

## محاسبه سرعت انتشار و خواص ناحیه واکنش برای دتونیشن خمیده

حسین سوری<sup>۱</sup> - کیومرث مظاهری<sup>۲</sup>

بخش مهندسی مکانیک - دانشکده فنی و مهندسی - دانشگاه تربیت مدرس  
kiumars@modares.ac.ir

### چکیده

در کار حاضر برای مواد منفجره معادلات اولر واکنشی در ناحیه واکنش مابین مکان صوتی و شاک پیشرو حل شده و رابطه‌ای بین سرعت انتشار دتونیشن (D) و خواص گازهای حاصل از آن با انحناى جبهه دتونیشن (K) بدست آمده است. این کار با استفاده از روشی که با نام "دینامیک شاک دتونیشن" (DSD ( Detonation Shock Dynamics) شناخته می‌شود، برای دتونیشن با انحناى کم و شبه پایا انجام شده است. مقایسه نتایج بدست آمده از این تحقیق با نتایج حل عددی مستقیم (DNS (Direct Numerical Solution) معادلات اولر واکنشی نشان می‌دهد که روش DSD برای دتونیشن با انحناى کم از دقت خیلی خوبی برخوردار می‌باشد. این تحلیل نشان می‌دهند که با افزایش انحنا، سرعت دتونیشن کم می‌شود و در حالت کلی منحنی D-K دارای دو نقطه بازگشت به شکل حرف Z می‌باشد که نقطه بازگشت بالایی مربوط به خاموشی و نقطه بازگشت پایینی مربوط به آغازش دتونیشن است.

واژه‌های کلیدی: دتونیشن - DSD - انحنا - چند بعدی - ناحیه واکنش - شدیدالانفجار

### 1- مقدمه

بطور کلی، یک موج دتونیشن از یک شاک پیشرو که یک ناحیه با واکنش شیمیایی آنرا دنبال می‌کند، تشکیل شده است. به نحوی که انرژی حاصل از واکنش شیمیایی از میرایی شاک جلوگیری می‌نماید. در ناحیه واکنش یک مکان هندسی وجود دارد که در آن سرعت حرکت ذرات نسبت به شاک پیشرو برابر سرعت صوت در همان مکان است. جریان در پایین دست این مکان صوتی، مافوق صوت است. لذا تنها قسمتی از ناحیه واکنش بر حرکت جبهه دتونیشن تاثیر خواهد داشت که مابین مکان صوتی و شاک پیشرو قرار داشته باشد. با تغییر انحناى جبهه دتونیشن، فاصله مکان صوتی تا شاک پیشرو تغییر کرده و لذا مقدار انرژی تاثیر گذار بر شاک پیشرو نیز تغییر می‌نماید.

مدل سازی دتونیشن از تئوری چپمن-ژوگت (Chapman-Jouguet) (CJ) [1-4]، که بیش از یکصد سال پیش ارائه شده است، آغاز شد. این تئوری یک موج دتونیشن ایده‌آل یک بعدی پایا را از نقطه نظر ترمودینامیکی مورد بررسی قرار می‌دهد. تئوری مذکور سرعت دتونیشن ایده‌آل  $D_{CJ}$  را بصورت 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 ناحیه واکنش موج دتونیشن ارائه نمی‌کند.

قدم بعدی در مدل سازی دتونیشن توسط زلدویچ (Zeldovich) [5]، ون نیومن (Von Neumann) [6]، و دورینگ (Döring) [7] برداشته شد که یک موج دتونیشن یک بعدی پایا با یک ناحیه واکنش با ضخامت محدود را مورد تحلیل قرار دادند. طبق مدل زلدویچ-نیومن-دورینگ (ZND)، آزاد شدن انرژی در پشت جبهه شاک شروع می‌شود و تا زمانی که یک تعادل

1- دانشجوی دکتری مکانیک - تبدیل انرژی

2- دانشیار مهندسی مکانیک

ترمودینامیکی ایجاد شود ادامه خواهد یافت. این نقطه تعادل در انتهای ناحیه واکنش، دارای خواص نقطه CJ در تئوری چپمن-ژوگت است. سرعت دتونیشن در مدل ZND برابر با  $D_{CJ}$  می‌باشد.

