱۱].

طرحواره مسئله مورد بررسی در شکل (۴) نشان داده شده است. مخلوط استیلن و هوا با ترکیب استیوکیومتریک و دمای اولیه ۱۰۰۰ درجه کلوین در فضایی به طول ۶۰ سانتی متر به صورت ابری همگن پخش شده است. دما اولیه برای هوای محیط اطراف ۳۰۰ کلوین و فشار اولیه ۱ اتمسفر بوده و شبیه‌سازی به صورت یک بعدی صورت گرفته است. برای آغازش تراک، در مرکز ابر نقاط داغ^{۱۵} که نقاطی با دما و فشاری برابر دما و فشار CJ می باشد قرار داده شده اند. با توجه به این که ابر متقارن است، تنها نصف آن مورد بررسی قرار گرفته است.

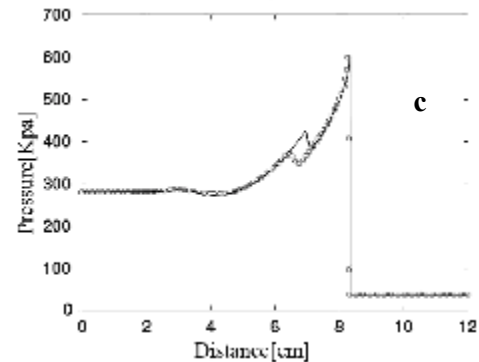
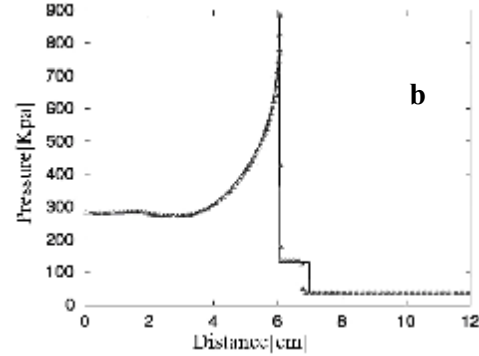
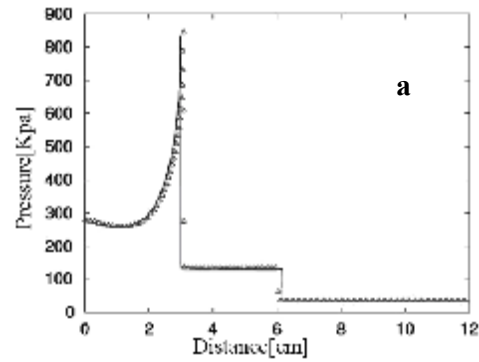


شکل ۴: طرحواره مسئله ابر استیلن و هوا.

برای اطمینان از عدم وابستگی جواب ها به شبکه محاسباتی مورد استفاده، دو مشخصه اساسی یعنی فشار حداکثر و محل جبهه تراک در زمان $t=250 \mu\text{sec}$ برای شبکه های مختلف مقایسه شده اند.

در شکل (۵) نمودار فشار به دست آمده برای سه شبکه مختلف در یک زمان مشخص نشان داده شده است. شبکه‌های به کار رفته دارای ۴۰۰۰، ۵۵۰۰ و ۸۰۰۰ سلول می‌باشند که در آنها به ترتیب ۱۰۰۰، ۲۰۰۰ و ۴۰۰۰ سلول برای ناحیه ابر و ۳۰۰۰، ۳۵۰۰ و ۴۰۰۰ سلول برای هوای اطراف در نظر گرفته شده است. مقادیر فشار حداکثر به دست آمده از سه شبکه تفاوت چندانی با یک دیگر نداشته و مقدار آن تقریباً برابر (۹۷۰ Kpa) می‌باشد. در این حالت محل شاک برای شبکه ۴۰۰۰ سلولی در حدود ۳۰ سانتی متری از مرکز ابر به دست آمده و با افزایش تعداد سلول محل شاک تقریباً به ۲۸ سانتی متری از مرکز ابر همگرا شده است.

