

بررسی اثر قواعد مخلوط بر انتشار تراک خمیده در مواد شدیدالانفجار با معادله حالت و نرخ سوزش کلی

حسین سوری^۱، کیومرث مظاهری^{۲*}

۱- دانشگاه تربیت مدرس - گروه مهندسی مکانیک - آزمایشگاه دینامیک گازها

(تاریخ وصول: ۸۸/۲/۲، تاریخ پذیرش: ۸۸/۷/۱۵)

چکیده

در این مقاله، برای مواد شدیدالانفجار با معادله حالت و نرخ سوزش کلی، بر مبنای روش "دینامیک شوک تراک" (DSD) معادلات اولر واکنشی در ناحیه‌ی واکنش مابین شوک پیشرو و مکان صوتی حل شده‌اند و به این وسیله تاثیر انحنای جبهه‌ی تراک در دو حالت واگرا و همگرا بر سرعت انتشار و خواص محصولات حاصل از آن به دست آمده است. معادلات حاکم، در دستگاه متصل به جبهه‌ی تراک نوشته شده‌اند و در استخراج آنها فرض شده که انحنای جبهه‌ی تراک نسبت به طول نیمه واکنش^۴، کم است و تغییرات هندسه‌ی آن نسبت به زمان عبور ذره از ناحیه‌ی واکنش به آهستگی صورت می‌گیرد. نتایج به دست آمده از این تحقیق بر نتایج مراجع معتبر کاملاً منطبق می‌باشد. این تحلیل نشان می‌دهد که با افزایش انحنای جبهه، سرعت تراک واگرا نسبت به تراک تخت پایا کم شده و در صورتی که انحنای آن از حدی بیشتر شود، تراک میرا خواهد شد. در صورتی که تراک به صورت همگرا منتشر شود، با کوچک شدن اندازه‌ی شعاع موج تراک، سرعت و قدرت آن به شدت افزایش می‌یابد. در ناحیه‌ی واکنش مواد شدیدالانفجار، مواد اولیه و محصولات واکنش به صورت همزمان حضور دارند. برای محاسبه‌ی خواص این مخلوط، نیاز به استفاده از یک سری فرضیات است که با نام قواعد مخلوط شناخته می‌شوند. در این تحقیق، تاثیر قواعد مخلوط بر خواص تراک تخت پایا و تراک خمیده بررسی می‌شود. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که فرم قواعد مخلوط تاثیر چندانی بر خواص تراک تخت ندارد. اما این اثر در تراک خمیده واگرا کاملاً مشهود و قابل توجه است. به نحوی که سرعت انتشار تراک و در نتیجه فشار، چگالی و سایر خواص پشت آن را به مقدار زیادی تغییر می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: شدیدالانفجار، دینامیک شوک تراک (DSD)، قاعده‌ی مخلوط، تراک همگرا، تراک واگرا

* E-mail: kiumars@modares.ac.ir

3- Detonation Shock Dynamics

4- Half reaction length

۱- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک

۲- دانشیار مهندسی مکانیک

۱- مقدمه

جبهه تراک (κ)، اندازه‌ی ناحیه‌ی مذکور و به دنبال آن سرعت انتشار تراک تغییر می‌نماید. از این رو می‌توان تنها با تحلیل این ناحیه کوچک از میدان، خصوصیات دینامیک تراک را به دست آورد [۷]. طبق تعریف، انحنای κ مساوی با دو برابر معکوس شعاع انحنای متوسط موضعی جبهه می‌باشد [۷]. همانطور که در شکل (۱) نیز نشان داده شده، انحناء در حالت انتشار واگرا، مثبت و در حالت همگرا، منفی در نظر گرفته می‌شود. لذا انحنای بیشتر در حالت واگرا به معنی کاهش شعاع انحناء است. در حالت همگرا نیز هرچقدر κ منفی‌تر شود، به معنی کاهش اندازه‌ی شعاع انحناء می‌باشد.

با توجه به شکل (۱) در صورتی که تراک به صورت واگرا منتشر شود ($\kappa > 0$)، مکان صوتی در داخل ناحیه‌ی واکنش واقع می‌شود [۷]. در این حالت، بخشی از انرژی تولید شده در ناحیه‌ی واکنش به جبهه تراک نمی‌رسد. علاوه بر این با توجه به اینکه خطوط جریان در پشت جبهه به هم نزدیک می‌شوند، حجم ناحیه‌ی واکنش تأثیرگذار بر جبهه‌ی تراک کم خواهد شد و در نتیجه نسبت به تراک تخت انرژی کمتری به جبهه خواهد رسید. طول ناحیه‌ی واکنش نیز نسبت به تراک تخت بیشتر است. این عوامل باعث می‌شوند که سرعت تراک نسبت به تراک تخت کمتر باشد. در تراک همگرا ($\kappa < 0$) مکان صوتی در بیرون ناحیه‌ی واکنش است. بنابراین کل انرژی واکنش به شوک پیشرو می‌رسد. خطوط جریان در پشت جبهه از هم دور می‌شوند، طول ناحیه‌ی واکنش نیز نسبت به تراک تخت کمتر است. همه‌ی این عوامل باعث خواهند شد که سرعت تراک نسبت به تراک تخت افزایش یابد. به این ترتیب می‌توان انتظار داشت که در حالت همگرا با افزایش اندازه انحنای جبهه (بدون توجه به علامت منفی آن) سرعت تراک نیز افزایش یابد. بر این مبنای وود و کرکوود^۵ [۸] مدل ZND را برای توصیف جریان محوری پشت یک جبهه شوک کروی پایای واگرا توسعه دادند. آنها معادلات بقای انتگرالی را (مشابه روابط رانکین-هگونیوت) برای چنین هندسه‌ای استخراج نمودند. مطابق مدل وود-کرکوود، با افزایش انحنای جبهه، سرعت تراک پایا به صورت خطی کاهش می‌یابد.

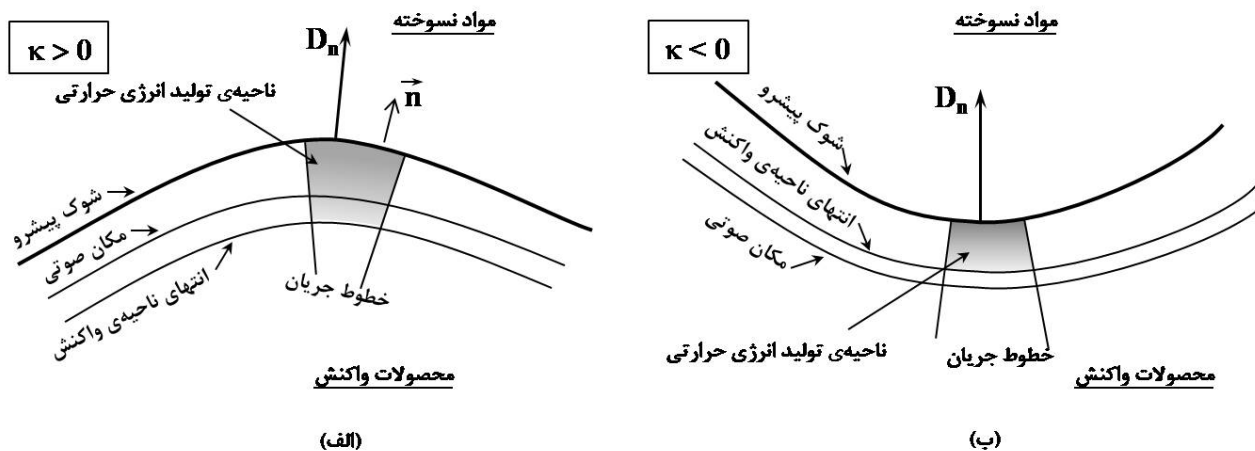
موج تراک از یک شوک پیشرو و یک ناحیه‌ی واکنش شیمیایی دنباله رو تشکیل شده است، به نحوی که انرژی حاصل از واکنش شیمیایی از میرایی شوک جلوگیری می‌نماید. مدل سازی تراک با ارائه تئوری چپمن-ژوگت^۱ (CJ) [۱-۳] آغاز شد. این تئوری یک موج تراک ایده‌آل یک بعدی پایا را از نقطه نظر ترمودینامیکی مورد بررسی قرار می‌دهد. تئوری مذکور سرعت تراک ایده‌آل، D_{CJ} ، را به صورت یک تابع ترمودینامیکی تعریف می‌کند که تنها به مقدار انرژی آزاد شده و معادله حالت وابسته بوده و به سینتیک آزاد شدن انرژی وابستگی ندارد. لذا هیچگونه جزئیاتی را در مورد ناحیه‌ی واکنش موج تراک ارائه نمی‌کند. در این تئوری، سرعت محصولات تراک در نقطه CJ، نسبت به شوک پیشرو، برابر سرعت موضعی صوت می‌باشد.

قدم بعدی در مدل سازی تراک، توسط زلدویچ^۲ [۴] ون نیومن^۳ [۵] و دورینگ^۴ [۶] برداشته شد که یک موج تراک یک بعدی تخت پایا با یک ناحیه‌ی واکنش با ضخامت محدود را مورد تحلیل قرار دادند. طبق مدل زلدویچ-نیومن-دورینگ (ZND)، آزاد شدن انرژی در پشت جبهه‌ی شوک شروع می‌شود و تا زمانی که تعادل ترمودینامیکی ایجاد شود ادامه خواهد یافت. این نقطه‌ی تعادل در انتهای ناحیه‌ی واکنش، دارای خواص نقطه‌ی CJ در تئوری چپمن-ژوگت است، از جمله، در این تئوری نیز سرعت محصولات در نقطه‌ی CJ (انتهای ناحیه‌ی واکنش) برابر سرعت موضعی صوت می‌باشد. سرعت تراک در مدل ZND برابر با D_{CJ} در نظر گرفته می‌شود. مدل‌های CJ و ZND برای تراک یک بعدی تخت پایا مناسب می‌باشند. این در حالی است که در حالت واقعی، تراک، چند بعدی و خمیده است.

