

مطالعه انتشار تراک خمیده با استفاده از تئوری DSD و روش Level set در مواد شدید الانفجار و مخلوط‌های گازی

امیر منصوری¹، کیومرث مظاهری^{2*}، حسین سوری³
تهران - دانشگاه تربیت مدرس - بخش مهندسی مکانیک
(تاریخ وصول: 89/12/16، تاریخ پذیرش: 90/3/3)

چکیده

در این مقاله با استفاده از ترکیب تئوری DSD و روش Level set جبهه تراک تعقیب شده است. نخست، با استفاده از یک کد DSD و نیز از طریق مراجع، روابط $D - \kappa$ و $\dot{D} - D - \kappa$ برای مواد شدیدالانفجار و مخلوط‌های گازی به دست آمده است و سپس با استفاده از روش Level set، جبهه تراک در هندسه‌های مختلف تعقیب شده است. برای مواد شدیدالانفجار که در آن‌ها انحنا نقش مهمی را در دینامیک جبهه تراک دارد، همخوانی خوبی بین نتایج تئوری DSD و حل کامل عددی وجود داشت، در حالی که این مطلب برای مخلوط‌های گازی صادق نبود. به منظور مطالعه قطر بحرانی و با کمک تئوری DSD و روش Level set، مسئله عبور ناگهانی جبهه تراک از یک کانال به یک فضای نامحدود مورد بررسی قرار گرفت. بدین منظور یک معیار خاموشی تراک بر مبنای انحنای بحرانی مورد استفاده قرار گرفت. اختلاف قابل توجهی بین قطر بحرانی مخلوط‌های گازی که با تئوری DSD پیش‌بینی شده بود و نتایج تجربی به دست آمده وجود داشت. نتایج نشان داد که قطر بحرانی مخلوط‌های گازی که در دینامیک جبهه تراک آن‌ها ناپایایی و سینتیک شیمیایی مهمتر از انحنا هستند، اغلب اوقات کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: تعقیب جبهه تراک، روش Level set، تئوری DSD، قطر بحرانی.

1- مقدمه

شاک، بر مبنای دو فرض انحنا کم جبهه (در مقایسه با طول ناحیه واکنش) و تغییرات آهسته زمانی (در مقایسه با زمان عبور ذره از ناحیه واکنش) ساده سازی می‌شوند. سپس با حل معادلات حاصل در ناحیه واکنش مابین شاک پیشرو و مکان صوتی، روابطی برای بیان تأثیر انحنای جبهه بر دینامیک تراک بدست می‌آید. این روابط به نام روابط $D - \kappa$ معروفند [1]. یاو و استوارت⁵ اثر شتاب جبهه تراک \dot{D} را بر دینامیک تراک بررسی کردند [2] که این رابطه به نام $\dot{D} - D - \kappa$ شناخته می‌شود. از آنجایی که این تئوری به تنهایی قادر به تعیین شکل و موقعیت جبهه تراک

تراک یک موج احتراقی است که با سرعت مافوق صوت حرکت می‌کند و جبهه آن را یک موج شاک بسیار قوی تشکیل می‌دهد. تعیین شکل، موقعیت و سرعت جبهه تراک در بین محققین از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در کنار روش‌های حل کامل عددی که هزینه محاسباتی بالایی دارند، استفاده از تئوری DSD⁴ که برای بیان دینامیک جبهه تراک تنها به تحلیل ناحیه بین شاک پیشرو و مکان صوتی اکتفا می‌کند، نیز مورد توجه قرار گرفته است [1]. در این روش معادلات بقای حاکم در دستگاه چسبیده به

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

4- DNS (Direct numerical simulation)

5- Yao and Stewart

1- دانشجوی کارشناسی ارشد

2- استاد تبدیل انرژی

3- دکتری مکانیک

DSD برای پیش بینی انتشار تراک در مواد شدیدالانفجار، برای بررسی تراک گازی نیز از تئوری DSD استفاده شده است. تحقیقات انجام شده نشان می‌دهند که تئوری DSD قادر است تا برخی از پارامترهای تراک گازی از جمله انرژی آغاز تراک را به خوبی پیش‌بینی کند [۹] و [۸]. در کار حاضر همچنین به تعقیب جبهه تراک گازی با استفاده از این تئوری و روابط $D - D - \kappa$ و $\dot{D} - D - \kappa$ پرداخته می‌شود. سپس از نتایج مربوط به تعقیب جبهه تراک گازی برای تعیین قطر بحرانی مخلوط‌های گازی مختلف استفاده خواهد شد. قطر بحرانی کوچکترین قطری می‌باشد که وقتی تراک تخت از یک لوله به محیط باز وارد می‌شود، بتواند در محیط باز به صورت تراک کروی منتشر شده و خاموش نگردد. تعیین قطر بحرانی از جنبه ایمنی در صنعت، بسیار پر اهمیت می‌باشد و علی‌رغم این که سال‌ها مورد توجه محققین بوده است، هنوز تئوری جامعی برای بیان آن وجود ندارد. در سال ۱۹۵۶، زلدویچ^۶ و همکارانش توانستند به وسیله عکس‌های تجربی نشان دهند که پس از عبور تراک از لوله به محیط باز تحت شرایطی تراک به شعله تبدیل می‌شود و تحت شرایط دیگری تراک به انتشار خود ادامه می‌دهد [۱۰]. پس از آن تلاش‌های بسیاری در جهت یافتن رابطه‌ای بین طول مشخصه‌های موجود در مسئله انبساط ناگهانی جبهه تراک و قطر بحرانی انجام گرفت. به طور مثال در سال ۱۹۶۵ میترونف و سولوخین^۷ دریافتند که قطر بحرانی مخلوط استوکیومتریک استیلن و اکسیژن حدود ۱۳ برابر اندازه سلول مشخصه^۸ آن است [۱۱].

ادوارد^۹ و همکارانش در سال ۱۹۸۱ صحت این نسبت را برای مخلوط‌های دارای هیدروژن نشان دادند [۱۲]. اما شرفرد^{۱۰} در سال ۱۹۸۶ و محققان دیگری، این نسبت را با توجه به نوع و درصد رقیق‌کننده در مخلوط بین ۴ تا ۳۰ بیان کردند [۱۳]. برخی دیگر از محققان قطر بحرانی را به ضخامت ناحیه واکنش یا مدت زمان معادل آن مرتبط ساختند. شولتز^{۱۱} و شرفرد نیز در سال ۲۰۰۰ با نوشتن معادلات بقای جرم، انرژی و مومنتوم در دستگاه چسبیده به شاک و ساده‌سازی آن یک رابطه تحلیلی برای پیش‌بینی قطر بحرانی ارائه نمودند [۱۴]. خطای نتایج این رابطه تحلیلی در مقایسه با نتایج تجربی در حدود یک مرتبه بزرگی است. در زمینه محاسبه قطر بحرانی با استفاده از تئوری DSD، تنها نتیجه منتشر شده مربوط به آرینتی می‌باشد.