مدلهای CJ و ZND بر مبنای حل‌های دقیق برای موج دتونیشن پایای یک بعدی بنا شده‌اند. در صورتی که معادله حالت محصولات و انرژی آزاد شده در موج دتونیشن به درستی تعیین شده باشند، مقادیر محاسبه شده برای  $D_{CJ}$  توسط این مدل‌ها به متوسط سرعت‌های دتونیشنی که بصورت تجربی در آزمایش سیستم‌های با ابعاد بزرگ مشاهده می‌شود، خیلی نزدیک خواهد بود. معمولاً در این خصوص برای سیستم‌های گازی مشکلی وجود ندارد، اما برای مواد شدیدالانفجار که به معادله حالت پیچیده برای محصولات انفجار نیاز دارند مشکلات زیادی وجود دارد (برای مثال نمونه‌ای از مشکلات را در مراجع [8-12] می‌توان دید). علاوه بر این، ساختار ناحیه واکنش محاسبه شده توسط تئوری ZND برای مواد شدیدالانفجار ناهمگن، تنها در صورتی با داده‌های تجربی همخوانی خواهد داشت که از یک سینتیک آزاد شدن انرژی غیر آرنیوسی با ضرایب مناسب استفاده شده باشد.

وود و کرکود (Wood and Kirkwood) [13] مدل ZND را برای توصیف جریان محوری پشت یک جبهه شاک کروی پایا توسعه دادند. آنها معادلات بقای آنتگرالی را (مشابه روابط رانکین - هگونیوت (Rankine-Hugoniot relations)) برای چنین هندسه‌ای استخراج نمودند. همچنین رابطه بین نرخ آزاد شدن انرژی و واگرایی جریان را در نقطه صوتی بدست آوردند. مطابق مدل وود-کرکود، با افزایش انحنای جبهه، سرعت دتونیشن پایا بصورت خطی کاهش می‌یابد. قدم بعدی در توسعه مدل‌های دتونیشن پایای دو بعدی توسط بدزیل (Bdzil) [14 و 15] برداشته شد. او اولین بار ستون ماده منفجره را به روش مجانبی (Asymptotic method) مورد تحلیل قرار داد و سرعت محوری دتونیشن را بر حسب شعاع ستون، خواص ماده منفجره و خواص ماده در بر گیرنده ماده منفجره (Confinement material) بدست آورد.

استوارت (Stewart) و بدزیل [16] اولین بار با حل مجانبی ناحیه واکنش مابین شاک پیشرو و مکان صوتی، رابطه ذاتی (Intrinsic) بین سرعت عمودی شاک دتونیشن D و انحنای شاک پیشرو K را استخراج نمودند. آنها نشان دادند که این رابطه تنها به خواص ماده منفجره بستگی دارد. آنها این کار را با فرض انحنای کم جبهه دتونیشن و تغییر آهسته دینامیک شاک نسبت به مقیاس زمان عبور ذره از ناحیه واکنش انجام دادند. استوارت و بدزیل از روش بسط‌های مجانبی تطبیق یافته (Matched asymptotic expansion)، بمنظور تطبیق حل ساختار ناحیه واکنش در لایه نزدیک شاک (Near shock layer) با حل در ناحیه گذر صوتی (Transonic layer) نزدیک نقطه صوتی، استفاده کردند.

بدزیل و استوارت [17 و 18] برای اولین بار عبارت "دینامیک شاک دتونیشن" (DSD) را برای توصیف تئوری مجانبی مربوط به انحنای کم شاک و رشد آهسته زمانی و همچنین استفاده مهندسی از نتایج آن در سیستم‌های انفجاری بکار بردند. کلین (Klein) و استوارت [19] کار انجام شده توسط استوارت و بدزیل [16] را به منظور اعمال قوانین نرخ واکنش برای سینتیک آرنیوسی با انرژی تحریک (Activation energy) بالا توسعه دادند. استوارت و یائو (Yao) [20 و 21] با ترکیب حدهای مجانبی متمایز (Distinguished asymptotic limits) برای انرژی تحریک بالا و حل عددی، انحنای بحرانی را محاسبه کردند و نشان دادند که مواد منفجره با سینتیک آرنیوسی می‌توانند دارای یک رابطه شبه پایای سرعت - انحنای به شکل حرف Z باشند. حل‌های عددی مستقیم وابسته به زمان برای دتونیشن در مواد شدیدالانفجار بر مبنای معادلات اولر به علت هم مرتبه نبودن مقیاس طول در ناحیه واکنش و مابقی میدان، بسیار زمانبرند و لذا برای طراحی مهندسی سیستم‌های انفجاری مقرون به صرفه نیستند [22]. به همین دلیل مدل DSD در حال حاضر به علت کارایی خیلی خوب از نظر زمان حل، به عنوان یک جایگزین برای حل‌های عددی مستقیم در هندسه‌های پیچیده مورد استفاده قرار می‌گیرد.