همانگونه که در شکل (۱) نشان داده شده است، در ناحیه‌ی واکنش تراک، یک مکان هندسی وجود دارد که در آن سرعت حرکت ذرات نسبت به شوک پیشرو برابر سرعت صوت در همان مکان است. جریان در پایین دست این مکان صوتی، مافوق صوت است. تنها قسمتی از ناحیه پشت تراک بر حرکت جبهه‌ی تراک تأثیر خواهد داشت که مابین مکان صوتی و شوک پیشرو قرار داشته باشد. با تغییر انحنای

5- Wood and Kirkwood
6- Rankine-Hugoniot relations

1- Chapman-Jouguet
2- Zeldovich
3- Von Neumann
4- Döring



شکل ۱- ساختار ناحیه واکنش موج تراک واگرا (الف) و همگرا (ب).

نمودار به دست آمده از داده های تجربی، از مدل DSD به عنوان ابزاری برای کالیبراسیون ضرایب نرخ واکنش مواد شدیدالانفجار استفاده نمود. در ناحیه واکنش مواد شدیدالانفجار ناهمگن، مواد نسوخته جامد به همراه محصولات آن که عمدتاً به صورت گاز می باشند، همزمان در کنار هم حضور دارند. در این شرایط برای محاسبه خواص مخلوط، نیاز به استفاده از یکسری فرضیات است که با نام قواعد مخلوط^۶ شناخته می شوند. استوارت، یو^۷ و دیویس^۸ [۱۳] نشان دادند که فرم در نظر گرفته شده برای قواعد مخلوط بر خواصی مانند فشار، چگالی و سرعت ذره در ناحیه واکنش برای تراک تخت تاثیر زیادی ندارد. آنها بیان نموده اند که برای تراک چند بعدی این مسئله نیاز به بررسی بیشتر دارد. در این مقاله، تاثیر قواعد مخلوط بر تراک چند بعدی به وسیله بررسی اثر آن بر نمودار D-K مورد ارزیابی قرار گرفته است.

لازم به ذکر است که حل های عددی مستقیم وابسته به زمان تراک بر مبنای معادلات اولر به علت هم مرتبه نبودن مقیاس طول در ناحیه واکنش و مابقی میدان، بسیار زمان بر می باشند و لذا برای طراحی مهندسی سیستم های انفجاری مقرون به صرفه نیستند [۱۴]. به همین دلیل در حال حاضر، مدل

استوارت^۱ و بدزیل^۲ [۹] اولین بار برای مخلوطی با معادله حالت پلی تروپیک و سینتیک تک مرحله ای، با حل ناحیه واکنش مابین شوک پیشرو و مکان صوتی به روش مجانبی^۳، رابطه بین سرعت عمودی تراک D و انحنای جبهه شوک پیشرو K را برای تراک خمیده استخراج نمودند. آنها نشان دادند که این رابطه، تنها به خواص ماده منفجره بستگی دارد و از این رو جزء خصوصیات ذاتی^۴ ماده محسوب می شود. این کار با فرض انحنای کم جبهه تراک و تغییر آهسته دینامیک شوک نسبت به مقیاس زمان عبور ذره از ناحیه واکنش انجام گرفت. تئوری مجانبی مذکور بعد از این با عنوان مدل DSD شناخته شد.

یائو^۵ و استوارت [۱۰] نشان دادند که مواد منفجره با سینتیک آرنیوسی تک مرحله ای و انرژی فعال سازی زیاد می توانند دارای یک نمودار شبه پایای سرعت - انحناء به شکل حرف Z باشند. استوارت و یائو [۱۱] برای مواد شدیدالانفجار با معادله حالت پیچیده نمودار D-K را استخراج نمودند اما فرم ساده ای را برای نرخ واکنش در نظر گرفتند. وسکات [۱۲] برای مواد شدیدالانفجار ناهمگن با معادله حالت و نرخ سوزش پیچیده، نمودار D-K را استخراج نمود. او به وسیله ایجاد انطباق بین نمودار D-K محاسباتی و

6- Mixture rule
7- Yoo
8- Davis

1- Stewart
2- Bdzil
3- Asymptotic method
4- Intrinsic
5- Yao

V حجم ویژه، $M = \rho U$ شار جرمی، $P = p + \rho U^2$ شار اندازه حرکت، $H = e(p, V, \lambda) + U^2/2 + pV$ آنتالپی مخصوص کل و e انرژی داخلی می‌باشند. r نرخ واکنش و λ متغیر پیشرفت واکنش است که از صفر در شاک تا یک در انتهای ناحیه واکنش تغییر می‌نماید. کمیت n متغیر مکانی فاصله از شاک است که علامت آن به سمت داخل ناحیه واکنش، منفی می‌باشد. لازم به ذکر است که این معادلات به فرم شبه یک بعدی می‌باشند.

معادلات حاکم مورد نیاز با مشخص کردن معادله حالت به فرم کلی $e = e(p, V, \lambda)$ ، رابطه نرخ سوزش $r = r(p, V, \lambda)$ و قانون مخلوط تکمیل می‌شوند. در اینجا واکنش به صورت یک مرحله‌ای گرمازا در نظر گرفته می‌شود که می‌توان پیشرفت آن را تنها با یک متغیر پیشرفت واکنش توصیف نمود. فرم معادلات حالت و نرخ سوزش در ضمیمه (الف) معرفی شده اند. ادامه شرایط مرزی، روش حل معادلات حاکم و استخراج نمودار $D-K$ بیان می‌گردد. با توجه به اینکه برای شروع حل به متغیرهای اولیه^۲ احتیاج است، ابتدا نحوه محاسبه این متغیرها بیان می‌شود.

۳- نحوه محاسبه متغیرهای اولیه

متغیرهای اولیه p ، V و U را می‌توان بر حسب متغیرهای بقایی M ، P و H به صورت زیر بیان نمود:

$$p = P - M^2 V, \quad U = MV \quad (5)$$

که $V(M, P, H, \lambda)$ با حل معادله انرژی که به صورت زیر است، به دست می‌آید [۱۵]:

$$H - e(P - M^2 V, V, \lambda) - \frac{M^2 V^2}{2} - (P - M^2 V)V = 0 \quad (6)$$

معادله (۶) یک معادله جبری برای محاسبه V است که بر حسب متغیرهای بقایی M ، P ، H و λ بیان شده است. در حالت کلی معادله (۶) که شکلی از معادله هوگونیوت است، دارای دو جواب است که یکی مربوط به شاخه سوزش سریع (دفلاگیشن^۳) و دیگری مربوط به شاخه تراک می‌باشد. در اینجا جوابی که با شرایط تراک مطابقت دارد در نظر گرفته می‌شود [۱۶].

DSD به علت کارایی خیلی خوب از نظر زمان حل، به عنوان یک جایگزین برای حل‌های عددی مستقیم در هندسه‌های پیچیده مورد استفاده قرار می‌گیرد.

استخراج رابطه $D-K$ به روش مجانبی برای مواد شدیدالانفجار که معادله حالت و نرخ سوزش پیچیده‌ای دارند، قابل انجام نیست. لذا در این تحقیق نیز همانند وسکات [۱۲] به جای اینکه از این روش برای حل معادلات حاکم در ناحیه بین شوک پیشرو و مکان صوتی استفاده شود، این کار به صورت عددی با استفاده از یک الگوریتم شوتینگ^۱ انجام خواهد شد. به این ترتیب محدودیت در انتخاب فرم معادله حالت و نرخ سوزش از بین می‌رود. علاوه بر این در کار حاضر استخراج رابطه $D-K$ برای موج تراک همگرا نیز انجام می‌شود. محصول نهایی، نمودارهایی است که بیانگر تاثیر انحنای جبهه‌ی تراک بر سرعت انتشار و خواص جریان در مکان صوتی می‌باشند. ذکر این نکته لازم است که این روابط جزء خواص ذاتی ماده‌ی شدیدالانفجار محسوب می‌شوند و بنابراین برای هر ماده تنها یک بار نیاز به استخراج دارند. بنابراین با استخراج این روابط برای ماده‌ی مورد نظر، می‌توان بدون نیاز به معادله حالت و نرخ سوزش، مکان جبهه‌ی تراک و خواص پشت آن را در آن ماده با هر هندسه‌ی دلخواه به دست آورد.

۲- معادلات حاکم ساده شده در دستگاه شوک به فرم شبه بقایی

فرم شبه بقایی معادلات اولر واکنشی در دستگاه متصل به شوک پیشرو، با فرض انحنای کم جبهه‌ی شوک و جریان شبه پایا، به شکل ساده شده زیر در می‌آیند [۱۵]:

$$\frac{\partial M}{\partial n} = -\kappa \rho (U + D) \quad (1)$$

$$\frac{\partial P}{\partial n} = -\kappa \rho U (U + D) \quad (2)$$

$$\frac{\partial H}{\partial n} = 0 \quad (3)$$

$$U \frac{\partial \lambda}{\partial n} = r \quad (4)$$

که در آنها $U = u - D$ سرعت ذره در دستگاه چسبیده به شاک، u سرعت ذره در دستگاه متصل به زمین، D سرعت شاک، p فشار، $\rho = 1/V$ چگالی،

2- Primitive variables
3- Deflagration

1- Shooting

۴- شرایط در مکان صوتی

معادله‌ی بقای انرژی بر حسب متغیرهای اولیه را می‌توان با استفاده از معادلات بقای جرم و مومنتم به صورت زیر بازنویسی کرد [۱۷]:

(۷)

$$\frac{\partial U}{\partial n} = - \frac{\left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial e / \partial \lambda}{\partial e / \partial p} r + c^2 \kappa (U + D) \right]}{(c^2 - U^2)}$$

این معادله معادله‌ی اصلی^۱ نامیده می‌شود. زمانی که جریان صوتی است یعنی:

$$\eta \equiv c^2 - U^2 = 0 \quad (۸)$$

مخرج کسر در معادله‌ی اصلی صفر می‌شود. با توجه به اینکه گرادیان سرعت همواره مقدار محدودی دارد، مقدار صورت کسر نیز در مکان صوتی بایستی برابر صفر شود:

$$\phi \equiv - \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial e / \partial \lambda}{\partial e / \partial p} r + c^2 \kappa (U + D) \right] = 0 \quad (۹)$$

شرط فوق که شرط حرارتی^۲ نامیده می‌شود، به همراه شرط صوتی^۳ (رابطه (۸)) شرایطی هستند که لازم است در مکان صوتی ارضاء شوند. شرط صفر شدن همزمان این دو عبارت با نام شرایط CJ تعمیم یافته^۴ شناخته می‌شود.