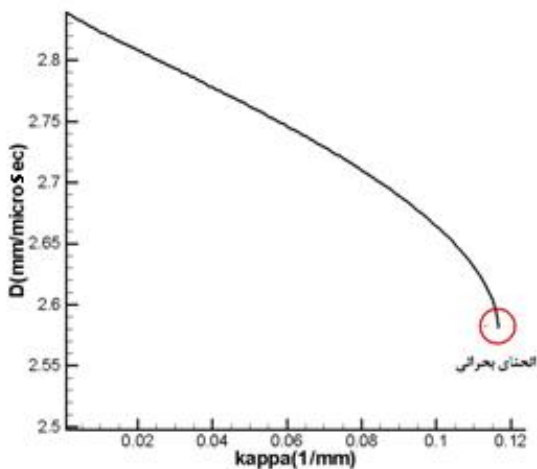
با گذشت زمان نمی‌باشد، برای تعیین شکل و موقعیت جبهه تراک در زمان‌های مختلف به یک الگوریتم تعقیب مرز (جبهه تراک) نیاز است. در میان روش‌های بسیاری که برای تعقیب مرز وجود دارند، روش Level set امکان محاسبه ساده‌تر موقعیت مرز در هندسه‌های پیچیده یا سه‌بعدی، و مدل‌سازی ادغام یا جدا شدن مرزها را به خوبی دارا می‌باشد. به همین دلیل در تحقیق حاضر از این روش برای تعقیب جبهه تراک استفاده شده است. این روش نخستین بار توسط اوشر^۱ به کار برده شد [۳] و تاکنون در ده‌ها مسئله مربوط به تعقیب مرز در سیالات تراکم‌پذیر و تراکم‌ناپذیر مورد استفاده قرار گرفته است. در زمینه تعقیب جبهه تراک، اسلام^۲ نخستین بار از روابط $D - D - \kappa$ و $\dot{D} - D - \kappa$ برای تعقیب جبهه تراک مواد شدیدالانفجار در کانال با مقطع ثابت، کانال همگرا و کانال واگرا استفاده نمود [۴]. در الگوریتمی که وی ارائه کرد، برای تعقیب جبهه تراک از روش Level set استفاده شده بود. یو^۳ و استوارت با استفاده از روش Level set الگوریتم دیگری را برای تعقیب جبهه تراک ارائه نمودند [۵]. مزیت این الگوریتم این است که قادر است جبهه تراک را در هندسه‌های سه‌بعدی و پیچیده و با زمان محاسباتی کمتری نسبت به الگوریتم‌های پیشین تعقیب کند. در سال ۲۰۰۵، وسکات^۴ از تعقیب جبهه تراک به روش Level set برای بررسی انبساط ناگهانی تراک مواد شدیدالانفجار هنگام عبور از یک گوشه استفاده کرد [۶]. وی دریافت که تعقیب جبهه تراک در ماده شدیدالانفجار PBX-9502 در هنگام عبور از یک گوشه با استفاده از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ نسبت به رابطه $D - D - \kappa$ نتایج نزدیک‌تری به حل کامل عددی به دست می‌دهد. لامبرت و همکارانش^۵ به مقایسه بین نتایج تعقیب جبهه تراک ماده شدیدالانفجار PBX-9501 هنگام عبور از روی یک دیسک سربی، با نتایج تجربی پرداختند [۷]. در این مسئله طیف گسترده‌ای از سرعت عمودی جبهه تراک نسبت به سرعت CJ ایجاد می‌شود و امکان بررسی مدل DSD در سرعت‌های متفاوت را فراهم می‌آورد. نتایج انطباق قابل قبول بین مدل DSD و نتایج تجربی را نشان داد. همچنین، نتایج نشان داد که شتاب جبهه تراک در نواحی‌ای که تغییر شدید جهت جریان (انبساط یا انقباض ناگهانی) وجود دارد، نقش مهمی پیدا می‌کند. این پدیده در کار حاضر با استفاده از روابط $D - D - \kappa$ و $\dot{D} - D - \kappa$ بررسی خواهد شد. علاوه بر استفاده از تئوری

6- Zeldovich
7- Mitrofanov and Soloukhin
8- Detonation Cell Width
9- Edward
10- Shepherd
11- Shultz

1- Osher
2- Aslam
3- Yoo
4- Wescott
5- Lambert

که معادله کلی Level set می‌باشد، قرار دهیم معادله (۲) به دست می‌آید. به عنوان مثال در شکل ۱ رابطه D-κ برای مخلوط استوکیومتریک هیدروژن و اکسیژن که با استفاده از تئوری DSD به دست آمده، نشان داده شده است.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \psi \cdot D(\kappa) = 0 \quad (2)$$



شکل ۱- رابطه D-κ برای مخلوط استوکیومتریک هیدروژن و اکسیژن، با مکانیزم شیمیایی کونوف در دمای اولیه ۲۹۵ کلوین و فشار ۱ اتمسفر.

همان‌گونه که در شکل ۱ دیده می‌شود، با افزایش انحنای جبهه تراک سرعت حرکت تراک کاهش می‌یابد. این کاهش تا زمانی رخ می‌دهد، که انحنای جبهه تراک به یک انحنای بحرانی می‌رسد. انحنای بحرانی بدین معناست که با افزایش انحنای بیش از این مقدار بحرانی، امکان انتشار تراک وجود ندارد و موج تراک میرا می‌شود. در معادله (۲) جهت حرکت جبهه تراک به صورت عمود بر شاک و از محصولات حاصل از انفجار به سمت مواد نسوخته مثبت در نظر گرفته می‌شود. سرعت حرکت جبهه تراک را همان‌گونه که در رابطه زیر دیده می‌شود، می‌توان به صورت مجموع دو مولفه مماسی D_t و عمودی D_n نسبت به جبهه تراک بیان کرد:

$$\bar{D}(\kappa) = \bar{D}_n + \bar{D}_t \quad (3)$$

با قرار دادن رابطه (۳) در معادله (۲) نهایتاً معادله Level set مرتبط با رابطه D-κ به شکل زیر در می‌آید [۴].

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + D_n(\kappa) |\nabla \psi| = 0 \quad (4)$$

آرینتی^۱ در سال ۲۰۰۳ با مقایسه بین رابطه D-κ حاصل از تئوری مرتبه اول DSD و حل کامل عددی مسئله قطر بحرانی، دریافت که رابطه D-κ مربوط به تئوری DSD بر نتایج حل عددی مسئله برای تراک گازی منطبق نیست [۱۵]. وی دلیل اصلی این عدم تطابق را اهمیت سینتیک، حساسیت واکنش‌ها به پارامترهای ترمودینامیکی و غیر دائم بودن شدید پدیده‌های مرتبط با میرایی در حالت بحرانی در تراک گازی دانست، در حالی که تئوری مرتبه اول DSD که، منتج به رابطه D-κ می‌شود، از طرفی یک تئوری شبه پایا می‌باشد و از طرف دیگر انحنای جبهه دتونیشن را پدیده غالب در دینامیک تراک در نظر می‌گیرد. در تئوری مورد استفاده وی از سینتیک یک مرحله‌ای آرنیوسی استفاده شده بود. به نظر می‌رسد با توسعه تئوری DSD به مرتبه‌های بالاتر آن (که شامل جملات غیر پایا می‌باشند) و همچنین استفاده از سینتیک کامل که در مرجع [۹] صورت گرفته است بتوان پدیده قطر بحرانی را مورد بررسی دقیقتری قرار داد.