با توجه به مزایایی که روش DSD نسبت به سایر روش‌ها دارد، در این مقاله از این روش برای مدل سازی دتونیشن استفاده می‌شود. در مراجعی که تاکنون در مورد آنها بحث شد، برای استخراج رابطه D-K عمدتاً از روش مجانبی استفاده شده است. این روش برای مواد منفجره‌ای که معادله حالت و نرخ سوزش پیچیده‌ای دارند، قابل توسعه نمی‌باشد. لذا در مقاله حاضر بجای اینکه از این روش برای حل معادلات حاکم در ناحیه بین شاک پیشرو و مکان صوتی استفاده شود، از روش عددی

شوتینگ برای این کار استفاده خواهد شد. به این ترتیب محدودیت در انتخاب فرم معادله حالت و نرخ سوزش از بین می‌رود. محصول نهایی این روش، روابطی است که بین سرعت انتشار دتونیشن و خواص جریان در مکان صوتی با انحنا جبهه دتونیشن بدست می‌آید.

## 2- معادلات حاکم ساده شده در دستگاه موج

همانطور که ذکر شد، از کل ناحیه واکنش، تنها قسمتی که مابین شاک پیشرو و مکان صوتی است، بر دینامیک جبهه دتونیشن تاثیر خواهد داشت. به همین دلیل در ادامه به حل معادلات حاکم، یعنی معادلات اولر واکنشی در این ناحیه پرداخته می‌شود.

فرم بی بعد معادلات اولر واکنشی در دستگاه متصل به شاک، با فرض انحنا کم جبهه شاک و جریان شبه پایا، به شکل ساده شده زیر در می‌آیند [23]:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial n} + \kappa \rho(U + D) = 0 \quad (1)$$

$$U \frac{\partial U}{\partial n} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial e}{\partial n} - \frac{p}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial n} = 0 \quad (3)$$

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

که در آنها  $\rho$  چگالی،  $U$  سرعت عمودی ذره سیال در دستگاه شاک،  $e$  انرژی داخلی مخصوص،  $D$  سرعت عمودی شاک، و  $\kappa$  انحنا سطح شاک می‌باشند.  $r$  نرخ واکنش و  $\lambda$  متغیر پیشرفت واکنش است که در موقعیت بلافاصله بعد از شاک برابر صفر و زمانی که واکنش تکمیل می‌شود، مساوی یک می‌باشد.  $n$  مختصات در راستای عمود بر شاک است که در جهت ماده نسوخته مثبت می‌باشد.

در اینجا کمیت‌های  $\tilde{D}_{CJ}$ ،  $\tilde{D}_{CJ}$ ،  $\tilde{\rho}_0$ ،  $\tilde{\rho}_0 \tilde{D}_{CJ}^2$  به ترتیب برای بی بعد سازی فشار، چگالی، سرعت و انرژی احتراق بکار رفته‌اند (علامت  $\sim$  برای بیان کمیت های بعددار بکار رفته است). مقیاس طول برابر با طول نیم-واکنش  $\tilde{L}_{1/2}$  در دتونیشن تخت پایای ZND (فاصله بین جبهه دتونیشن و جایی که  $\lambda = \frac{1}{2}$  می‌باشد) در نظر گرفته شده است. مقیاس زمان نیز نسبت مقیاس طول به مقیاس سرعت است. تحت این شرایط فرم بی بعد معادلات فوق یکسان خواهند بود.

معادلات حاکم مورد نیاز با مشخص کردن معادله حالت  $e = e(p, \rho, \lambda)$  و قانون نرخ سوزش  $r = r(p, \rho, \lambda)$  تکمیل می‌شوند. فرض می‌شود که معادله حالت پلی تروپیک و نرخ سوزش به شکل زیر می‌باشند:

$$e = e(p, \rho, \lambda) = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} - q\lambda \quad (5)$$

$$r = r(p, \rho, \lambda) = K(p, \rho)(1 - \lambda)^\nu \quad (6)$$

در دو معادله فوق،  $q$  گرمای ویژه واکنش،  $\gamma$  توان پلی تروپیک،  $K$  پیش ضریب نرخ سوزش و  $\nu$  توان تقلیل می‌باشند. برای گازها  $\gamma$  در محدوده  $1 < \gamma < \frac{5}{3}$  می‌باشد. با انتخاب  $\gamma > 2$  از فرم معادله حالت فوق برای مواد شدیدالانفجار نیز می‌توان استفاده کرد [19]. برای نرخ سوزش آرنیوسی  $K(p, \rho) = k \exp(\theta / c^2)$  است که در آن  $\theta = \gamma \tilde{E} / \tilde{D}_{CJ}^2$  انرژی تحریک،  $k = \tilde{k} \tilde{L}_{1/2} / \tilde{D}_{CJ}$  ثابت نرخ واکنش و  $c$  سرعت صوت بی بعد می‌باشند.