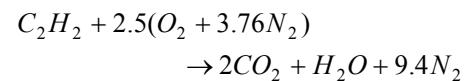
با توجه به این که مقادیر به دست آمده از شبکه ۵۵۰۰ و ۸۰۰۰ تفاوت قابل ملاحظه‌ای را نشان نمی‌دهند، محاسبات با استفاده از شبکه شامل ۵۵۰۰ سلول صورت گرفته است.



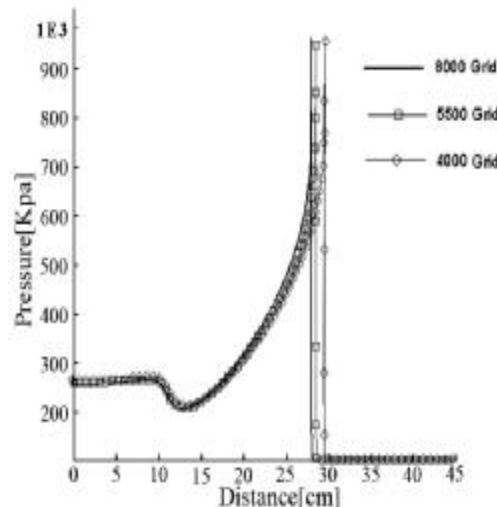
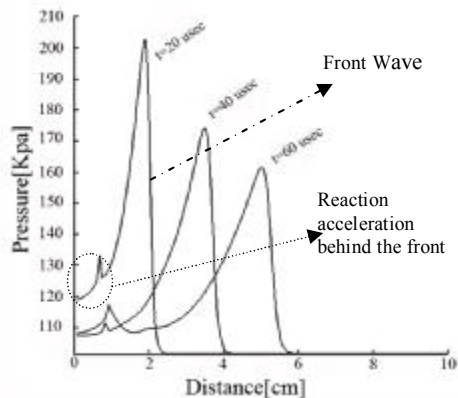
شکل ۳: مقایسه نمودار تغییرات فشار به دست آمده از کد حاضر (نشانه‌ها) با نتایج مرجع [۱۴] در لوله شاک در زمان های مختلف: (a) ۱۵۰ μsec، (b) ۱۷۰ μsec، (c) ۱۸۵ μsec.

ج- مدل سازی تراک در ابر استیلن- هوا

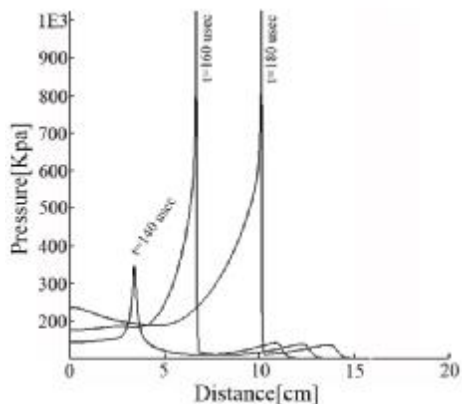
در این قسمت با استفاده از سینتیک شیمیایی که توسط وارتاراجان و ویلیامز برای تراک مخلوط استیلن، اکسیژن و رقیق‌کننده ارائه گردیده، تراک در ابر استیلن و هوا مورد بررسی قرار گرفته است. در این حالت واکنش کلی استیلن و هوا به صورت زیر در نظر گرفته شده است:



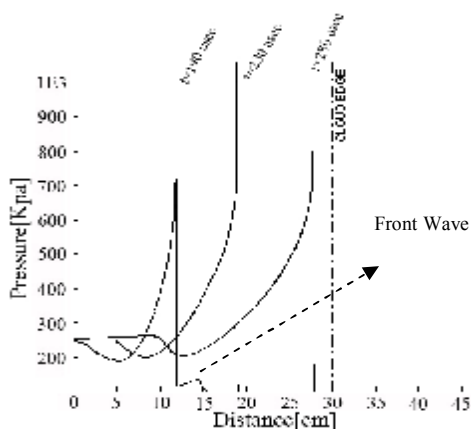
سینتیک به کار گرفته شده شامل ۲۵ واکنش می‌باشد. این سینتیک برای دماهای بالای ۱۰۰۰ درجه



شکل ۵: مقایسه پروفیل فشار حاصل از شبیه سازی تراک در ابر استیلن- هوا با استفاده از شبکه ۴۰۰۰، ۵۵۰۰ و ۸۰۰۰ سلولی.