با مروری بر پیشینه تحقیقات در این زمینه این مطلب قابل درک است که علی‌رغم نتایج تجربی زیادی که برای قطر بحرانی مخلوط‌های مختلف وجود دارد و نتایج تحلیلی و شبیه‌سازی‌های عددی که در این زمینه انجام شده است، هنوز تئوری جامع و کاملی برای محاسبه قطر بحرانی وجود ندارد. در مقاله حاضر، علاوه بر بررسی انتشار تراک در مواد شدید انفجار، با استفاده از تئوری DSD (مرتبه اول و دوم) که برای سینتیک کامل توسعه داده شده است به همراه روش Level set، برای تعقیب جبهه تراک، مسئله قطر بحرانی تراک‌های گازی مورد بررسی مجدد قرار خواهد گرفت.

۲-۱- معادلات مربوط به تعقیب جبهه تراک با استفاده از

رابطه D-κ

در این بخش برای تعقیب جبهه تراک، معادله Level set متناسب با رابطه D-κ به دست آورده می‌شود. در روش Level set ابتدا برای کل میدان حل یک تابع ضمنی ψ به گونه‌ای تعریف می‌شود که روی مرز $\psi = 0$ ، داخل مرز $\psi < 0$ و خارج از مرز $\psi > 0$ باشد. معادله کلی Level set به شکل رابطه (۱) می‌باشد [۱۶].

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla \psi = 0 \quad (1)$$

اگر سرعت تراک متناسب با انحنای D(κ) یا همان رابطه D-κ را در رابطه (۱)

$$\psi_t + S(\psi_0)(|\bar{\nabla}\psi| - 1) = 0 \quad (7)$$

در معادله (۶)، $S(\psi)$ تابع علامت و τ زمان فرضی بین دو گام زمانی حل معادله Level set را نشان می‌دهد.

این دو معادله به منظور جلوگیری از گرادین‌های بسیار بزرگ یا کوچک تابع ψ در نزدیکی مرز حل می‌شوند. جزئیات بیشتر مربوط به این معادلات در مراجع [۴] و [۱۷] آمده است.

۴-۱- حل معادلات

همان‌طور که گفته شد، برای حل معادله Level set با استفاده از رابطه D- κ معادله (۴) و برای حل با استفاده از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ باید معادلات (۴)، (۵)، (۶) و (۷) حل شوند. در معادلات ذکر شده، ترم زمانی با تقریب رو به جلو اوایلر، یا با تقریب دقیق‌تر مرتبه دوم رونگ کوتا^۱ گسسته می‌شود. همچنین برای گسسته‌سازی جملات $\bar{\nabla}\psi$ و $\bar{\nabla}D_n$ از تقریب مرتبه دوم ENO استفاده شده است.

۵-۱- شرط مرزی

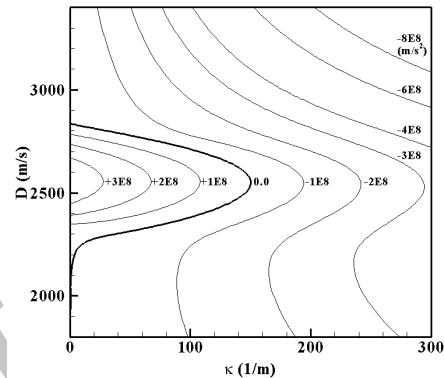
حل معادله Level set نیازمند تعریف شرایط مرزی می‌باشد. تعریف درست شرایط مرزی از این لحاظ حائز اهمیت است که برهم کنش بین جبهه تراک و دیواره اطراف آن را به حل مسئله وارد می‌کند. در واقع فشار بالای پشت جبهه تراک باعث می‌شود که دیواره لوله به سمت بیرون خمیده شود و تغییر شکل دهد. در اثر این تغییر شکل دیواره، یک موج انبساطی به سمت محصولات احتراق حرکت می‌کند. این موج انبساطی باعث کاهش دما و فشار در پشت جبهه تراک می‌شود. این امر سرعت جبهه تراک در کنار دیواره را به سرعتی کمتر از سرعت تراک CJ کاهش می‌دهد و باعث می‌شود که جبهه تراک از حالت تخت به صورت خمیده در آید.

یکی از فرض‌هایی که به دلیل سادگی در اکثر کدها و نرم‌افزارهای تجاری استفاده می‌شود فرض هایجن^۲ است که در آن جبهه تراک در همه‌جا حتی در کنار دیواره‌ها با سرعت ثابت CJ و در راستای عمود بر خودش حرکت می‌کند [۴]. بنابراین در فرض هایجن خمیدگی جبهه تراک در کنار دیواره‌ها و کاهش سرعت نسبت به سرعت تراک CJ پیش‌بینی نمی‌شود. این در حالی است که در تعقیب جبهه تراک با استفاده از تئوری DSD

۳-۱- معادلات مربوط به تعقیب جبهه تراک با استفاده از

رابطه $\dot{D} - D - \kappa$

همان‌گونه که پیشتر نیز ذکر شد، در رابطه D- κ از جمله شتاب جبهه تراک صرف نظر می‌شود. بدین منظور در این بخش برای بررسی اثرات ناپایا بودن پدیده تراک، به تعقیب جبهه تراک با استفاده از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ پرداخته می‌شود. در شکل ۲ رابطه بین شتاب و سرعت جبهه تراک مخلوط استوکیومتریک H_2-O_2 با انحنای آن، نشان داده شده است.



شکل ۲- کانتورهای $\dot{D}(D_n, \kappa)$ برای تراک واگرا در مخلوط استوکیومتریک H_2-O_2 (دمای $T_0=295$ K و فشار $P_0=1$ atm) [۹].

در این شکل منحنی تیره‌تر مربوط به $\dot{D} = 0$ می‌باشد، یا به عبارت دیگر این منحنی همان رابطه D- κ را نشان می‌دهد. در سمت راست آن منحنی‌های با شتاب منفی و در سمت چپ آن منحنی‌های با شتاب مثبت قرار دارند. معادله Level set که برای تعقیب جبهه تراک با استفاده از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ استفاده می‌شود، همان معادله (۴) می‌باشد، با این تفاوت که در این‌جا سرعت عمودی شاک D_n متغیر است. برای به دست آوردن تغییرات سرعت عمودی شاک D_n ، مشتق کلی آن به شکل رابطه (۵) نوشته می‌شود:

$$\frac{D(D_n)}{Dt} = \frac{\partial D_n}{\partial t} + D_n \hat{n} \cdot \nabla D_n = \dot{D}(D_n, \kappa) \quad (5)$$

معادلات (۴) و (۵) یک دستگاه معادلات غیرخطی تشکیل می‌دهند. یکی از معادلات تغییرات سرعت و دیگری تغییرات تابع Level set را با گذشت زمان نشان می‌دهد. علاوه بر این، معادلات (۶) و (۷) نیز باید حل شوند.

$$D_{n,\tau} = -S(\psi) \frac{\bar{\nabla}\psi}{|\bar{\nabla}\psi|} \cdot \bar{\nabla}D_n \quad (6)$$