۵- شرایط مرزی پشت شوک

از معادلات بقای جرم، مومنتم و انرژی می‌توان برای استخراج شرایط مرزی در شوک پیشرو استفاده کرد. این روابط که با نام روابط رانکین-هگونیوت شناخته می‌شوند، بر حسب متغیرهای بقایی M ، P و H ، به شکل زیر نوشته می‌شوند [۱۵]:

$$M_0 = -D/V_0 \quad (۱۰)$$

$$P_0 = p_0 + D^2/V_0 \quad (۱۱)$$

$$H_0 = e_0 + p_0 V_0 + \frac{D^2}{2} \quad (۱۲)$$

-
- 1- Master equation
 - 2- Thermicity condition
 - 3- Sonic condition
 - 4- Generalized CJ conditions

در اینجا V_0 ، p_0 و e_0 خواص ماده منفجره در شرایط محیط، و M_0 ، P_0 و H_0 متغیرهای بقایی در شاک پیشرو می‌باشند.

هدفی که در ادامه کار دنبال می‌شود، حل معادلات (۱) تا (۴) با شرایط مرزی معادلات رانکین - هگونیوت در شاک و شرایط CJ تعمیم یافته در مکان صوتی می‌باشد. شرایط CJ تعمیم یافته تنها زمانی قابل ارضاء است که یک رابطه ویژه بین D و κ وجود داشته باشد. به عبارت دیگر می‌توان معادل یک D مورد نظر، یک مقدار یگانه برای κ به نحوی انتخاب کرد که هنگام انتگرال گیری معادلات بقای حاکم، شرایط CJ تعمیم یافته برآورده شوند. معادلات بقا در ناحیه‌ی بین شاک پیشرو و مکان CJ تعمیم یافته از نوع معادلات دیفرانسیل مرتبه اول می‌باشند که در حالت معمول تنها نیازمند به یک شرط مرزی می‌باشند. اما با توجه به لزوم ارضای شرایط CJ تعمیم یافته در مکان صوتی، این مسئله در واقع به یک مسئله مقدار ویژه^۵ تبدیل شده است. برای حل این قبیل مسائل، می‌توان از روش شوتینگ استفاده کرد. در ادامه نحوه‌ی محاسبه رابطه D - κ بیان خواهد شد.

۶- استراتژی حل ناحیه واکنش و استخراج رابطه D - κ

از آنجا که طبق رابطه‌ی بقای انرژی (۳) مقدار انتالپی مخصوص در سرتاسر ناحیه‌ی واکنش مقدار ثابتی است، می‌توان برای محاسبه V که در معادلات بقای جرم و مومنتم ظاهر می‌شود، از رابطه هگونیوت که به صورت زیر است، استفاده نمود [۱۶]:

(۱۳)

$$H = H_0 \Rightarrow e(P - M^2 V, V, \lambda) - \frac{1}{2} M^2 V^2 + PV = e_0 + p_0 V_0 + \frac{1}{2} D^2$$

این رابطه دو جواب دارد که از این بین باید جوابی که مربوط به شاخه‌ی تراک است را انتخاب نمود.

با استفاده از رابطه‌ی نرخ واکنش (معادله (۴)) می‌توان در معادلات بقای جرم و مومنتم متغیر n را با متغیر λ جایگزین نموده و این معادلات را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\frac{\partial M}{\partial \lambda} = -\kappa \rho \frac{U}{r} (U + D) \quad (۱۴)$$

$$\frac{\partial P}{\partial \lambda} = -\kappa \rho \frac{U^2}{r} (U + D) \quad (۱۵)$$

5- Eigenvalue problem

۶-۲- محاسبه‌ی باقیمانده های دوم و سوم

شرایط شوک بر حسب متغیرهای M و P را می‌توان به سادگی محاسبه نمود. به این صورت که در شوک، $M = -\rho_0 D$ و $P = \rho_0 D^2$ می‌باشند. باقیمانده‌های دوم و سوم با انتگرال‌گیری متغیرهای M و P از مکان صوتی در λ^* تا شوک در $\lambda = 0$ محاسبه می‌شوند. در شوک می‌توان نوشت:

$$R_2 = M(\lambda = 0) + \rho_0 D \quad (20)$$

$$R_3 = P(\lambda = 0) - \rho_0 D^2$$

حال برای D مورد نظر، ابتدا یک مقدار برای κ ، p^* و V^* حدس زده می‌شود و سپس این مقادیر با اعمال یک روش تکرار، با هدف صفر کردن سه باقیمانده‌ی فوق‌الذکر، اصلاح می‌شوند. در عمل، ابتدا با انتخاب یک مقدار D نزدیک به D_C ، می‌توان برای مقادیر حدسی اولیه از تراک CJ استفاده نمود. سپس مقدار D بعدی را نزدیک به D قبلی انتخاب نموده و از نتایج حل مرحله قبل به‌عنوان حدس اولیه در این مرحله استفاده کرد. نکته‌ای که ذکر آن در اینجا مناسب به نظر می‌رسد، این است که معادلات (۱۴) و (۱۵) در انتهای ناحیه‌ی واکنش که $r = 0$ است، تکین^۲ می‌باشند. با این حال در حالتی که علامت انحناء κ مثبت (موج تراک واگرا) باشد، انتهای ناحیه واکنش بعد از مکان صوتی قرار می‌گیرد. به همین دلیل تکین بودن معادلات مذکور در این حالت مشکلی در مسیر انتگرال‌گیری ایجاد نمی‌کند. نحوه‌ی حل این مشکل برای تراک همگرا در ادامه ذکر خواهد شد. با استفاده از این الگوریتم، علاوه بر محاسبه‌ی خواص در ناحیه‌ی واکنش، تغییرات سرعت تراک و خصوصیات میدان در مکان صوتی با انحنای جبهه به‌دست می‌آید.

۶-۳- خلاصه‌ی الگوریتم حل

- ۱- مراحل حل ناحیه‌ی واکنش و استخراج منحنی $D-\kappa$ را به‌صورت زیر می‌توان خلاصه نمود:
- ۱- یک مقدار D انتخاب شود؛
- ۲- مقادیر κ ، p^* و V^* حدس زده شوند؛
- ۳- با استفاده از رابطه حرارتی $\Phi = 0$ ، و با اعمال شرط صوتی $U_* = -c$ ، مقدار λ^* محاسبه شود؛
- ۴- با استفاده از رابطه هوگونیوت، مقدار U_* محاسبه شود؛

2- Singular

حال سه معادله (۱۳) تا (۱۵) بایستی با در نظر گرفتن شرایط در مکان صوتی و پشت شوک، در سرتاسر ناحیه‌ی واکنش حل شوند. روش انجام این کار، روش شوتینگ است: در این روش خواص میدان در مکان صوتی حدس زده می‌شوند. با حل معادلات حاکم از مکان صوتی به سمت شوک، خواص میدان در پشت شوک به‌دست می‌آیند. این خواص بایستی با خواصی که از روابط رانکین-هوگونیوت برای پشت شوک به‌دست می‌آیند، برابر باشند. در ادامه باقیمانده‌های حل که در واقع خطاهایی می‌باشند که بایستی صفر شوند، معرفی می‌گردند.

۶-۱- محاسبه‌ی اولین باقیمانده^۱

ابتدا برای یک D دلخواه، مقادیری برای κ ، V^* و p^* حدس زده می‌شود. در اینجا زیرنویس * نشانگر شرایط در مکان صوتی است. یادآوری می‌شود که تعریف استاندارد سرعت صوت به‌صورت زیر است:

$$c^2 = V^2 \left(p + \frac{\partial e}{\partial V} \right) / \frac{\partial e}{\partial p} \quad (16)$$

اگر در شرط حرارتی (۹) به‌جای سرعت از شرط صوتی (۸) جاگذاری شود، رابطه زیر به‌دست خواهد آمد که با توجه به تعریف سرعت صوت و حدس زدن مقادیر انحنای جبهه، حجم ویژه و فشار، تنها تابعی از λ^* است:

$$\phi \equiv - \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial e / \partial \lambda}{\partial e / \partial p} r + c^2 \kappa (c + D) \right] = 0 \quad (17)$$

با استفاده از یک الگوریتم تکراری، می‌توان مقدار λ^* را از این رابطه به‌دست آورد.

با استفاده از معادله انرژی، که به‌صورت زیر قابل نوشتن است، می‌توان U_* را محاسبه نمود:

(۱۸)

$$U_* = - \left(e_0 + p_0 V_0 + \frac{1}{2} D^2 - e(p_*, V_*, \lambda_*) - p_* V_* \right)^{1/2}$$

اگر مقادیر κ ، V^* و p^* به درستی انتخاب شده باشند، مقدار باقیمانده‌ای که از تفاوت U_* و سرعت صوت در مکان صوتی به‌دست می‌آید بایستی برابر صفر باشد:

$$R_1 = U_* + c(p_*, V_*, \lambda_*) \quad (19)$$

1- Residual

انتگرال گیری شوند، مشکل تکینی در محل انتهای ناحیه واکنش برطرف شده است. در ضمیمه (الف) پس از معرفی مدل نرخ سوزش، عبارت مناسب برای رفع تکینی معرفی شده است.

۸- قواعد مخلوط

ناحیهی واکنش مواد شدیدالانفجار، یک ناحیهی پیچیده است. زمانی که کسری از ماده منفجره مصرف شده است، مخلوطی از مواد اولیه و محصولات واکنش در این ناحیه وجود خواهد داشت. در این شرایط می توان تصور کرد که ذرات ماده منفجره توسط محصولات واکنش احاطه شده اند و این ذرات در یک لایه نازک در سطح بیرونی شان در حال واکنش می باشند. فرض جایگزین این است که ممکن است حجم های کوچکی از محصولات در میان دانه های ماده منفجره وجود داشته باشد و این حجمها در سطح داخلی شان واکنش می دهند. مدل سازی یک چنین سیستم پیچیده ای را تنها می توان با اعمال یکسری فرضیات محدود کننده انجام داد.