شکل ۶: شکل گیری موج تراک در پشت موج شاک پیشرو.



شکل ۷: پروفیل های فشار پشت شاک که ایجاد موج تراک توسعه یافته در مخلوط را نشان می دهند.

نتایج به دست آمده به صورت پروفیل های فشار در زمان های مختلف در ادامه ارائه شده است. در ابتدا ناحیه داغ و پرفشار شروع به انبساط می کند که در اثر آن یک موج فشاری به صورت میرا شونده در ابر شروع به حرکت نموده باعث گرم شدن مخلوط و تحریک آن برای آغاز واکنش می گردد. با گذشت زمان ۲۰ μsec تغییرات کوچکی در پشت موج پیشرو به چشم می خورد که ناشی از شروع واکنش در مخلوط می باشد. واکنش هایی که در این مرحله صورت می گیرند ابتداً چندان سریع و انرژی زا نیستند که بتوانند موج تراک را ایجاد نمایند لیکن با گذشت زمان واکنش ها سریع تر شده و باعث افزایش دما و فشار مخلوط و شکل گیری موج تراک در پشت موج پیشرو می گردند (شکل ۶).

شکل (۷) موج تراک را پس از شکل گیری نشان می دهد که با سرعتی بیشتر از سرعت موج پیشرو حرکت کرده و به آن می رسد. سپس این دو موج با هم ترکیب شده و به صورت یک موج تراک توسعه یافته به حرکت خود در مخلوط ادامه می دهد.

این موج تراک در ادامه حرکت خود طول ابر را با فشار و سرعت تقریباً ثابت طی نموده و پس از گذشتن از لبه ابر وارد هوا می شود که پس از آن به صورت یک موج شاک میرا شونده (موج بلاست) به حرکت خود ادامه می دهد (شکل ۸).

د- بلاست حاصل از مدل سازی تراک با مدل های مختلف

به علت پیچیده بودن روابط سینتیکی و زمان بسیار زیادی که حل عددی با استفاده از مدل سازی سینتیکی نیاز دارد، استفاده از آن در کارهای عملی بسیار پرهزینه می باشد. علاوه بر آن سینتیک شیمیایی واکنش در یک

مدل تشابهی تیلور

در مدل تشابهی تیلور با استفاده از مقادیر CJ در فصل مشترک ابر هوا- سوخت و هوای اطراف، پروفیل فشار با استفاده از روابط تحلیلی در پشت شاک به دست می آید.

مقادیر CJ در کار حاضر برای تراک مخلوط استیلین و هوا با فشار اولیه ۱ اتمسفر و دمای اولیه ۱۰۰۰ درجه کلوین با استفاده از نرم افزار تعادلی STANJAN به دست آمده است که در جدول (۳) ارائه شده است.

جدول ۳: شرایط CJ برای تراک مخلوط استیلین و هوا با دما و فشار اولیه ۱۰۰۰ کلوین و ۱ اتمسفر.

D_{CJ} (m/s)	۱۸۰۵/۶
τ_{CJ} (m ³ /kg)	۱/۶۷۰۱
P_{CJ} (kpa)	۵/۷۵۶*۱۰ ^۲
c_{CJ} (m/s)	۱۰۵۱/۹

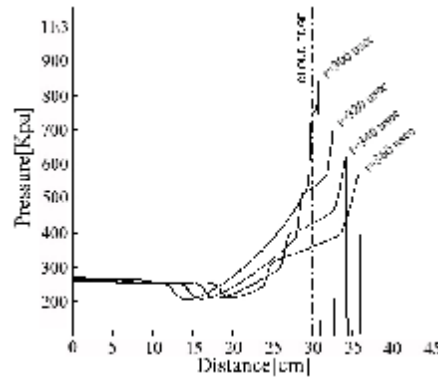
مدل سوزش حجمی CJ

در مدل سوزش حجمی CJ گرمای واکنش در هر سلول هنگامی آزاد می شود که جبهه تراک به آن برسد. این انرژی، با استفاده از نرم افزار تعادلی STANJAN، برای مخلوط استیلین و هوا در فشار و دمای اولیه ۱ اتمسفر و ۱۰۰۰ درجه کلوین، برابر (KJ/Kg) ۳۳۴۳/۸۹ آمده است.