1- Runge- Kutta
2- Huygen

۲- نتایج انتشار جبهه تراک در مواد شدیدالانفجار

۲-۱- مسئله پیشروی جبهه تراک در یک استوانه مواد

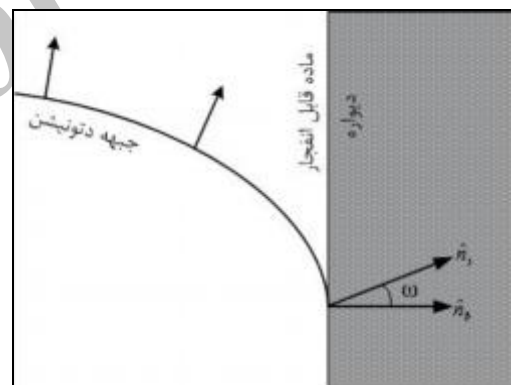
شدیدالانفجار

به منظور مطالعه دقت تئوری DSD در مقایسه با فرض هایجن نخست پیشروی جبهه تراک در یک استوانه مواد شدیدالانفجار^۳ بررسی می‌شود. در این مسئله یک جبهه تراک تخت در یک سمت لوله تشکیل می‌شود و به سمت دیگر آن حرکت می‌کند. ماده قابل انفجاری که در این مسئله مورد بررسی قرار گرفته است، دارای گرمای حاصل از انفجار $Q=4 \text{ kJ/gr}$ و نسبت گرمای ویژه $\gamma=3$ می‌باشد. شرایط اولیه نیز به صورت فشار $P_0=10^{-4} \text{ Gpa}$ ، چگالی $\rho_0=2 \text{ g/cc}$ و سرعت اولیه صفر است. ماده مورد استفاده در دیواره دارای چگالی $\rho=1/5 \text{ g/cc}$ و $\gamma=1/5$ است. سرعت تراک در این ماده منفجره $D_{CJ}=8 \text{ mm}/\mu\text{s}$ می‌باشد. در این مسئله فرض می‌شود که در ابتدای حل، یک پروفیل تخت ZND در فاصله ۵ میلی‌متری از ابتدای یک لوله به طول 200 mm و قطر 80 mm قرار دارد و سپس به سمت راست حرکت می‌کند. به دلیل تقارنی که در وسط لوله وجود دارد، در محور وسط لوله از شرط مرزی تقارن استفاده می‌شود. در شکل ۵ موقعیت جبهه تراک که با استفاده از حل کامل عددی [۴]، فرض هایجن و رابطه D-K به دست آمده، با یکدیگر مقایسه شده است. در فرض هایجن جبهه تراک تنها با سرعت ثابت CJ و در راستای عمود بر خودش حرکت می‌کند [۴].

همان گونه که در شکل ۴ نیز نشان داده شده است، تعقیب جبهه تراک با استفاده از رابطه D-K تطبیق بسیار خوبی با نتایج حاصل از حل کامل عددی دارد. این نتایج نشان می‌دهند که رابطه D-K شکل جبهه تراک را به خوبی پیش‌بینی می‌کند، اما در مقایسه با حل کامل عددی، همیشه مقداری عقب‌تر قرار می‌گیرد و یا به عبارت دیگر دچار تأخیر می‌شود. جبهه تراکی که با استفاده از رابطه D-K تعقیب می‌شود، سریع‌تر به حالت پایا می‌رسد و اثر کاهش سرعت دیواره را سریع‌تر درک می‌کند. همچنین در شکل ۵، این نکته نشان داده شده است که نتایج حاصل از تعقیب جبهه تراک با استفاده از فرض هایجن، قادر به پیش‌بینی دقیق شکل و سرعت جبهه تراک نمی‌باشد. فرض هایجن، سرعت جبهه تراک را حتی در کنار دیواره‌ها نیز برابر سرعت تراک CJ در نظر می‌گیرد. بنابراین همواره جلوتر از جبهه تراکی است که با استفاده از حل کامل عددی به دست می‌آید.

اصلاح زاویه بین جبهه تراک و دیواره اطراف آن پیش‌بینی خمیدگی جبهه تراک و کاهش سرعت آن قابل پیش‌بینی است.

بنابر مطالبی که گفته شد، شرایط مرزی برای حل معادله Level set می‌تواند به دو حالت تقسیم‌بندی شود. یک حالت مربوط به زمانی است که فضای اطراف تراک خالی است و هیچ‌گونه محدودیتی وجود ندارد، که اصطلاحاً فضای نامحصور^۱ گفته می‌شود. در این حالت فضای خالی اطراف هیچ تأثیری بر روی جبهه تراک ندارد و شرایط مرزی از یک برونمایی ساده به دست می‌آید. حالت دیگر مربوط به زمانی است که اطراف جبهه تراک، دیواره‌ای وجود داشته باشد که اصطلاحاً فضای محصور^۲ گفته می‌شود. وجود دیواره بر روی سرعت و شکل جبهه تراک اثر می‌گذارد. هدف از بررسی شرط مرزی در این حالت تعیین زاویه بین جبهه تراک و دیواره می‌باشد. این زاویه با ω نامیده نمایش داده می‌شود و همان‌گونه که در شکل ۳ نشان داده شده است زاویه میان بردار عمود بر شاک در محل تماس با دیواره، \vec{n}_s ، و بردار عمود بر دیواره در محل تماس، \vec{n}_b می‌باشد.

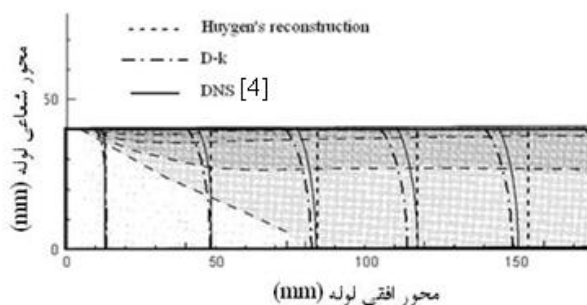


شکل ۳- چگونگی تعیین زاویه جبهه تراک و دیواره.

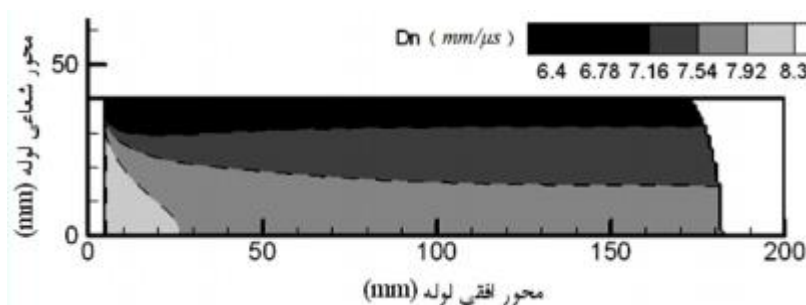
در تراک مواد شدیدالانفجار این زاویه که در واقع در اثر تغییر شکل دیواره ایجاد می‌شود، از آنالیز قطبی شاک برای هر جفت ماده شدیدالانفجار و دیواره خاص به دست می‌آید. اما در تراک گازی به دلیل کمتر بودن فشارها، دیواره تقریباً هیچ تغییر شکلی ندارد و مانند یک دیواره صلب عمل می‌کند. بدیهی است که در این حالت زاویه بین جبهه تراک و دیواره همواره ۹۰ درجه باقی می‌ماند. جزئیات مربوط به چگونگی اعمال شرط مرزی زاویه به معادله Level set، در مراجع [۴] و [۱۷] آمده است.

3- High Explosive

1- Unconfined
2- Confined



شکل ۴ - مقایسه بین مکان جبهه تراک در یک استوانه با استفاده از حل کامل عددی [۴]، فرض هایجن و رابطه $D-k$ در زمان‌های ۰.۱، ۰.۴، ۰.۹، ۱.۴، ۱.۸۶ و ۲.۳ میکرو ثانیه (μs).



شکل ۵ - کانتور مربوط به سرعت عمودی جبهه تراک ($mm/\mu s$) در لحظه عبور از هر نقطه در لوله.