فرض هایی که به طور معمول اعمال می شوند به شرح زیرند [۱۳]:

- ۱- سرعت ذرات ماده منفجره و محصولات با هم برابرند. بنابراین محصولات احتراق روی ذرات ماده منفجره جریان ندارند؛
- ۲- مواد منفجره و محصولات به صورت ایده آل با هم مخلوط شده اند؛
- ۳- مواد یا ماده منفجره اند، یا محصولات. یعنی هیچ حالت میانی وجود ندارد؛
- ۴- معادلات حالت برای هر دو مواد اولیه و محصولات معلوم است؛

۵- یک متغیر پیشرفت واکنش برای توصیف پروسه کافی است؛

۶- فشار در مواد اولیه و محصولات مقدار یکسانی دارد.

با استفاده از این فرضیات به همراه معادلات بقا، می توان انرژی داخلی ویژه کل مخلوط را محاسبه کرد. اما هیچ اطلاعاتی در مورد اینکه این انرژی چگونه بین مواد اولیه و محصولات توزیع شده، به دست نمی آید. به همین دلیل یک فرض دیگر نیز نیاز است. دو حالت حدی می توان در نظر گرفت:

۱- مواد اولیه و محصولات در تعادل حرارتی می باشند؛ یعنی انرژی حاصل از واکنش به نحوی تقسیم می شود که دمای مواد اولیه و محصولات با هم برابر شوند.

۲- کل انرژی حاصل از واکنش، در محصولات واکنش باقی می ماند؛ یعنی هیچ انتقال حرارتی به مواد اولیه اتفاق نمی افتد.

در حالت واقعی، انرژی به نحوی بین این دو حالت حدی بین مواد اولیه و محصولات انفجار تقسیم می شود. به عنوان مثال در نزدیکی نقطه ی ون- نیومن که کمی از واکنش اتفاق افتاده است، حالت حدی (۲) یک تقریب

۵- با انتگرال گیری معادلات بقا، مقدار باقیمانده ها به صورت زیر محاسبه شوند:

$$R_1 = U_* + c_* \quad \text{در مکان صوتی:}$$

$$R_2 = M(\lambda=0) + \rho_0 D \quad \text{در شوک:}$$

$$R_3 = P(\lambda=0) - \rho_0 D^2 \quad \text{در شوک:}$$

۶- اگر باقیمانده ها به اندازه کافی کوچک نیستند، با حدس جدید برای κ ، p و V_* به مرحله (۲) بازگشت شود.

با استفاده از این الگوریتم، علاوه بر محاسبه ی خواص در ناحیهی واکنش، تغییرات سرعت تراک و خصوصیات میدان در مکان صوتی با انحنای جبهه به دست می آید.

۷- رفع مشکل تکینی معادلات برای تراک همگرا

جایگزینی مختصات n با مختصات λ در معادلات بقای جرم و مومنتم باعث می شود که معادلات مذکور در انتهای ناحیه واکنش که r است، تکین شوند. در حالتی که تراک همگرا باشد، انتهای ناحیهی واکنش قبل از مکان صوتی قرار خواهد گرفت. لذا انتگرال گیری معادلات بقا با مشکل مواجه خواهد شد. این مشکل را می توان با انجام یک تغییر متغیر مناسب برطرف نمود. این تغییر متغیر باید به نحوی انجام شود که در سرتاسر میدان حل مخرج در سمت راست معادلات بقا مقداری غیر از صفر داشته باشد. به عنوان نمونه اگر رابطه نرخ واکنش به صورت $r \sim (1-\lambda)^v$ با $0 \leq v < 1$ باشد، متغیر λ را می توان به شکل زیر به یک متغیر اسمی s تغییر داد [۱۶]:

$$s = \frac{1 - (1-\lambda)^{1-v}}{1-v} \quad \text{و} \quad \frac{\partial s}{\partial \lambda} = \frac{1}{(1-\lambda)^v} \quad (21)$$

به این ترتیب خواهیم داشت:

$$\frac{\partial s}{\partial \lambda} = \frac{1}{(1-\lambda)^v} \quad (22)$$

تحت این تغییر متغیر، $\lambda = 0$ معادل $s = 0$ و $\lambda = 1$ معادل $s = 1/(1-v)$ خواهد بود. در این حالت معادلات بقا به دو معادله ی زیر تبدیل می شوند:

$$\frac{\partial M}{\partial s} = -\kappa M(U+D) \frac{1}{[r/(1-\lambda)^v]} \quad (23)$$

$$\frac{\partial P}{\partial s} = -\kappa MU(U+D) \frac{1}{[r/(1-\lambda)^v]} \quad (24)$$

همانطور که ذکر شد، محل انتهای ناحیهی واکنش و شاک پیشرو به ترتیب در $s = 0$ و $s = 1/(1-v)$ قرار دارند. اگر این معادلات بر حسب متغیر s

محصولات واکنش باقی می‌ماند و هیچ انتقال حرارتی به مواد اولیه اتفاق نمی‌افتد. این حالت حدی فرض می‌کند که پروسه‌ی گذر موج تراک آنقدر سریع است که فرصت ایجاد تعادل حرارتی بین فازها ایجاد نمی‌شود. در نتیجه در پشت شاک پیشرو، انبساط واکنش‌دهنده‌ها به‌صورت آیزنتروپیک است. در این حالت اگر فشار روی آیزنتروپ p - V را با $p^{isentrope}(V)$ نشان دهیم، آنگاه رابطه تکمیلی ناشی از فرض عدم انتقال حرارت عبارت است از:

$$p = p^{isentrope}(V) \quad (29)$$

در مواردی فرض می‌شود که علاوه بر اینکه فشار و دمای دو فاز با هم برابرند، حجم ویژه آنها نیز با هم یکسان است. یعنی:

$$V = V_r = V_p \quad (30)$$

استفاده از این فرض ساده‌کننده باعث می‌شود که دو مجهول V_r یا V_p خود به خود حذف شوند.

استوارت، یو و دیویس [۱۳] نشان دادند که برای تراک تخت، فرم در نظر گرفته شده برای قواعد مخلوط بر مقدار محاسبه شده برای خواصی مانند فشار، چگالی و سرعت ذره در ناحیه‌ی واکنش تأثیر زیادی ندارد. آنها بیان نموده‌اند که برای تراک چند بعدی این مسئله نیاز به بررسی بیشتر دارد. در کار حاضر، اثر قواعد مخلوط بر تراک چند بعدی به‌وسیله‌ی بررسی تأثیر آن بر نمودار D-K مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.

با فرض اینکه حجم‌های ویژه واکنشگرها و محصولات واکنش با هم برابر نیستند، از فرض تعادل دما و فشار برای استخراج معادله حالت مخلوط استفاده می‌شود. تعادل دمایی واکنشگرها و محصولات، از نظر ریاضی معادل یافتن ریشه $\psi = V_r/V_p$ ، نسبت حجم‌های ویژه جزئی، از معادلات حاصل از فرضیات $T_r = T_p$ و $p_r = p_p$ است. با فرض اختلاط کامل^۱ خواهیم داشت:

$$V = (1-\lambda)V_r + \lambda V_p \quad (31)$$

$$V_r = \frac{\psi V}{\lambda + (1+\lambda)\psi} \quad V_p = \frac{V}{\lambda + (1+\lambda)\psi} \quad (32)$$

$$e(p, V, \lambda) = (1-\lambda)e_r(p, V_r) + \lambda e_p(p, V_p) \quad (33)$$

با داشتن کمیت‌های V ، p و λ و با استفاده از روابط فوق، کمیت ψ تنها مجهول در معادله تعادل دمایی خواهد بود. برای معادلات حالتی که در

قابل قبول می‌باشد [۱۳]. در حالی که نزدیک نقطه‌ی CJ، که عمده‌ی واکنش انجام شده است و ذرات ماده منفجره خیلی کوچک می‌باشند، شرایطی نزدیک به حالت حدی (۱) حاکم است. به این ترتیب مدلی برای شرایط مابین این دو حالت حدی مورد نیاز است. به این معنی که یک معادله حالت برای مخلوط مواد اولیه و محصولات انفجار در شرایطی که بخشی از ماده منفجره واکنش داده است، مورد نیاز است.

یک فرض که در اکثر مراجع برای محاسبه‌ی معادله حالت مخلوط مورد استفاده قرار گرفته این است که انرژی ویژه داخلی با استفاده از مجموع وزنی به‌دست می‌آید [۱۸-۲۲]:

$$e = (1-\lambda)e_r(V_r, p_r) + \lambda e_p(V_p, p_p) \quad (25)$$

همچنین در اکثر مواقع فرض می‌شود که حجم ویژه نیز با استفاده از مجموع وزنی به‌دست می‌آید:

$$V = (1-\lambda)V_r + \lambda V_p \quad (26)$$

معادلات فوق، چهار مجهول جدید V_p ، V_r و همچنین p_r و p_p به مجموع مجهولات قبلی اضافه می‌نمایند. به همین دلیل نیاز به یکسری فرضیات تکمیلی برای بسته شدن سیستم دستگاه معادلات است. بدین منظور در بسیاری از موارد از فرض تعادل فشاری برای حذف دو مجهول p_r و p_p استفاده می‌شود. به این معنی که [۱۸-۲۲]:

$$p = p_r = p_p \quad (27)$$

برای حل مشکل ناشی از اضافه شدن دو مجهول V_p و V_r ، نیاز به یک فرض تکمیلی دیگر است. بدین منظور نیز در اکثر مواقع از حالت حدی (۱) مورد اشاره در بخش قبل استفاده شده است. یعنی انرژی حاصل از واکنش به نحوی تقسیم می‌شود که دمای مواد اولیه و محصولات با هم برابر شوند. یعنی:

$$T = T_r = T_p \quad (28)$$

نحوه استفاده از فرض اخیر به این صورت است که دما از دو معادله حالت مواد اولیه و محصولات استخراج شده و سپس این دو دما با هم برابر قرار داده می‌شوند. به این ترتیب در روند حل معادلات با داشتن p ، V و λ می‌توان با استفاده از این رابطه و رابطه‌ی حجم‌های ویژه (۲۶)، دو مجهول V_r یا V_p را با یک الگوریتم تکراری به‌دست آورد.

در بعضی از مراجع از حالت حدی شماره (۲) به‌عنوان بخشی از قانون مخلوط استفاده شده است [۱۳، ۲۳]. یعنی اینکه کل انرژی حاصل از واکنش، در

1- Perfect mixing

۹- نتایج

در کار حاضر الگوریتم بالا به منظور استخراج رابطه D-k برای ترکیب شدیدالانفجار PBX-9502 که یک ماده با تراک غیر ایده‌آل بر پایه‌ی ماده‌ی شدیدالانفجار TATB می‌باشد، به کار رفته است. سپس تاثیر نوع قواعد مخلوط بر این نمودار مورد ارزیابی قرار گرفته است. معادله حالت و نرخ سوزش مورد استفاده و ضرایب آنها برای PBX-9502 در ضمیمه (الف) آمده است.