مدل سینتیکی

پروفیل فشار به دست آمده در لبه ابر با استفاده از مدل سینتیکی در شکل (۹) نشان داده شده است.

لازم به ذکر است که در مدل سینتیکی و مدل CJ علاوه بر مدل سازی بلاست، شکل گیری و حرکت موج تراک در ابر هوا-سوخت نیز شبیه سازی می گردند، در صورتی که در دو مدل تیلور و مدل حجم ثابت تنها حرکت موج بلاست در هوا مدل می شود. در صورت استفاده از مدل سینتیکی، جهت اجرای کد تهیه شده (در یک کامپیوتر مشخص) برای مسئله فوق (با شبکه ۵۵۰۰ سلولی) تقریباً ۸۴ ساعت (بیش از سه روز) زمان لازم است، در صورتی که برای مسئله مشابه (با همان کامپیوتر) با استفاده از مدل CJ زمان لازم در حدود ۳۰ دقیقه و با استفاده از مدل تیلور و حجم ثابت این زمان تقریباً ۱۵ دقیقه خواهد بود.



شکل ۸: موج بلاست ایجاد شده در هوا پس از گذشتن موج تراک از لبه ابر در زمان های مختلف.

محدوده وسیع دمایی- فشاری برای اغلب مخلوطها وجود ندارد. بنابراین در مدل سازی تراک برای به دست آوردن شرایط اولیه بلاست اغلب سعی شده از مدل های بسیار ساده استفاده شود. در این جا بلاست ناشی از انفجار توده استیلین و هوا با چهار مدل مختلف مورد مقایسه قرار می گیرد. این مدل ها عبارتند از: مدل حجم ثابت، مدل تشابهی تیلور، مدل سوزش حجمی CJ و مدل سینتیکی. برای مقایسه نتایج بلاست حاصل از مدل های مختلف، برای تمام مدل ها مسئله ارائه شده در بخش قبل (شکل (۴)) مورد بررسی قرار گرفته است.

مدل انفجار حجم ثابت

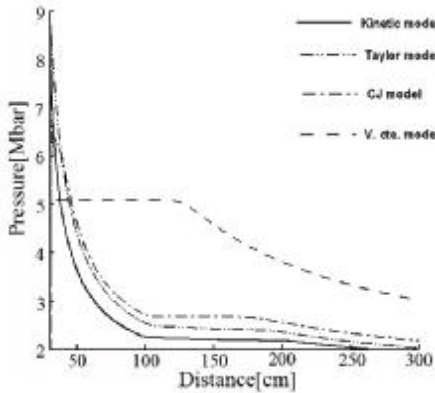
در مدل حجم ثابت فرض می شود که توده سوخت و هوا به صورت یک تحول حجم ثابت منفجر شده است. برای به دست آوردن خواص محصولات انفجار، با اعمال دمای اولیه ۱۰۰۰ درجه کلوین و فشار ۱ اتمسفر برای مخلوط اسیوکومتریکی استیلین و هوا، از نرم افزار تعادلی STANJAN استفاده شده است (جدول (۲)). انرژی به دست آمده برای محصولات احتراق که به عنوان انرژی اولیه در کار حاضر مورد استفاده قرار گرفته برابر (KJ/Kg) ۱۱۳۵/۲۷ خواهد بود که این مقدار نیز از کد تعادلی STANJAN به دست آمده است.

جدول ۲: شرایط اولیه در مدل حجم ثابت برای مخلوط استیلین و هوا.

	در داخل ابر	محیط اطراف
چگالی(kg/m ³)	۰/۶۱۶۷۵	۱/۱۷۶۸۸
سرعت(m/s)	۰	۰
فشار(kpa)	۸/۱*۱۰ ^۲	۱۰۱/۳۳۰

مدل سینتیکی نزدیک تر می باشد.