دیواره لوله یک دیواره صلب فرض می‌شود، در نتیجه زاویه بین جبهه تراک و دیواره همواره برابر با 90° درجه باقی می‌ماند. به علت اینکه جبهه تراک در این مسئله از کنار یک گوشه 90° درجه می‌گذرد، جملات مربوط به شتاب جبهه تراک اهمیت بیشتری پیدا می‌کنند. به همین منظور علاوه بر نتایج رابطه $D-k$ و فرض هایجن، نتایج مربوط به تعقیب جبهه تراک با استفاده از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ نیز بررسی می‌شود. با توجه به شرایط مربوط به ماده شدیدالانفجار مذکور با استفاده از تئوری DSD رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ به شکل رابطه زیر به دست می‌آید [۴]:

(۸)

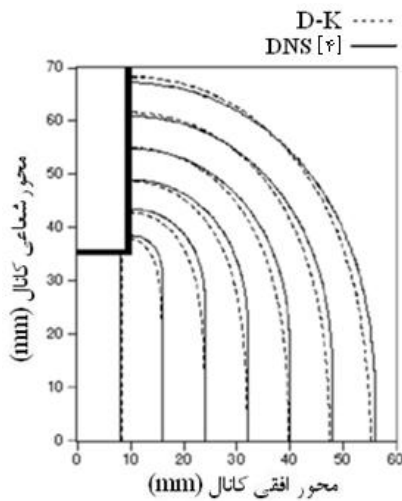
$$\dot{D}(D_n, \kappa) = -\frac{1}{2}D_n^2 + 3.832(\ln(8) - \ln(D_n))(1 + 0.145(8 - D_n))^{1/4}$$

شکل‌های ۶، ۷ و ۸ مقایسه بین نتایج فرض هایجن، رابطه $D-k$ و رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ با حل کامل عددی را نشان می‌دهند [۴]. همان‌طور که در این شکل‌ها دیده می‌شود، نتایج فرض هایجن با نتایج حل کامل عددی متفاوت است.

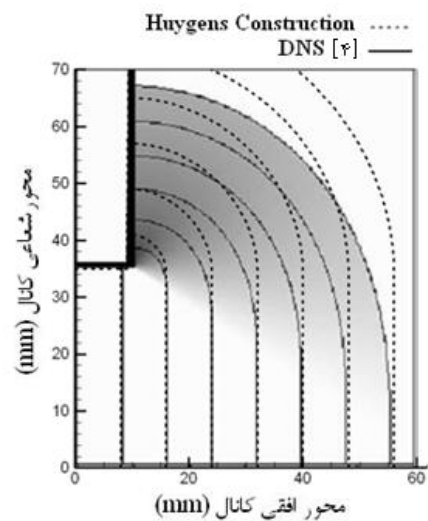
در شکل ۵ کانتور مربوط به سرعت عمودی جبهه تراک در لحظه عبور از هر نقطه نشان داده شده است. همان‌گونه که در این شکل نیز دیده می‌شود، کاهش سرعت تراک نسبت به تراک CJ از اطراف دیواره‌ها شروع می‌شود و زمانی که اثر دیواره به محور تقارن لوله می‌رسد، مسئله به یک حالت پایا می‌رسد و سرعت جبهه تراک دیگر تغییر نمی‌کند. زمانی که مسئله به حالت پایا می‌رسد، سرعت تراک در محور تقارن لوله برابر با $7/6 \text{ mm}/\mu s$ می‌شود. به دلیل پایا شدن مسئله، با پیشروی بیشتر جبهه تراک نیز این سرعت تغییری نخواهد کرد.

۲-۲- مسئله انبساط ناگهانی جبهه تراک مواد شدیدالانفجار

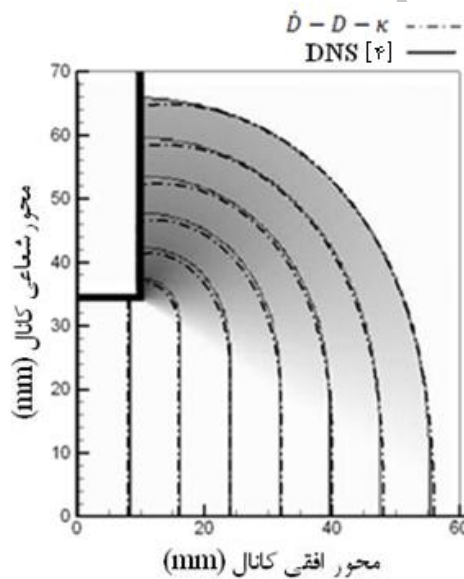
مسئله بعدی که مورد بررسی قرار می‌گیرد، مسئله انبساط ناگهانی جبهه تراک مواد شدیدالانفجار است. در نتایج به دست آمده برای این مسئله تمامی شرایط مربوط به ماده شدیدالانفجار مانند مسئله گذشته می‌باشد.



شکل ۷ - مقایسه بین نتایج رابطه $D-\kappa$ و حل کامل عددی.



شکل ۶ - مقایسه بین نتایج فرض هایجن و حل کامل عددی.



شکل ۸ - مقایسه بین نتایج رابطه $\dot{D}-D-\kappa$ و حل کامل عددی.

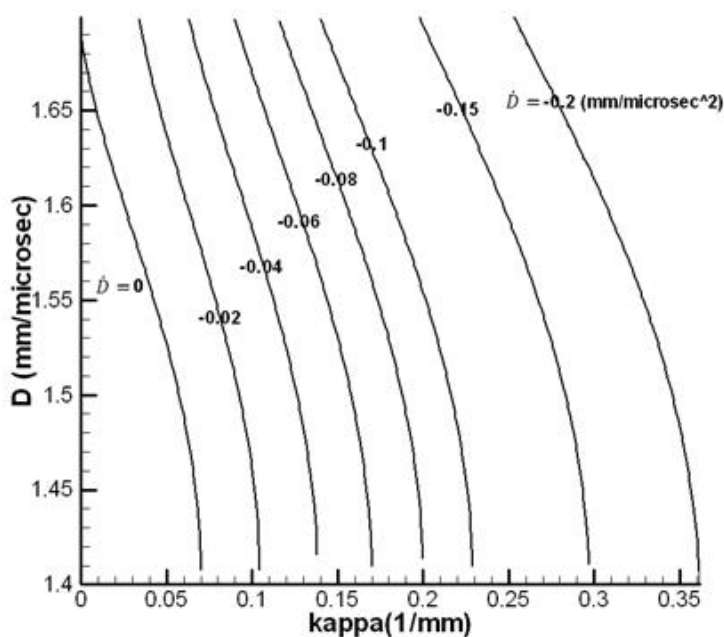
نخست با استفاده از یک کد DSD موجود رابطه $\dot{D}-D-\kappa$ برای این مخلوط در فشار اولیه یک اتمسفر استخراج شده که در شکل ۹ نشان داده شده است.

برای استفاده از نتایج مربوط به $\dot{D}-D-\kappa$ در کد مربوط به الگوریتم Level set باید یک تابع بر روی داده‌های این نتایج برازش نمود. برن^۱ فرم تابع زیر را برای بیان رابطه $\dot{D}-D-\kappa$ مربوط به مواد قابل انفجار مختلف پیشنهاد نمود [۱۸].