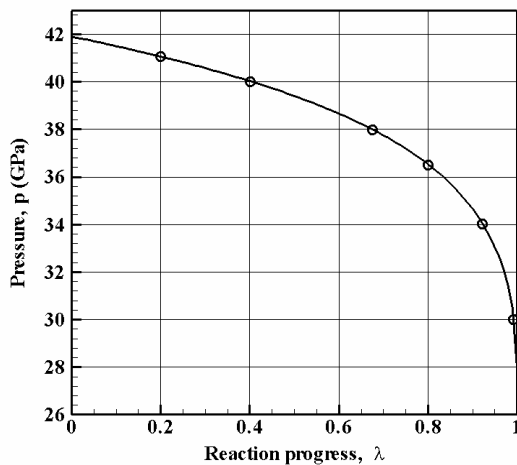
در ابتدا به منظور اطمینان از درستی پیش‌بینی ساختار ناحیه‌ی واکنش، نتایج مربوط به تراک با انحنای صفر (تراک ZND تخت) در شکل (ب) با محاسبات مرجع [۱۲] مقایسه شده است.

ضمیمه (الف) معرفی شده اند، معادله تعادل دمایی به صورت زیر نوشته می‌شود:

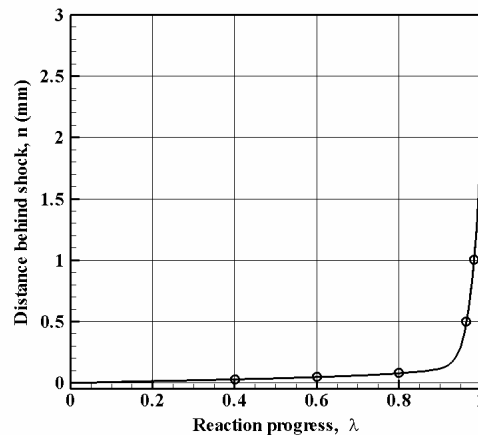
$$T_r^s(V) \left\{ \frac{1 + \alpha_{ST}}{C_V^0 T_r^s(V)} (e - e_r^s(V)) + 1 \right\}^{1/(1+\alpha_{ST})} \quad (34)$$

$$= T_p^s(V) + \frac{e - e_p^s(V)}{C_V}$$

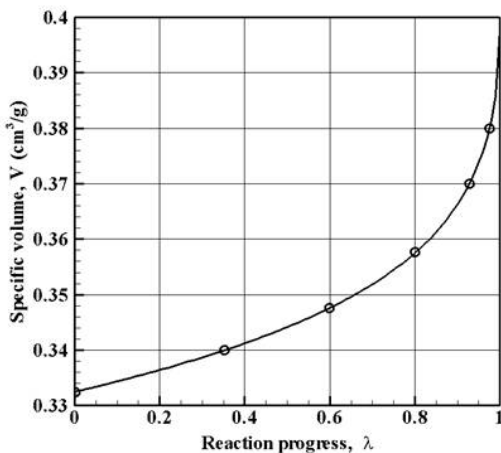
برای مقایسه، از فرض ساده $V_r = V_p$ نیز در استخراج نتایج استفاده خواهد شد. در این حالت مجهولی به مجهولات قبلی اضافه نمی‌شود و تنها رابطه (۳۳) مورد استفاده قرار خواهد گرفت.



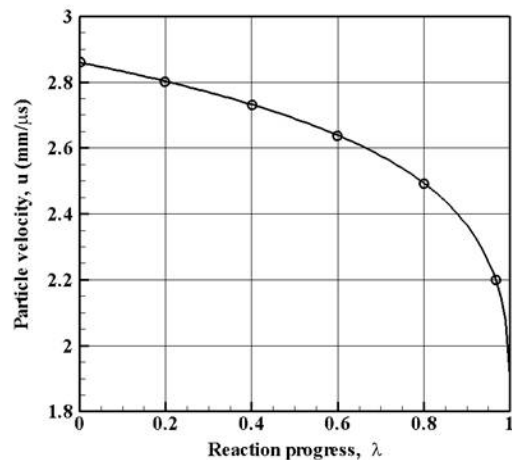
(ب)



(الف)



(د)



(ج)

شکل ۲- ساختار تراک با انحنای صفر (تراک ZND تخت) (خط: —) بر حسب پارامتر پیشرفت واکنش λ در مقایسه با مرجع [۱۲] (نقاط دایره ای شکل: ○) شامل اندازه فاصله از شوک (الف)، فشار (ب)، سرعت ذره نسبت به دستگاه ساکن (ج) و حجم ویژه مخلوط (د).

وسکات از فرض تعادل دما و فشار استفاده شده است. مشاهده می‌شود که نمودار EQB همخوانی خیلی خوبی با نمودار وسکات و برازش نتایج تجربی دارد. اما نمودار non-EQB به مقدار قابل توجهی از نمودار به‌دست آمده توسط وسکات و نمودار حاصل از برازش داده های تجربی فاصله دارد. این اختلاف با افزایش انحنای جبهه بیشتر می‌شود. مشاهده می‌گردد که در انحنای صفر و در انحنای منفی نمودار non-EQB بر نمودار EQB منطبق است.

لازم به ذکر است که برای قسمتی که نمودارهای حاصل از محاسبات با نمودار تجربی تطابق ندارد، داده تجربی موجود نیست و عدم تطابق بخاطر برون‌یابی نامناسب داده های تجربی است.

عدم دقت نمودار non-EQB این است که الگوریتم $D-K$ به تحلیل دقیق ناحیه‌ی واکنش در مکان صوتی خیلی حساس است. از آنجا که مکان صوتی در ناحیه‌ای قرار دارد که عمده واکنشها انجام شده است، لذا همان‌طور که در بخش ۸ ذکر شد، در این ناحیه ذرات ماده منفجره خیلی کوچک می‌باشند و شرط حدی تساوی دمای مواد اولیه و محصولات تراک حاکم است. اما در استخراج نمودار non-EQB دماها یکسان در نظر گرفته نشده‌اند. برای حالت تراک تخت و تراک همگرا کل واکنش در مکان صوتی به اتمام رسیده است لذا قاعده مخلوط تأثیری بر دقت نمودار $D-K$ نخواهد داشت.

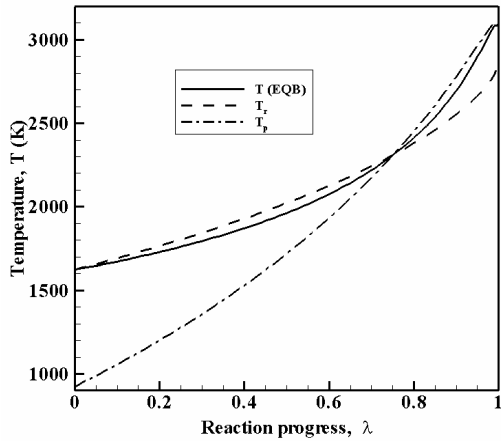
در شکل (۴) دیده می‌شود که با افزایش انحنای جبهه، سرعت تراک کاهش می‌یابد و از حدی به بعد اگر انحنای جبهه تراک افزایش یابد، از حل معادلات حاکم جوابی برای D به‌دست نخواهد آمد. به این حد، انحنای بحرانی گفته می‌شود. با افزایش انحناء به بیش از انحنای بحرانی تراک خاموش خواهد شد. شاخه پایینی نمودار $D-K$ ، یعنی قسمتی که در آن سرعت کمتر از سرعت مربوط به انحنای بحرانی است، یک شاخه ناپایدار است [۱۱]. چراکه در این قسمت از نمودار بر خلاف فیزیک واقعی تراک، با افزایش سرعت، انحنای تراک نیز افزایش می‌یابد. از طرف دیگر، مشاهده می‌شود که در حالت تراک همگرا (قسمت منفی محور انحناء) هرچقدر که انحناء منفی تر می‌شود (تراک به مرکز نزدیکتر می‌شود)، سرعت آن افزایش خواهد یافت.

در شکل (۵) نمودار تغییرات خواص میدان شامل فشار، چگالی و سرعت در مکان صوتی نسبت به یک دستگاه ساکن (متصل به آزمایشگاه) با در نظر گرفتن قاعده مخلوط EQB رسم شده است. دیده می‌شود که کمیتهای مزبور نیز همانند سرعت تراک با افزایش انحناء کاهش یافته و در حالت تراک همگرا با نزدیک شدن به مرکز، کمیتهای مزبور به شدت افزایش می‌یابند.

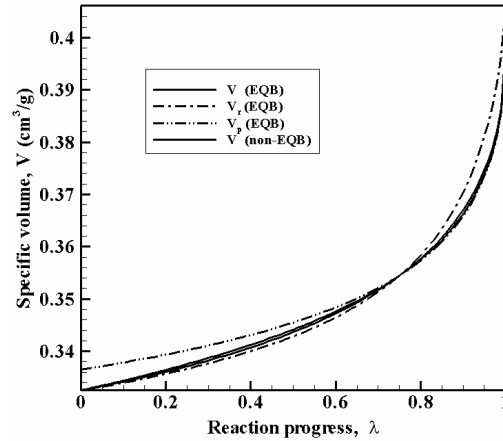
همانطور که مشاهده می‌گردد، نتایج حاضر کاملاً بر نتایج مرجع مذکور منطبق می‌باشد. در کلیه این نمودارها همانند مرجع [۱۲] از فرض تساوی دمای واکنشگرها و محصولات استفاده شده است. دقت شود که سرعت در دستگاه ساکن (متصل به آزمایشگاه) بیان گردیده است.