مقادیر فشار حداکثر ناشی از مدل های مختلف در فاصله ۱۰۰ و ۲۵۰ سانتی متری از مرکز ابر در جدول (۴) با هم مقایسه شده است.



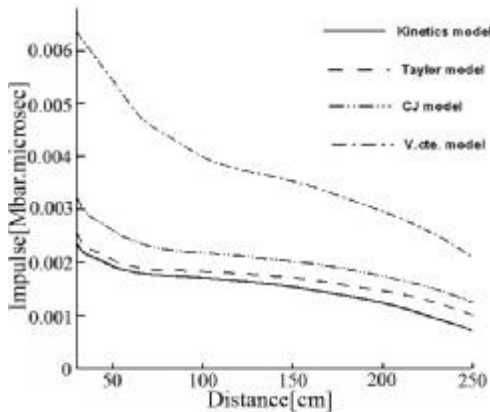
شکل ۱۰: نمودار فشار حداکثر بلاست به دست آمده از مدل های مختلف.

جدول ۴: درصد اختلاف نسبی فشار حداکثر موج بلاست ناشی از مدل های مختلف نسبت به مدل سینتیکی.

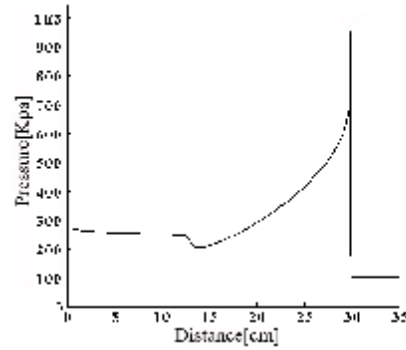
مدل	مدل سوزش حجمی CJ	مدل حجم ثابت	فاصله از مرکز ابر
تایلر	٪۲۰	٪۱۲۵/۱	۱۰۰ سانتی متر
	٪۱۴/۵	٪۶۳/۷	۲۵۰ سانتی متر

مقدار ایمپالس (i_s) از رابطه (۱۶) قابل محاسبه است که در آن t_a زمانی است که جبهه جلویی موج بلاست به یک نقطه می رسد و T_s مدت زمانی است که فشار در آن نقطه بیشتر از فشار محیط باشد [۲۰].

$$i_s = \int_{t_a}^{t_a+T_s} p(t) dt \quad (16)$$



شکل ۱۱: نمودار ایمپالس موج بلاست در فاصله ۳۰ تا ۲۵۰ سانتی متری.



شکل ۹: پروفیل فشار اولیه در ابر هوا- سوخت بدست آمده از مدل سینتیکی.

مقایسه بلاست ناشی از مدل های مختلف

مطالعه بلاست از این جهت دارای اهمیت می باشد که در اثر انفجار، این موج بلاست است که تا فاصله زیادی نسبت به مرکز انفجار حرکت کرده و بر محیط اطراف اثر می گذارد. توانایی ایجاد خرابی یک موج بلاست به سه عامل زیر بستگی دارد:

- ۱- میزان نیرویی که در اثر عبور موج بلاست به هدف وارد می شود.
- ۲- مدت زمانی که نیرو به هدف وارد می شود.
- ۳- توانایی هدف در تحمل این تأثیرات.

افزایش فشار ناگهانی در اثر عبور موج بلاست از روی موانع و اهدافی که در مسیر آن قرار دارند باعث اعمال نیروی زیادی به این موانع و اهداف شده و باعث بروز آسیب یا انهدام آنها می گردد. عامل مؤثر دیگری که در اثر عبور موج بلاست باعث بروز خرابی می شود، ایمپالس موج بلاست است که ایمپالس در واقع تأثیر فشار در یک مدت زمان معین بر هدف مورد نظر می باشد. بنابراین در مطالعه موج بلاست اغلب این دو عامل (فشار حداکثر و ایمپالس) مورد بررسی قرار می گیرند [۲۰]. برای انجام مقایسه موج بلاست شبیه سازی شده با مدل های مختلف، نمودار فشار حداکثر موج بلاست در هوا در شکل (۱۰) رسم شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می شود مقدار فشارهای حداکثر به دست آمده از مدل حجم ثابت تفاوت بسیار زیادی با دیگر مدل ها دارد. مقادیر به دست آمده از مدل CJ، مدل تیلر و مدل سینتیکی در نزدیکی لبه ابر مطابقت خوبی را با یکدیگر نشان می دهند. با دور شدن از لبه ابر این مقادیر از یکدیگر فاصله می گیرند. از میان این مدل ها مقدار فشار حداکثر به دست آمده از مدل تیلر به