همچنین از مقایسه بین شکل های ۷ و ۸ مشاهده می‌شود که تطبیق میان نتایج رابطه $\dot{D}-D-\kappa$ و حل کامل عددی به دلیل در نظر گرفتن شتاب جبهه تراک نسبت به رابطه $D-\kappa$ بیشتر است.

۳- نتایج انتشار جبهه تراک گازی

برای بررسی تعقیب جبهه تراک یک مخلوط گازی، در اینجا نتایج مسئله انبساط ناگهانی جبهه تراک مخلوط گازی $2H_2+O_2+7Ar$ ارائه می‌شود.



شکل ۹- رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ برای مخلوط $2H_2 + O_2 + 7Ar$ در فشار اولیه یک اتمسفر.

مخلوط $2H_2 + O_2 + 7Ar$ هنگام عبور جبهه تراک از یک لوله به فضای آزاد به دست آمده است. همان‌گونه که در این شکل دیده می‌شود، با وجود این‌که این رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ کاهش سرعت جبهه تراک در کنار دیواره را بهتر از بقیه روابط مدل می‌کند ولی در کنار دیواره با نتایج تجربی همچنان اختلاف دارد.

$$\dot{D}(D_n, \kappa) = C^2(D_n)(-\kappa + F(D_n)) \quad (9)$$

پس از آن این فرم تابع برای بیان رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ از سوی محققان زیادی مورد استفاده قرار گرفت. مطابق با این فرم تابع و با استفاده از تئوری DSD برای مخلوط $2H_2 + O_2 + 7Ar$ ، تابع زیر به دست آمده است.

$$(10)$$

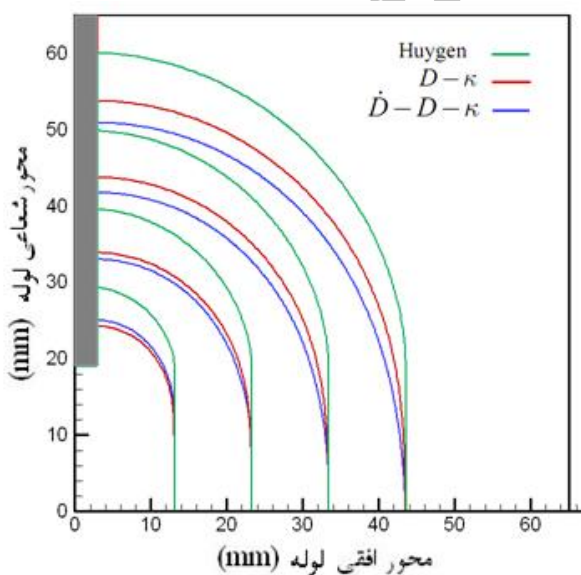
$$\dot{D}(D_n, \kappa) = -A(D_n^2)\kappa + B(\ln(\ln(D_n) - \ln(D_{CJ})))$$

$$D_{CJ} = 1.6909(\text{mm} / \mu\text{s})$$

$$A = 0.416638$$

$$B = -0.37764$$

موقعیت جبهه تراک در این مسئله با استفاده از فرض هایجن، روابط $D - \kappa$ و $\dot{D} - D - \kappa$ در شکل ۱۰ نشان داده شده است. به دلیل این‌که رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ اثرات شتاب جبهه تراک را نیز در نظر می‌گیرد، انتظار می‌رود که کاهش سرعت جبهه تراک در گوشه را بهتر از بقیه روابط نشان می‌دهد. به همین دلیل در شکل ۱۰ جبهه تراک حاصل از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ همواره در کنار دیواره به مقدار اندکی عقب‌تر از جبهه تراک حاصل از رابطه $D - \kappa$ قرار دارد. موقعیت جبهه تراک که با استفاده از رابطه $\dot{D} - D - \kappa$ به دست آمده است در شکل ۱۱ با نتایج تجربی [۱۹] مقایسه شده است. نتایج تجربی مرجع [۱۹] از آنالیز عکس‌های سایه نگاری



شکل ۱۰- مقایسه بین نتایج حاصل از فرض هایجن، رابطه $D - \kappa$ و

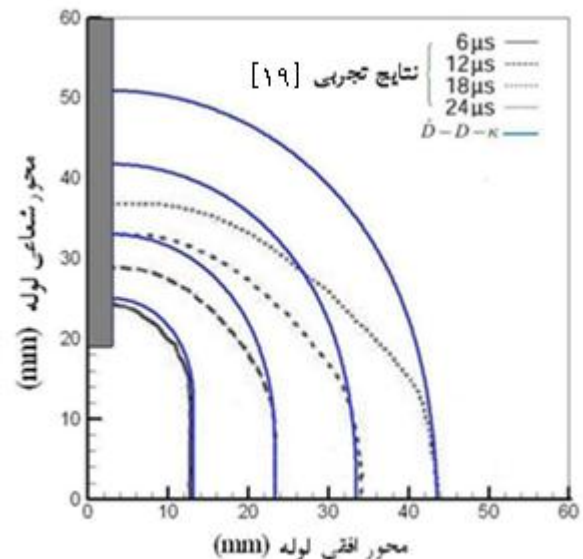
رابطه $\dot{D} - D - \kappa$.

مواد شدیدالانفجار نمی‌کند. لازم به ذکر است که اثراتی مانند لایه مرزی یا خروج جرم از دیواره‌ها می‌توانند باعث افزایش انحنا در تراک گازی و تأثیر بیشتر جمله مربوط به انحنا بشوند، اما در کار حاضر از این اثرات صرف‌نظر شده است.

۳-۱- محاسبه قطر بحرانی با استفاده از تئوری DSD

در این بخش با استفاده از نتایج حاصل از انتشار جبهه تراک مخلوط‌های مختلف، قطر بحرانی محاسبه و با نتایج تجربی مقایسه خواهد شد. برای این کار از معیار میرایی تراک که در تئوری DSD وجود دارد استفاده می‌شود. همان‌گونه که ذکر شد، در رابطه $D-K$ یک انحنا بحرانی وجود دارد که اگر انحنا جبهه تراک بیشتر از آن شود، تراک میرا می‌گردد. بنابراین، با تعقیب جبهه تراک (با استفاده از روش Level set) انحنا جبهه تراک در هر نقطه (از جمله نقطه‌ای که انحنا بحرانی را دارا می‌شود) بدست می‌آید. جبهه تراک تحت منتشر شده در لوله، پس از ورود به محیط آزاد، (در اثر انبساط‌های جانبی) از محل گوشه‌ها شروع به خمیده شدن می‌کند. بنابراین میرایی تراک از گوشه شروع می‌شود و به سمت محور لوله پیشروی می‌کند. در مشاهدات تجربی نیز دیده شده است [۱۴] که خاموشی‌های موضعی که در گوشه‌ها رخ می‌دهند لزوماً به خاموشی کلی تراک منجر نمی‌شوند. اما اگر این خاموشی‌های موضعی بتوانند به محور لوله رسیده و باعث خاموشی در آن ناحیه شوند، تراک به طور کلی میرا شده و یا آغازش‌های مجددی در این ناحیه رخ می‌دهد که ویژگی شرایط بحرانی می‌باشد. بنابراین برای یافتن قطر بحرانی، مکان هندسی نقاطی که دارای انحنا بحرانی می‌باشند رسم می‌شود. در شکل ۱۲ ناحیه خاموشی (مکان هندسی انحنا بحرانی) مخلوط H_2+O_2 رسم شده است. انحنا بحرانی مخلوط H_2+O_2 بر اساس تئوری DSD برابر 0.15 mm^{-1} می‌باشد. چون جبهه تراک از محل گوشه‌ها شروع به خمیده شدن می‌کند، انحنا جبهه تراک در کنار گوشه‌ها بیشتر است. بنابراین درون منحنی که در شکل ۱۲ در اطراف گوشه رسم شده است، انحنا بیشتر از انحنا بحرانی و در خارج از آن انحنا جبهه تراک کمتر از انحنا بحرانی می‌باشد. بر اساس مشاهدات تجربی که پیشتر ذکر شد، مقدار پیشروی ناحیه خاموشی به سمت محور لوله بیان‌کننده شعاع بحرانی مخلوط مورد نظر می‌باشد. به عنوان مثال در شکل ۱۲ ناحیه خاموشی مخلوط استوکیومتریک H_2+O_2 به اندازه ۳ mm به سمت محور لوله پیشروی نموده است. بنابراین قطر بحرانی