در شکل (۳) ساختار ناحیه واکنش برای تراک با انحنای صفر که بر اساس قاعده مخلوط تعادل فشار و دما و نیز قاعده مخلوط تعادل فشار و تساوی حجم‌های ویژه (عدم تعادل دما) به‌دست آمده، نشان داده شده است. نمودارهای مربوط به قاعده مخلوط تعادل فشار و دما با عبارت (EQB) و قاعده مخلوط تعادل فشار و تساوی حجم‌های ویژه با عبارت (non-EQB) مشخص شده‌اند. مهم‌ترین تفاوت بین این دو حالت این است که حالت (non-EQB) اجازه می‌دهد که مواد اولیه و محصولات، دماهای متفاوتی داشته باشند، درحالی‌که حالت (EQB) یک دمای تعادلی برای هر دو در نظر می‌گیرد که در ناحیه واکنش بین دمای قلّه‌ی ون نیومن (۱۶۲۳) درجه کلوین) و دمای CJ (۳۰۸۶ درجه کلوین) تغییر می‌کند. شکل (۳) نشان می‌دهد که علیرغم وجود اختلاف قابل توجه در حجم‌های ویژه واکنشگرها و محصولات در حالت (EQB)، اختلاف کمی در فشار، حجم ویژه کل مخلوط و سرعت ذره مشاهده می‌شود. به نظر می‌رسد که شرایط مکانیکی و در نتیجه معادله حالت مکانیکی (معادله حالتی که در آن کمیت دما حضور ندارد) تا حد زیادی به فرم قاعده مخلوط غیر حساس می‌باشند. این در حالی است که با توجه به نمودارهای دما، شرایط حرارتی در ناحیه واکنش حساسیت زیادی نسبت به فرم قاعده مخلوط دارند. از طرف دیگر، از آنجا که رابطه نرخ واکنش به فشار وابسته است، مشاهده می‌گردد که تأثیر فرم قاعده مخلوط بر نرخ واکنش و فاصله از شوک ناچیز می‌باشد.

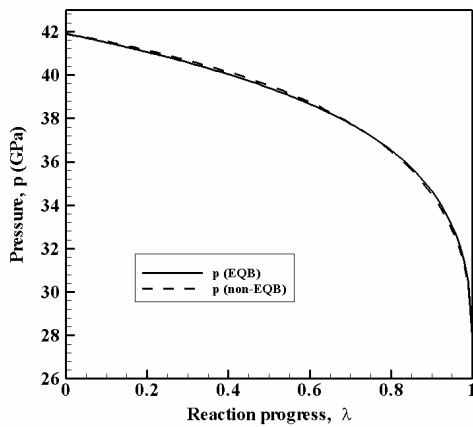
در تراک با انحنای صفر (تراک ZND تخت) سرعت انتشار تراک ارتباطی با ناحیه‌ی واکنش و توزیع خواص در آن ندارد. اما در حالتی که تراک دارای انحناء باشد، انتظار می‌رود که نوع قواعد مخلوط بر سرعت تراک موثر باشد. از این رو نمودار $D-K$ برای تراک همگرا و واگرا در ترکیب شدیدالانفجار PBX-9502 استخراج و در شکل (۴) آورده شده است. این شکل شامل تراک با انحنای مثبت و منفی (تراک واگرا و همگرا) می‌باشد. دو نمودار $D-K$ با استفاده از دو قانون مخلوط مبتنی بر فرض تعادل دما و فشار (مشخص شده با عبارت EQB) و مبتنی بر فرض تساوی حجم‌های ویژه و عدم تعادل دمایی (مشخص شده با عبارت non-EQB) در این شکل با یکدیگر و با نتایج وسکات و برازش نتایج تجربی [۱۲] مقایسه شده اند. لازم به ذکر است که در کار



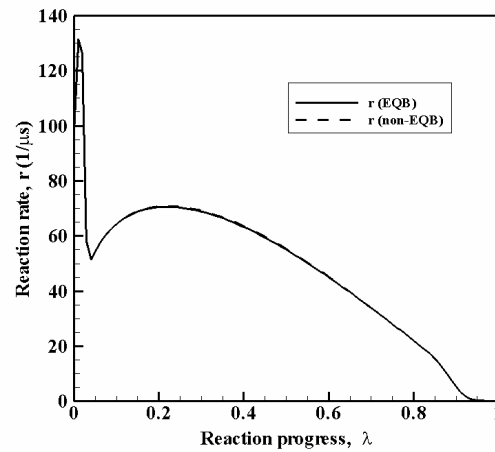
(ب)



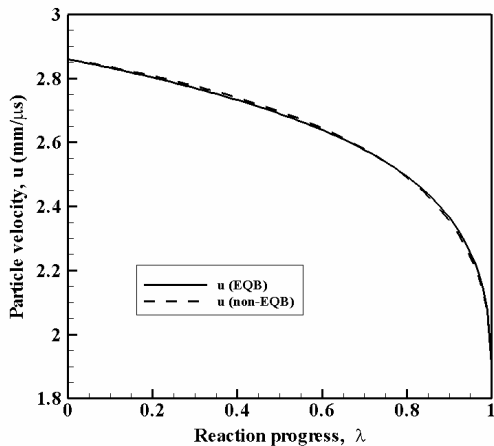
(الف)



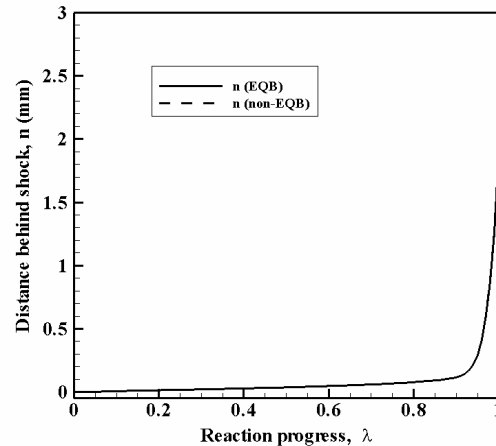
(د)



(ج)

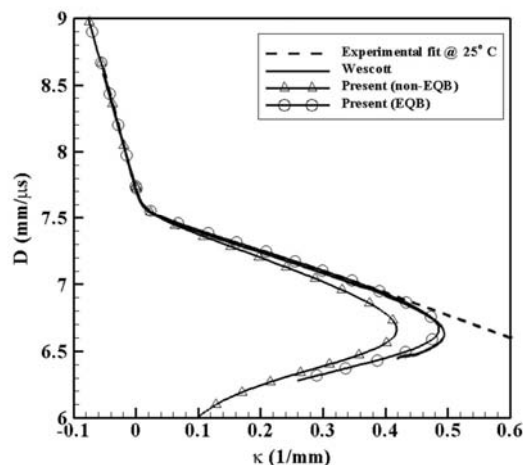


(و)

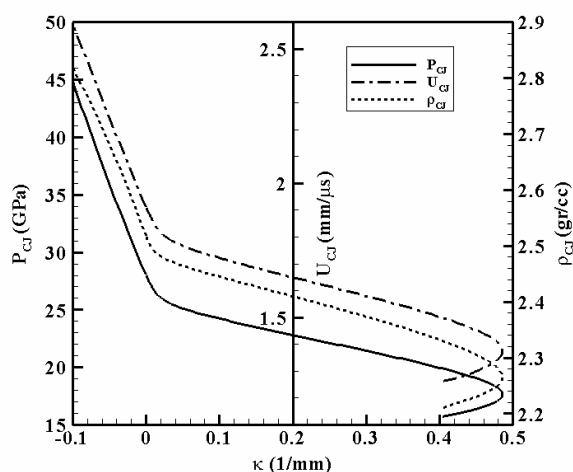


(ه)

شکل ۳- مقایسه‌ی اثر دو قاعده مخلوط، ۱- فرض تعادل دمایی (EQB) ۲- تساوی حجم‌های ویژه (non-EQB) بر توزیع خواص در ناحیه‌ی واکنش تراک با انحنای صفر (ZND تخت) شامل حجم ویژه (الف)، دما (ب)، نرخ واکنش (ج)، فشار (د)، اندازه فاصله از شوک (ه) و سرعت ذره در دستگاه ساکن (و).



شکل ۴- نمودار D-κ برای ماده شدیدالانفجار PBX-9502 به دست آمده بر مبنای دو قاعده مخلوط ۱- تعادل دمایی (EQB) ۲- تساوی حجم‌های ویژه (non-EQB) در مقایسه با نتایج تجربی و محاسباتی ارائه شده توسط وسکات [۱۲].



شکل ۵- نمودار تاثیر انحنای تراک بر فشار، چگالی و سرعت ذره در دستگاه ساکن در مکان صوتی با در نظر گرفتن قاعده مخلوط EQB برای PBX-9502.

۱۰- نتیجه گیری

شوک پیشرو و مکان صوتی، تاثیر انحنای جبهه بر انتشار تراک و خواص جریان در مکان صوتی مورد بررسی قرار گرفت. این کار برای تراک واگرا و همگرا صورت پذیرفت. مشاهده شد که نمودار D-κ مبتنی بر قانون مخلوط با فرض عدم تساوی حجم‌های ویژه و فرض تعادل دمایی و فشاری همخوانی خوبی با نتایج وسکات و داده های تجربی دارد. اما در صورتی که از فرض تساوی حجم‌های ویژه و عدم تعادل دما استفاده شود، در قسمت واگرایی نمودار اختلاف قابل ملاحظه ای ایجاد خواهد شد. بنابراین بر خلاف تراک

در این مقاله برای مواد شدیدالانفجار با معادله حالت و نرخ سوزش به یک شکل کلی، ابتدا تاثیر فرم قاعده مخلوط بر ساختار تراک با انحنای صفر (تراک ZND تخت) مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان دادند که فرم قاعده مخلوط بر توزیع خواص مکانیکی مانند فشار، سرعت و حجم ویژه کل مخلوط در ناحیهی واکنش تاثیر ناچیز و بر خواص حرارتی تاثیر قابل توجهی دارد. سپس، با استفاده از تئوری DSD با حل قسمتی از ناحیهی واکنش، بین

$$e_p(p, V) = e_p^s(V) + \frac{V}{\Gamma_p(V)} (p - p_p^s(V)) \quad (\text{الف-1})$$

در این رابطه، بالانویس s نشانگر خصوصیات روی آیزنتروپ مرجع می‌باشد. در اینجا، آیزنتروپ مرجع آیزنتروپی در نظر گرفته می‌شود که از شرایط چپمن-ژوگت (CJ) عبور می‌کند، $\Gamma_p(V)$ گامای گرونایزن¹ و زیرنویس p نشانگر پارامتر مربوط به معادله حالت محصولات تراک است. با تعریف $x = V/V_c$ ، فشار، انرژی مرجع و گامای گرونایزن به صورت زیر نوشته می‌شوند:

(الف-2)

$$p_p^s(V) = p_c \frac{\left[\frac{1}{2} x^n + \frac{1}{2} x^{-n} \right]^{a/n}}{x^{k+a}} \times \frac{k-1+F(V)}{k-1+a}$$

(الف-3)

$$e_p^s(V) = e_c \frac{\left[\frac{1}{2} x^n + \frac{1}{2} x^{-n} \right]^{a/n}}{x^{k-1+a}}, \quad F(V) = \frac{2a}{1+x^{2n}}$$

$$e_c = \frac{p_c V_c}{k-1+a} \quad (\text{الف-4})$$

$$\Gamma_p(V) = k-1 + (1-b)F(V) \quad (\text{الف-5})$$

برای محصولات، دما از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$T_p(e, V) = T_p^s(V) + \frac{e - e_p^s(V)}{C_v} \quad (\text{الف-6})$$

که در آن دما روی آیزنتروپ مرجع عبارت است از:

$$T_p^s(V) = T_c \frac{\left[\frac{1}{2} x^n + \frac{1}{2} x^{-n} \right]^{(a/n)(1-b)}}{x^{k-1+a(1-b)}} \quad (\text{الف-7})$$

$$T_c = \frac{2^{-ab/n}}{k-1+a} \times \frac{p_c V_c}{C_v} \quad (\text{الف-8})$$

1- Gruniesen gamma

یک بعدی تخت، در تحلیل تراک دو یا سه بعدی واگرا در مواد شدیدالانفجار فرم قاعده مخلوط مورد استفاده دارای اهمیت قابل توجهی است. نتایج نشان دادند که تاثیر قاعده مخلوط در تراک همگرا ناچیز است.

عدم دقت فرض تساوی حجم‌های ویژه در تراک واگرا این است که الگوریتم D-K به تحلیل دقیق ناحیه‌ی واکنش در مکان صوتی خیلی حساس است. مکان صوتی نیز در ناحیه ای قرار دارد که عمده واکنشها انجام شده است و در آن ذرات ماده منفجره خیلی کوچک می‌باشند. بنابراین در مکان صوتی شرط حدی تساوی دمای مواد اولیه و محصولات تراک حاکم می‌باشد. برای حالت تراک تخت و تراک همگرا کل واکنش در مکان صوتی به اتمام رسیده است لذا قاعده مخلوط تاثیر بر دقت نمودار D-K نخواهد داشت.

افزایش انحناء، (کاهش شعاع انحناء) در تراک واگرا موجب کاهش سرعت تراک و به دنبال آن کاهش فشار، چگالی و سرعت ذره در مکان صوتی می‌شود. با توجه به نتایج به دست آمده، در تراک واگرا اگر انحنای جبهه از یک انحنای بحرانی بیشتر شود، موج تراک میرا می‌شود. در تراک همگرا کاهش انحناء (کاهش اندازه شعاع انحنای تراک) موجب افزایش سریع در مقدار سرعت تراک و به دنبال آن فشار، چگالی و سرعت ذره در مکان صوتی می‌گردد.

۱۱- ضمیمه (الف)

در این ضمیمه فرم معادلات حالت واکنش‌گرها و محصولات تراک به همراه رابطه نرخ سوزش مورد استفاده در این مقاله بیان می‌گردد. همچنین ضرایب ثابت این معادلات برای ماده شدیدالانفجار PBX-9502 ارائه خواهد شد. علت اصلی استفاده از این فرمها در این مقاله، عدم دسترسی به مرجع دیگری است که همزمان معادلات حالت و نرخ سوزش مناسب مواد شدیدالانفجار به همراه نمودار D-K تجربی و محاسباتی در آن ارائه شده باشد. در صورت نیاز برای شناخت دقیق تر این فرمها پیشنهاد می‌شود که مراجع مربوطه مطالعه شوند.

۱۱-الف-۱- معادله حالت محصولات تراک

برای ماده شدیدالانفجار PBX-9502، از فرم کامل معادله حالت محصولات تراک مبتنی بر مطالعات دیویس [۲۴-۲۶] استفاده شده است. منظور از فرم کامل، فرمی است که در آن ارتباط دما نیز با سایر کمیتها مشخص شده است. در این معادله حالت یک رابطه خطی بین انرژی داخلی و فشار به شکل زیر در نظر گرفته می‌شود [۲۶]:

که در آن دمای واکنشگر روی آیزنتروپ مرجع عبارت است از:

$$T_r^s(V) = T_0 e^{-Zy} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-(\Gamma_r^0 + Z)} \quad (\text{الف-۱۴})$$

ثابت های معادله حالت واکنشگر PBX-9502 در جدول (الف-۲) ارائه شده اند.

جدول (الف-۱) - پارامترهای معادله حالت محصولات تراک PBX-9502 [۱۲].

p_c (GPa)	V_c (cm ³ /g)	A	k	N	b	C_v (J/kg K)
۱/۳۰۷	۰/۹۸۸۴	۰/۸۵۹۲	۱۳	۲/۵۲۱	۰/۵۸	۷۲۵

جدول (الف-۲) - پارامترهای معادله حالت واکنشگر PBX-9502 [۱۲].

E_0 (kJ/g)	V_0 (cm ³ /g)	A (mm/μs)	B	C
۳/۷۳۱	۰/۵۲۷۷	۱/۷۵	۵/۲	۰/۱
Γ_r^0	Z	C_V^0 (J/kg K)	α_{ST}	
۰/۸۱۶۸	۰/۳۰۹۳	۹۷۹	۰/۷۳۳۱	

۱۱-الف-۳- نرخ واکنش

وسکات و همکارانش [۱۲و۲۸] یک نرخ واکنش جدید ترکیبی پیشنهاد داده اند که دو پدیده آغازش با شاک و انتشار تراک را با یک دسته پارامتر مدل می نماید. نرخ واکنش پیشنهادی آنها دارای فرمی است که از مدل سوزش آغازش و رشد^۱ (I&G) الهام گرفته شده است. لازم به ذکر است که پارامترهای مورد استفاده برای مدل I&G زمانی که برای آغازش با شاک بکار می رود با زمانی که برای انتشار تراک استفاده می شود، تفاوت دارند [۳۲-۲۹]. علاوه بر این یک دسته پارامتر که بتوان با استفاده از آنها در محدوده وسیعی از شرایط، مواد شدیدالانفجار غیر ایده آل (همانند مواد مبتنی بر TATB) را مدل نمود، در دسترس نمی باشد. رابطه پیشنهادی مراجع [۱۲و۲۸] برای نرخ واکنش به صورت زیر است:

$$r = r_I S_I(\lambda) + r_G S_G(\lambda) + (1 - S_G(\lambda)) r_B \quad (\text{الف-۱۵})$$

۱- Ignition and Growth

در روابط فوق C_v گرمای ویژه محصولات تراک در فشار ثابت است. کمیت های p_c و a ، b ، k ، V_c ، n مقادیر ثابت هستند که برای ترکیب شدیدالانفجار PBX-9502 در جدول (الف-۱) آمده اند.

۱۱-الف-۲- معادله حالت واکنشگرها

معادله حالتی که در اینجا برای PBX-9502 نسوخته استفاده می شود، یک معادله حالت کامل است که اولین بار توسط دیویس [۲۷] ارائه شد. سپس استوارت و همکاران [۱۳] تعریف آیزنتروپ مرجع آن را به نحوی اصلاح کردند که امکان کالیبراسیون آن در فشار بالا فراهم شود. در این معادله حالت انرژی داخلی $e_r(p, V)$ به صورت زیر محاسبه می شود:

$$e_r(p, V) = e_r^s(V) + \frac{V}{\Gamma_r(V)} (p - p_r^s(V)) \quad (\text{الف-۹})$$

فشار روی آیزنتروپ مرجع توسط استوارت و همکاران به شکل زیر پیشنهاد شده است:

(الف-۱۰)

$$p_r^s(V) = \hat{p} \left[\sum_{j=1}^3 \frac{(4By)^j}{j!} + C \frac{(4By)^4}{4!} + \frac{y^2}{(1-y)^4} \right]$$

در این رابطه $y = 1 - V/V_0$ و $\hat{p} = \rho_0 A^2 / 4B$ می باشند. زیرنویس r نشانگر واکنشگرهای تراک است. کمیت های A و B با استفاده از داده های تجربی هوگونیوت شاک به دست می آیند. کمیت V_0 نشانگر حجم ویژه اولیه واکنشگر است. ثابت C برای کالیبراسیون معادله حالت واکنشگر در $V \ll V_0$ به کار می رود. علاوه بر این:

$$e_r^s(V) = V_0 \int_0^y p_r^s(\bar{y}) d\bar{y} + E_0 \quad (\text{الف-۱۱})$$

$$\Gamma_r(y) = \Gamma_r^0 + Zy \quad (\text{الف-۱۲})$$

دمای واکنشگر $T_r(e, V)$ از رابطه (الف-۱۳) به دست می آید:

(الف-۱۳)

$$T_r(e, V) = T_r^s(V) \left\{ \frac{1 + \alpha_{ST}}{C_V^0 T_r^s(V)} (e - e_r^s(V)) + 1 \right\}^{1/(1 + \alpha_{ST})}$$