به مقدار اندکی افزایش می‌یابد ولی همواره نتایج مدل تشابهی تیلر در مقایسه با مدل‌های دیگر به مدل سینتیکی نزدیک‌تر است.

نتیجه‌گیری

نتیجه بررسی‌های انجام شده نشان می‌دهد که استفاده از مدل تیلر نتایج نزدیک تری در مقایسه با روش‌های CJ و حجم ثابت نسبت به حل سینتیک در اختیار قرار می‌دهد. این هم‌خوانی در نزدیکی لبه ابر کمتر بوده و با فاصله گرفتن از آن بیشتر می‌شود. اختلاف نتایج به دست آمده از مدل حجم ثابت با نتایج مدل سینتیکی به خصوص در نزدیکی لبه ابر بسیار زیاد است. ولی با دور شدن از لبه ابر اختلاف آنها کمتر خواهد شد.

با توجه به این که در کارهای عملی ابعاد هندسی مسئله مورد مطالعه بسیار وسیع‌تر از مسئله مورد مطالعه در کار حاضر می‌باشد، لذا با توجه به پیچیدگی‌های مرتبط با به کارگیری سینتیک شیمیایی در مدل‌سازی تراک و زمان بسیار زیادی که اجرای کد مربوط به آن نیاز دارد، استفاده از مدل سینتیکی در مدل‌سازی تراک جهت به دست آوردن شرایط اولیه بلاست در کارهای عملی دارای محدودیت‌های بسیار زیادی خواهد بود. در این حالت استفاده از مدل تشابهی تیلر با توجه به ساده بودن آن و زمان بسیار کوتاه لازم جهت محاسبات مربوط به آن می‌تواند کمک بسیار مناسبی در حل مسائل مربوط به شبیه‌سازی امواج بلاست باشد.

ایمپالس ناشی از موج بلاست در هوای اطراف در شکل (۱۱) برای مدل‌های مختلف رسم شده است. مقادیر به دست آمده از مدل تیلر در نزدیکی لبه ابر مطابقت خوبی با مدل سینتیکی دارد. در صورتی که مقدار ایمپالس به دست آمده از بلاست مدل حجم ثابت، اختلاف بسیار زیادی را نسبت به مدل سینتیکی در نزدیکی لبه ابر نشان می‌دهد. نرخ کاهش ایمپالس در مدل حجم ثابت بسیار بیشتر از مدل سینتیکی بوده لذا با دور شدن از لبه ابر اختلاف مقادیر ایمپالس به دست آمده از این دو مدل کمتر می‌شود. درصد اختلاف ایمپالس به دست آمده از مدل‌های مختلف، محاسبه شده و در جدول (۵) ارائه گردیده است. هرچند مقادیر ایمپالس به دست آمده برای مدل حجم ثابت و مدل سینتیکی با دور شدن از مرکز ابر به یکدیگر نزدیک می‌شوند ولی درصد اختلاف نسبی آنها بیشتر شده است.

جدول ۵: درصد اختلاف مقدار ایمپالس ناشی از مدل‌های مختلف نسبت به مدل سینتیکی.