در محور لوله به دلیل اینکه سرعت تراک برابر با تراک CJ می‌باشد، اختلاف زیادی بین نتایج تجربی و نتایج رابطه $\dot{D} - D - K$ دیده نمی‌شود.



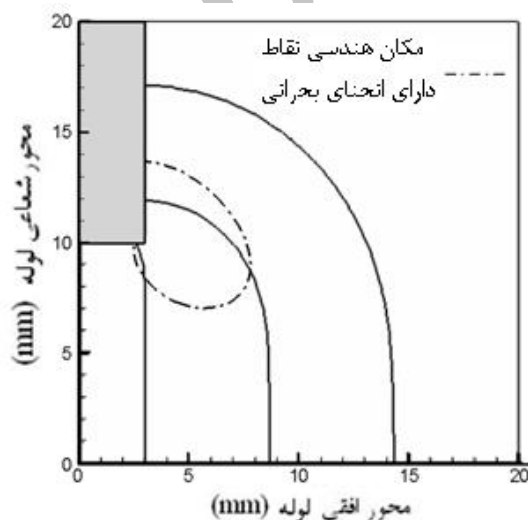
شکل ۱۱ - مقایسه بین نتایج تجربی [۱۹] و رابطه $\dot{D} - D - K$ برای مخلوط گازی $2H_2+O_2+7Ar$ در فشار اولیه یک اتمسفر.

با توجه به شکل‌های ۸ و ۱۱ دیده می‌شود که علی‌رغم انطباق خوبی که بین نتایج تعقیب جبهه مواد شدیدالانفجار با حل کامل عددی وجود دارد، نتایج تعقیب جبهه تراک گازی، گرچه تأثیر حرکت در گوشه‌ها را به خوبی پیش بینی می‌کند، از نظر کمی مطابقت خوبی با نتایج تجربی ندارند. علت این امر این است که در تراک مواد شدیدالانفجار، پارامتر انحنا، که از انبساط شدید جانبی ناشی می‌شود، نقش عمده‌ای در دینامیک جبهه تراک دارد. این در حالی است که در تراک گازی نشان داده شده است که جمله انحنا تأثیر به مراتب کمتری نسبت به اثرات سینتیک شیمیایی و جملات ناپایایی دارد [۱۵]. از آنجایی که روابط $D-K$ و $\dot{D} - D - K$ برای بیان دینامیک جبهه تراک بسیار به انحنا وابسته می‌باشند، بنابراین این روابط دینامیک جبهه تراک مواد شدیدالانفجار را بسیار بهتر از دینامیک تراک گازی بیان می‌کنند. از سوی دیگر با تقریب‌هایی که در تئوری DSD نسبت به حل کامل عددی وجود دارد، اثرات سینتیک شیمیایی و جملات ناپایایی در تراک گازی به خوبی در حل وارد نمی‌شوند. اما از آنجایی که نرخ سوزش در تراک مواد شدیدالانفجار بیشتر مکانیکی می‌باشد و کمتر به شرایط ترمودینامیکی وابسته است، این مطلب خطای زیادی وارد محاسبات تراک

در جدول ۱، نتایج تحقیق حاضر با نتایج تجربی مرجع [۲۰] مقایسه شده است. این جدول نشان می‌دهد که تطابق خوبی بین نتایج تحقیق حاضر و نتایج تجربی وجود ندارد و تئوری DSD در اکثر موارد قطر بحرانی را کمتر از مقدار تجربی پیش‌بینی نموده است. هر چند که محققانی ادعا کرده‌اند که با استفاده از انحنای بحرانی می‌توان آغاز مستقیم تراک را با دقت قابل قبولی پیش‌بینی نمود [۸ و ۹]، اما نتایج جدول ۱ نشان می‌دهد که معیار انحنای بحرانی، نمی‌تواند به خوبی رژیم بحرانی مسئله انبساط ناگهانی جبهه تراک را پیش‌بینی نماید. بنابر این به نظر می‌رسد، همانطور که در مراجع [۲۱] و [۱۷] نتیجه‌گیری شده است، انحنای بحرانی برای پیش‌بینی پارامترهای دینامیکی تراک گازی کفایت نمی‌کند. در جدول ۲ برای مخلوط هیدروژن و اکسیژن و مخلوط هیدروژن و هوا، قطر بحرانی محاسبه شده با روش تحلیلی مرجع [۱۴] نیز در کنار نتایج روش DSD و نتایج تجربی ارائه شده است.

مشاهده می‌شود که بین قطر بحرانی محاسبه شده با روش تحلیلی مرجع [۱۴] و نتایج تجربی نیز اختلاف عمده‌ای وجود دارد. قطر بحرانی محاسبه شده با این روش تحلیلی نیز همانند روش DSD در اکثر موارد حدود یک مرتبه بزرگی کوچکتر از قطر بحرانی تجربی می‌باشد. در شبیه‌سازی‌های کامل عددی که تا کنون برای این مسئله صورت گرفته به دلیل هزینه بالای محاسباتی سینتیک کامل شیمیایی مورد استفاده قرار نگرفته و امکان محاسبه قطر بحرانی مخلوط‌های گازی واقعی و مقایسه آن با نتایج تجربی وجود نداشته است.

مخلوط مذکور با استفاده از این روش ۶ mm می‌باشد. با توجه به مطالبی که ذکر شد و با استفاده از روابط $D-\kappa$ و $\dot{D}-D-\kappa$ قطر بحرانی برای چندین مخلوط گازی محاسبه و با نتایج تجربی مقایسه شده است. این نتایج در جدول ۱ آمده است. همان‌گونه که در این جدول دیده می‌شود، قطر بحرانی محاسبه شده با استفاده از رابطه $D-\kappa$ همواره از قطر بحرانی محاسبه شده با استفاده از رابطه $\dot{D}-D-\kappa$ بیشتر است. همچنین همان‌گونه که در نتایج موجود در این جدول مشهود است، با افزایش انحنای بحرانی، ناحیه خاموشی محاسبه شده با هر دو رابطه کوچکتر شده و قطر بحرانی محاسبه شده کاهش می‌یابد.



شکل ۱۲ - ناحیه خاموشی مخلوط H_2+O_2 بر اساس انحنای بحرانی جبهه تراک.

جدول ۱ - مقایسه بین قطر بحرانی محاسبه شده با تئوری DSD و نتایج تجربی [۲۰].