۱۲- فهرست علائم

a	کمیت ثابت در معادله حالت محصولات و همچنین کمیت ثابت در رابطه نرخ واکنش
A	کمیت ثابت در معادله حالت واکنشگرها
b	کمیت ثابت در معادله حالت محصولات
B	کمیت ثابت در معادله حالت واکنشگرها
c	سرعت صوت
C	کمیت ثابت در معادله حالت واکنشگرها
C _v	کمیت ثابت در معادله حالت محصولات
D, D _n	سرعت تراک در راستای عمود بر جبهه
e	انرژی داخلی
e _c	ثابت انرژی داخلی
E ₀	گرمای تراک بر واحد جرم
H	انتالپی مخصوص
k	کمیت ثابت در معادله حالت محصولات
k _I , k _{IG} , k _{DG} , k _B	کمیت‌های ثابت در رابطه نرخ سوزش
M	شار جرمی
n	فاصله از شوک که به سمت واکنشگرها مثبت است و همچنین کمیت ثابت در معادله حالت محصولات
P	شار مومنتم
p	فشار
p _c	ثابت فشار
r	نرخ سوزش
s	متغیری که طبق رابطه (۱۹) تعریف می‌شود.
T	دما
U	سرعت ذره در دستگاه چسبیده به شوک
u	سرعت ذره در دستگاه ساکن (دستگاه آزمایشگاه)
V	حجم ویژه
V _c	ثابت حجم ویژه
x	نسبت حجم ویژه به ثابت حجم ویژه در معادله حالت محصولات تراک
y	برابر با 1-V/V ₀ در معادله حالت واکنشگرها
Z	کمیت ثابت در معادله حالت واکنشگرها

$$r_G = \{r_{IG} W(\rho_{SH}) + r_{DG} (1 - W(\rho_{SH}))\} \quad (\text{الف-۱۶})$$

$$r_I = k_I \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^7 (1 - \lambda)^{2/3} H \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right) \quad (\text{الف-۱۷})$$

$$r_{IG} = k_{IG} \left(\frac{P}{P_{CJ}} \right)^{4.5} \lambda^{1/3} (1 - \lambda) \quad (\text{الف-۱۸})$$

$$r_{DG} = k_{DG} \left(\frac{P}{P_{CJ}} \right)^2 \lambda^{1/3} (1 - \lambda) \quad (\text{الف-۱۹})$$

$$r_B = k_B \left(\frac{P}{P_{CJ}} \right) (1 - \lambda)^{1/2} \quad (\text{الف-۲۰})$$

$$S_I(\lambda) = \frac{1}{2} \{1 - \tanh[200(\lambda - 0.025)]\} \quad (\text{الف-۲۱})$$

$$S_G(\lambda) = \frac{1}{2} \{1 - \tanh[30(\lambda - 0.9)]\} \quad (\text{الف-۲۲})$$

$$W(\rho_{SH}) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \tanh \left[50 \left(\frac{\rho_{SH}}{\rho_c} - 1 \right) \right] \right\} \quad (\text{الف-۲۳})$$

ثابت‌های نرخ واکنش کالیبره شده برای PBX-9502 در جدول (الف-۳) آمده است.

لازم به ذکر است که برای چنین نرخ واکنشی به منظور رفع مشکل تکینگی معادلات حاکم، می‌توان از روابط (۲۳) و (۲۴) با در نظر گرفتن $v=1/2$ استفاده نمود.

جدول (الف-۳) - پارامترهای نرخ واکنش کالیبره شده برای PBX-9502 [۱۲].

k _I (μs ⁻¹)	k _{IG} (μs ⁻¹)	k _{DG} (μs ⁻¹)	k _B (μs ⁻¹)	a	ρ _c (g/cm ³)
۱۰۵	۲۹	۷۰	۰/۸۵	۰/۲۱۴	۲/۷۴

۱۳- علائم یونانی

- [5]. Von Neumann, J., "Theory of detonation waves", In: John Von Neumann, Collected Works, Vol. 6, Edited by: Taub, A. J., New York, Macmillan; pp. 1942.
- [6]. Döring, W., "Über den detonation svorgang in gasen", Annalen der Physik, Vol. 43, pp. 421-436, 1943.
- [7]. Aslam, T. D., Bdzil, J., B. Stewart, D. S., "Level set methods applied to modeling detonation shock dynamics", Journal of Computational Physics, Vol. 126, pp. 390-409, 1996.
- [8]. Wood, W. W., Kirkwood, J. G., "Diameter effect in condensed explosives. The relation between velocity and radius of curvature in the detonation wave", Journal of Chemical Physics, Vol. 22, pp. 1920-1924, 1954.
- [9]. Stewart, D. S., Bdzil, J. B., "The shock dynamics of stable multi-dimensional detonation", Combustion and Flame, Vol. 72, pp. 311-323, 1988.
- [10]. Yao, J., Stewart, D. S., "On the normal detonation shock velocity curvature relationship for materials with large activation energy", Combustion and Flame, Vol. 100, pp. 519-528, 1995.
- [11]. Stewart, D. S., Yao, J., "The normal detonation shock velocity-curvature relationship for materials with nonideal equation of state and multiple turning points", Combustion and Flame, Vol. 113, pp. 224-235, 1998.
- [12]. Wescott, B. L., "On detonation diffraction in condensed-phase explosives", PhD thesis, University of Illinois, Urbana-Champaign, 2005.
- [13]. Stewart, D. S., Yoo, S., Davis, W. C., "Equation of state for modeling the detonation reaction zone", Proceedings of the 12th International Detonation Symposium, San Diego, pp. 624-631, <http://www.intdetsymp.org/detsymp2002/PaperSubmit/FinalManuscript/pdf/Stewart-199.pdf>, 2002.
- [14]. Bdzil, J., "Lecture on: Detonation front models: Theories and methods", Los Alamos National Laboratory, 1999.
- [15]. Kasimov, A. R., Stewart, D. S., "Asymptotic theory of ignition and failure of self-sustained detonations", Theoretical and Applied Mechanics (TAM) Report No 1042, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2004.
- [16]. Stewart, D. S., Yao, J., Davis, W. C., "computation of shock acceleration effects on detonation shock dynamics for explosives discribed by general equation of state", Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 28, pp. 619-628, 2000.
- [17]. Klein, R., Stewart, D. S., "The relation between curvature, rate state-dependence and detonation velocity", Journal of Applied Mathematics, Vol. 53, pp. 1401-1435, 1993.
- κ انحناى تراک (مساوى با دو برابر معکوس شعاع انحناى متوسط موضعى جبهه تراک)
- λ پارامتر پیشرفت واکنش (کسر جرمى محصولات واکنش)
- ϕ پارامتر حرارتى (رابطه (۹))
- η پارامتر صوتى (رابطه (۸))
- v توان تقلیل در رابطه نرخ واکنش
- ρ چگالی
- ρ_c کمیت ثابت در رابطه نرخ واکنش
- α_{ST} کمیت ثابت در معادله حالت واکنشگرها
- Γ_r^0 کمیت ثابت در معادله حالت واکنشگرها
- Γ گامای گرونایزن
- ψ نسبت حجم‌های ویژه واکنشگرها و محصولات واکنش

۱۴- زیرنویس

- * شرایط در مکان صوتی
- 0 شرایط اولیه ماده منفجره
- CJ چپمن-ژوگت
- P محصولات واکنش
- r واکنشگرها

۱۵- بالانویس

- s خصوصیات روی آیزنتروپ مرجع

۱۶- مراجع

- [1]. Chapman, D. L., "On the rate of explosion in gases", Philosophical Magazine, Vol. 47, pp. 90-104, 1899.
- [2]. Jouguet, E., "M'ecanique des explosifs", Doin et Fils Eds, Paris, Vol. pp. 1917.
- [3]. Jouguet, E., "On the propagation of chemical reactions in gases", Journal de Mathématique Pures et Appliquées, Vol. 1, pp. 347-425, 1905.
- [4]. Zeldovich, Y. B., "On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems", Zhur Eksp Teor Fiz, Vol. 10, pp. 542-568, 1940.

- [18]. DeOliveira, G., Kapila, A. K., Schwendeman, D. W., Bdzil, J. B., Henshaw, W. D. and Tarver, C. M., "Detonation diffraction, dead zone and the ignition-and-growth model", 13th International Detonation Symposium, Norfolk VA United States, <http://www.intdetsymp.org/detsymp2006/downloadmanuscript.asp?PDFFile=IDS080-3.pdf>, 2006.
- [19]. Forest, C. A., "Burning and detonation", Proceedings of the 7th International detonation symposium, Annapolis, Maryland, pp. 234-243, 1981.
- [20]. Johnson, J. N., Tang, P. K., Forest, C. A., "Shock wave initiation of heterogeneous reactive solids", Journal of Applied Physics, Vol. 57, pp. 4323-4334, 1985.
- [21]. Lee, E. L., Tarver, C. M., "Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives", Physics of Fluids, Vol. 23, pp. 2362-2372, 1980.
- [22]. Lee, J., "Detonation shock dynamics of composite energetic materials", PhD thesis, New Mexico Institute of Mining and Technology, Socorro, New Mexico, 1990.
- [23]. Partom, Y., "A void collapse model for shock initiation", Proceedings of the seventh symposium (International) on Detonation, Annapolis, Maryland, pp. 506-516, 1981.
- [24]. Davis, W. C., "Equation of state for detonation products", Proceedings of the 8th Symposium (International) on Detonation, pp. 785-795, 1985.
- [25]. Davis, W. C., "Equation of state for detonation products", Proceedings of the 10th International Detonation Symposium, pp. 369-376, 1993.
- [26]. Davis, W. C., "Equation of state for detonation products", Proceedings of the 11th International Detonation Symposium, pp. 303-308, 1998.
- [27]. Davis, W. C., "Complete equation of state for unreacted solid explosive", Combustion and Flame, Vol. 120, pp. 399-403, 2000.
- [28]. Wescott, B. L., Stewart, D. S., Davis, W. C., "Equation of state and reaction rate for condensed-phase explosives", Journal of Applied Physics, Vol. 98, pp. 053514, 2005.
- [29]. Gustavsen, R. L., Sheffield, S. A., Alcon, R. R., Forbes, J. W., Tarver, C. M., Garcia, F., "Embedded electromagnetic gauge measurements and modeling of shock initiation in the TATB based explosives LX-17 and PBX 9502", Shock Compression of Condensed Matter, Atlanta, Georgia (USA), AIP Press, New York, pp. 1019-1022, <http://link.aip.org/link/?APC/620/1019/1>, 2001.
- [30]. Souers, P. C., Garza, R., Vitello, P., "Ignition & growth and JWL++ detonation models in coarse zones", Propellants, Explosives, Pyrotechnics, Vol. 27, pp. 62-71, 2002.
- [31]. Tarver, C., McGuire, E., "Reactive flow modeling of the interaction of TATB detonation waves with inert materials", Proceedings of the 12th International Detonation Symposium San Diego, pp. 641-649, <http://www.sainc.com/onr/detsymp/PaperSubmit/FinalManuscript/pdf/Tarver-069.pdf>, 2002.
- [32]. Tarver, C. M., Kury, J. W., Breithaupt, R. D., "Detonation waves in triaminotrinitrobenzene", Journal of Applied Physics, Vol. 82, pp. 3771-3782, 1997.