فاصله از مرکز ابر	مدل حجم ثابت	مدل CJ	مدل تشابهی تیلر
۱۰۰ سانتی متر	٪۱۳۴/۵۹	٪۲۷/۹	٪۷/۲
۲۵۰ سانتی متر	٪۱۹۴/۸	٪۷۴/۴۶	٪۴۰/۹۷

علت این موضوع کوچک بودن مقدار ایمپالس برای مدل سینتیکی است که باعث افزایش خطای نسبی می‌گردد. اختلاف مقادیر ایمپالس به دست آمده از مدل‌های تشابهی تیلر و مدل CJ با دور شدن از مرکز ابر

مراجع

- 1 - Strehlow, R. A. (1984). *Combustion Fundamentals*. McGraw-Hill.
- 2 - Wilkins, M. L. (1999). *Computer Simulation of Dynamic Phenomena*. Springer.
- 3 - Taylor, Sir Geoffrey, (1950). "The dynamic of the combustion products behind plane and spherical detonation front in explosives." *Proc. Roy. A.*, Vol. 200, PP. 235-247.
- 4 - Fishburn, B. D. (1976). "Some aspects of blast from fuel-air explosives." *Astronautica Acta*, Vol. 3, PP. 1049-1065.
- 5 - Fickett, W. and Wood, W. W. (1966). "Flow calculation for pulsating one-dimensional detonations." *Phys. Fluids.*, Vol. 9, PP. 903-916.
- 6 - Korobeinikov, V. P., Levin, V. A., Markov, V. V. and Chernyi, G. G. (1972). "Propagation of blast wave in a combustible gas." *Astronautica Acta*, Vol. 17, PP. 529-537.

- 7 - Taki, S. and Fujiwara, T. (1978). "Numerical analysis of two-dimensional nonsteady detonations." *AIAA Journal*, Vol. 16, PP. 73-77.
- 8 - Mazaheri, K., (1997). *Mechanism of the Onset of Detonation in Blast Initiation*. Ph.D. Thesis, McGill University, Montreal, Canada.
- 9 - Lee, J. H. S. and Higgins, A. (1999). "Comments on criteria for direct initiation of detonation." *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, A 357, PP. 3503-3521.
- 10 - Fedkiw, R. P. (1997). *A Survey of Chemically Reacting, Compressible Flow*. Ph.D. Thesis, University of California, Los Angeles.
- 11 - Varatharajan, B. and Williams, F. A. (2001). "Chemical-kinetic descriptions of high-temperature ignition and detonation of acetylene-oxygen-diluents systems." *Combustion and Flame*, Vol. 125, PP. 624-645.
- 12 - Varatharajan, B. and Williams, F. A. (2002). "Ethylene ignition and detonation chemistry, Part 1: detailed modeling and experimental comparison." *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 18, PP. 344-351.
- 13 - Deiterding, R. (2002). "Effective simulation of multi-dimensional detonation phenomena." *Conference on Scientific Computing*, PP. 94-101.
- 14 - Cirak, F., Deiterding, R. and Mauch, S. P. (2007). "Large-scale fluid-structure interaction simulation of viscoplastic and fracturing of thin-shells subjected to shocks and detonations." *Computers and Structures*, Vol. 85, PP. 1049-1065.
- 15 - Mazaheri, K., Nirzaei, M. and Biglari, H. (2006). "Transient dynamic response of tubes to internal detonation loading." *Journal of Sound and Vibration*. Vol. 297, PP. 106-122.
- 16 - Im, K. S., Yu, S. T. J. and Kim, C. K. (2002). *Application of the CESE Method to Detonation with Realistic Finite-Rate Chemistry*. <http://pdf.aiaa.org>.
- 17 - Colella, P. and Woodward, P. R. (1984). "The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulation." *Journal of Computational Physics*, Vol. 54, PP. 174-201.
- 18 - Brown, P. N., Byrne, G. D. and Hindmarsh, A. C. (1989). "VODE, A variable- coefficient ODE solver." *SIAM J. Sci. Stat. Compute*, Vol. 10, PP. 1038-1051.
- 19 - Oran, E. S., Young, T., Boris, J. P. and Cohen, A. (1982). "Weak and strong ignition; I. numerical simulation of shock tube experiments." *Combustion and Flame*, Vol. 48, PP. 135-148.
- 20 - Mays, G. C. and Smith, P. D. (1995). *Blast Effects on Buildings*. Thomas Telford Publications.