نوع مخلوط	نسبت هم ارزی	انحنای بحرانی (1/mm)	قطر بحرانی (mm)		
			$\dot{D}-D-\kappa$	D- κ	تجربی [۲۰]
CH_4+O_2	۰/۳	۰/۰۱	۴۰	۶۰	۵۱.۵
H_2+Air	۱	۰/۰۱۹	۲۸	۴۰	۱۹۸
$C_2H_4+O_2+49.78\%N_2$	۱	۰/۰۲	۲۲	۳۰	۵۰/۴۴
C_2H_2+Air	۰/۶۶۷	۰/۰۹	۶	۱۰	۸۱
H_2+O_2	۱	۰/۱۵	۴	۶	۲۰

جدول ۲ - مقایسه بین قطر بحرانی محاسبه شده با تئوری DSD و نتایج روش تحلیلی مرجع [۱۴].

نوع مخلوط	نسبت هم ارزی	قطر بحرانی (mm)		
		$\dot{D}-D-\kappa$	D- κ	تجربی [20]
H_2+Air	1	28	40	198
H_2+O_2	1	4	6	20

۴- نتیجه گیری

در این مقاله نتایج مربوط به تعقیب جبهه تراک با استفاده از روابط $D-k$ و $\dot{D}-D-k$ ارائه و بررسی شد. نتایج نشان داد که برای مواد شدیدالانفجار، نسبت به فرض ساده هایجن تطابق بهتری بین نتایج حل کامل عددی و تئوری DSD وجود دارد. با توجه به این که در کدهای موجود از فرض ساده هایجن استفاده می شود و این فرض انحناهای جبهه تراک و انبساط دیواره ها را پیش بینی نمی کند، این تئوری می تواند جایگزین خوبی برای فرض ساده هایجن باشد. همچنین نشان داده شد که رابطه $\dot{D}-D-k$ قادر است با دقت بیشتری نسبت به رابطه $D-k$ ، موقعیت جبهه تراک را پیش بینی کند.

نتایج مربوط به انتشار جبهه تراک در مخلوط های گازی با استفاده از روابط $D-k$ و $\dot{D}-D-k$ نشان می دهد که این تئوری ها به خوبی پدیده کاهش سرعت تراک در گوشه ها را، بر خلاف تئوری های قبلی، پیش بینی می کنند. در کار حاضر، همچنین، با استفاده از مفهوم انحناهای بحرانی، معیاری برای پیش بینی قطر بحرانی تراک گازی ارائه شد. نتایج نشان می دهند، تئوری DSD در مورد پارامتر دینامیکی قطر بحرانی، نسبت به مقادیر تجربی، حدود یک مرتبه بزرگی قطر کوچکتری را پیش بینی می کند. علت این امر این است که، بر خلاف مواد شدید الانفجار، همانطور که در مراجع [۱۵] و [۱۷] پیشنهاد شده است، انحناهای جبهه نقش اصلی را در دینامیک تراک گازی ندارد. دلیل دیگر این تفاوت ها، به تأثیر نقاط سه گانه و امواج عرضی در ساختار تراک واقعی سه بعدی بر می گردد. وقتی تراک وارد محیط بزرگتر می شود برخورد امواج عرضی و نقاط سه گانه با یکدیگر و با دیواره ها می تواند باعث آغازش مجدد گردد [۲۲]. با توجه به ماهیت شبه یک بعدی مورد استفاده در کار حاضر، این پدیده ها در این تحقیق منظور نشده اند.

مراجع

- [1]. Bdzil, J. D.; Stewart, D. S. "Modeling of Two-dimensional Detonation with Detonation Shock Dynamics."; *Physics of Fluids* 1989, 1, 1261-1267.
- [2]. Yao, J.; Stewart, D. S. "On the Dynamics of Multi-dimensional Detonation Waves."; *J. Fluid Mechanics* 1996, 309, 225-275.
- [3]. Osher, S.; Sethian, J. A. "Fronts Propagating with Curvature Dependent Speed."; *J. Comput. Phys.* 1988, 79, 12-49.
- [4]. Aslam, T. D. "Investigations on Detonation Shock Dynamics."; Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1996.
- [5]. Yoo, S. "Wave Tracking in Complex Geometries."; Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2003.
- [6]. Wescott, B. L. "On Detonation Diffraction in Condensed-Phase Explosives."; Ph.D thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2005.
- [7]. Lambert, D. E.; Stewart, D. S.; Yoo, S.; Wescott, B. L. "Experimental Validation of Detonation Shock Dynamics in Explosives."; *J. Fluid Mech.* 2006, 546, 227-253.
- [8]. Kasimov, A. R. "Theory of Instability and Nonlinear Evolution on Self-Sustained Detonation Waves."; Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2004.
- [9]. Souri, H.; Mazaheri, K. "Utilizing Unsteady Curved Detonation Analysis and Detailed Kinetics to Study the Direct Initiation of Detonation in H_2-O_2 ."; *Int. J. Hyd. Ener.* 2009, 34, 9847-9856.
- [10]. Zeldovich, I.; Kogarko, S. M.; Simonov, N. N. "An Experimental Investigation of Spherical Detonation in Gases."; *Soviet Phys. Tech.* 1956, 1, 1689-1713.
- [11]. Mitrofanov, V. V.; Soloukhin, R. I. "The Diffraction of Multifront Detonation Waves."; *Soviet Physics-Doklady* 1965, 9, 1055-1058.
- [12]. Edwards, D. H.; Thomas, G. O.; Nettleton, M. A. "Diffraction of a Planar Detonation in Various Fuel-oxygen Mixtures at an Area Change."; *Prog. in Astron. and Aeron.* 1981, 76, 341-357.
- [13]. Shepherd, J. E.; Moen, I. O.; Murray, S. B.; Thibault, P. A. "Analysis of the Cellular Structure of Detonations."; *Twenty-first Combustion symposium* 1986, 1649-1658.
- [14]. Schultz, E. "Detonation Diffraction Through an Abrupt Area Expansion."; Ph.D thesis, California Institute of Technology, 2000.
- [15]. Arienti M. "A Numerical and Analytical Study of Detonation Diffraction."; Ph.D. thesis, California Institute of Technology, 2003.
- [16]. Osher, S.; Fedkiw, R. "Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces."; Springer, 2003.
- [17]. منصوری، الف، "تعقیب جبهه تراک در شبیه سازی دوبعدی به روش Level set"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه تربیت مدرس، ۱۳۸۹.
- [18]. Stewart, D. S. "The Shock Dynamics of Multidimensional Condensed and Gas Phase Detonations."; *Twenty-seventh Symposium (International) on Combustion*, 1998, 2189-2205.
- [19]. Pintgen, F.; Shepherd, J. E. "Detonation Diffraction in Gases."; *Combustion and Flame* 2009, 15, 665-677.
- [20]. Kaneshige, M.; Shepherd, J. E. "Detonation Database."; *Explosion Dynamics Laboratory* 1999, Report FM97-8, California Institute of Technology Pasadena, 181-190.
- [21]. Eckett, C. A. "Numerical and Analytical Studies of the Dynamics of Gaseous Detonations."; Ph.D thesis, California Institute of Technology, 2001.
- [22]. Jones, D. A.; Kemister, G.; Oran, E. S.; Sichel, M. "The Influence of Cellular Structure on Detonation Transmission."; *Shock Waves* 1996, 6, 119-129.