واژه های انگلیسی به ترتیب استفاده در متن

- 1 - Detonation
- 2 - Blast
- 3 - Shock waves
- 4 - Reactive Euler Equations
- 5 - Shock tube
- 6 - Operator- Splitting
- 7 - Adaptive Mesh Refinement
- 8 - Reactive Euler Equations
- 9 - Piecewise Parabolic Method
- 10 - Stiff
- 11 - Adaptive Mesh Refinement
- 12 - Reflected shock
- 13 - Incident shock
- 14 - Equivalence ratio
- 15 - Hot spot

پیوست ۱: مدل تشابهی تیلر [۳]

مدل تشابهی تیلر توزیع خواص در محصولات در حال انبساط ناشی از تراک را به صورت تحلیلی ارائه می دهد. نقطه شروع انبساط نقطه CJ می باشد. این مدل به طور کامل در مرجع [۳] آمده است. خلاصه ای از مدل برای خوانندگانی که به این مرجع دسترسی ندارند در این پیوست ارائه می گردد.

در تئوری تراک CJ نشان داده می شود:

$$D = u_{cj} + c_{cj} \quad (1-1)$$

که c_{cj} سرعت صوت در محصولات احتراق، بلافاصله پس از جبهه تراک است. با فرض جریان ایزنتروپیک برای امواج انبساطی پشت موج تراک از رابطه زیر به دست می آید:

$$\partial p = \rho c \partial u = c^2 \partial \rho \quad (2-1)$$

با انتگرال گیری از رابطه (۲-۱) در ناحیه پشت موج تراک رابطه زیر حاصل می شود که برای محاسبه انتگرال آن به رابطه ای بین c و p نیاز می باشد:

$$u_{cj} - u_2 = \int_{p_2}^{p_{cj}} c_2 \frac{\partial p}{\rho_2} \quad (3-1)$$

با استفاده از فرض تحول ایزنتروپیک برای انبساط پشت موج تراک ($pp^{-\gamma} = cte$):

$$\frac{c_2}{c_{cj}} = \left(\frac{p_2}{p_{cj}} \right)^{\frac{\gamma-1}{2}} \quad (4-1)$$

با استفاده از رابطه (۴-۱)، رابطه (۳-۱) پس از مرتب سازی به صورت زیر در می آید:

$$u_2 + c_2 = u_{cj} + c_{cj} - \frac{\gamma+1}{2} (u_{cj} - u_2) \quad (5-1)$$

با استفاده از معادله (۵-۱) رابطه بین $\frac{r}{R}$ و $\frac{u_2}{u_{cj}}$ ، به صورت زیر قابل استخراج است:

$$\frac{u_2}{u_{cj}} = \frac{r}{R} \left(\frac{2D}{(\gamma+1)u_{cj}} \right) + \left(1 - \frac{2D}{(\gamma+1)u_{cj}} \right) \quad (6-1)$$

شرط مرزی در محل آغاز تراک تأثیر قابل توجهی در نحوه توزیع خواص در محصولات احتراق دارد. اگر فرض شود ابتدای لوله بسته می باشد، محصولات احتراق نمی توانند از لوله خارج شوند. در این حالت در $r=0$ شرط مرزی به صورت زیر خواهد بود:

$$u_2 = 0 \quad (7-1)$$

محدوده ای که در آن سرعت محصولات برابر صفر است از ابتدای لوله تا نقطه A در داخل لوله ادامه می یابد. فاصله نقطه A از ابتدای لوله از رابطه زیر به دست می آید:

$$r_A = t \left(D + \frac{\gamma+1}{2} u_{cj} \right) \quad (8-1)$$

برای پیدا کردن سرعت صوت در ناحیه ای که سرعت سیال صفر است باید رابطه (۷-۱) در رابطه (۴-۱) جاگذاری شود، که نهایتاً به رابطه زیر منجر می شود:

$$c_2 = u_{cj} + c_{cj} - \frac{\gamma + 1}{2}(u_{cj}) \quad (9-1)$$

در این تحقیق، برای مدل‌سازی شرایط اولیه بلاست از حل تشابهی تیلر با فرض بسته بودن انتهای لوله استفاده شده است.