معادله بقای انرژی و مومنتم (معادلات (2) و (3)) و معادله حالت را می‌توان با هم ترکیب و سپس معادله حاصل را انتگرال گیری نمود. با انجام این کار و با اعمال فرضیات شاک قوی، معادله برنولی به فرم زیر بدست می‌آید که می‌توان از آن بجای معادله (3) استفاده کرد:

$$\frac{\gamma}{(\gamma-1)} \frac{p}{\rho} + \frac{U^2}{2} - q\lambda = \frac{D^2}{2} \quad (7)$$

در کار حاضر، با فرض اینکه حاصل ضرب انحنای شاک در طول نیم - واکنش (یعنی انحنای بی‌بعد) به اندازه کافی کوچک می‌باشد، یعنی:

$$\kappa = \tilde{\kappa} \times \tilde{L}_{1/2} \ll 1 \quad (8)$$

دتونیشن واگرا بررسی می‌شود.

از معادلات بقای جرم، مومنتم و انرژی می‌توان برای استخراج شرایط مرزی در شاک پیشرو استفاده کرد. این روابط که با نام روابط رانکین-هگونیوت شناخته می‌شوند، پس از اعمال تقریب شاک قوی به شکل زیر نوشته می‌شوند [21]:

$$\begin{aligned} \rho U &= -D \\ \rho U^2 + p &= D^2 \\ \frac{1}{2} U^2 + \frac{p}{\rho} + e(p, \rho, \lambda) &= \frac{1}{2} D^2 \\ \lambda &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

شرایط مرزی پشت شاک قوی بصورت تابعی صریح از D با استفاده از روابط رانکین-هگونیوت قابل محاسبه اند:

$$U_+ = -\frac{(\gamma-1)}{(\gamma+1)} D \quad (1-10)$$

$$\rho_+ = \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \quad (2-10)$$

$$p_+ = \frac{2}{\gamma+1} D^2 \quad (3-10)$$

$$\lambda_+ = 0 \quad (4-10)$$

در اینجا زیرنویس + نشانگر خواص جریان در پشت شاک پیشرو حاصل از روابط شاک قوی است. هدفی که در ادامه مقاله دنبال می‌شود، حل معادلات (1)، (2)، (7) و (4) با شرایط مرزی (10) می‌باشد. اما در شرایط مرزی فوق، مقدار سرعت انتشار جبهه دتونیشن D از ابتدا معلوم نیست.

### 3- روش تعیین طول نیم-واکنش در مدل ZND

سرعت انتشار دتونیشن در مدل ZND برابر سرعت دتونیشن چپمن - ژوگت  $D_{CJ}$  در نظر گرفته می‌شود. در تقریب شاک قوی، برای  $D_{CJ}$  رابطه زیر بدست می‌آید:

$$D_{CJ}^2 = 2q(\gamma^2 - 1) \quad (11)$$

می‌توان نشان داد که برای معادله حالت پلی تروپیک، توزیع خواص در ناحیه واکنش طبق تئوری دتونیشن ZND بصورت زیر است [23]:

$$U_* = -\frac{\gamma - \sqrt{1-\lambda}}{\gamma+1} D_{CJ} \quad (12)$$

$$\rho_* = \frac{\gamma+1}{\gamma - \sqrt{1-\lambda}} \quad (13)$$

$$p_* = \frac{1 + \sqrt{1-\lambda}}{\gamma+1} D_{CJ}^2 \quad (14)$$

در اینجا از زیرنویس \* برای نشان دادن توزیع خصوصیات در ناحیه واکنش استفاده شده است. مشاهده می‌شود این خواص همگی تابعی از  $\lambda$  می‌باشند. در این روابط پارامتر  $\lambda$  در واقع نقش متغیر مستقل را بجای  $n$  یعنی مختصات در راستای عمود بر شاک ایفا می‌کند.

برای مشخص کردن ساختار دتونیشن ZND، نیاز به انتگرال گیری رابطه نرخ واکنش (معادله (4)) است. بدین منظور رابطه نرخ واکنش را می‌توان بصورت زیر بازنویسی کرد:

$$\frac{d\lambda}{dn} = \frac{r(p_*(\lambda), \rho_*(\lambda), \lambda)}{U_*(\lambda)} \quad (15)$$

از این رابطه می‌توان انتگرال گیری نمود و در نتیجه رابطه  $n$  و  $\lambda$  را بدست آورد:

$$n = \int_0^{\lambda} \frac{U_*(\bar{\lambda})}{r(p_*(\bar{\lambda}), \rho_*(\bar{\lambda}), \bar{\lambda})} d\bar{\lambda} \quad (16)$$

اگر در رابطه اخیر حد بالای انتگرال گیری برابر  $\frac{1}{2}$  قرار داده شود، طول نیم-واکنش بدست خواهد آمد:

$$L_{1/2} = \int_0^{1/2} \frac{U_*(\bar{\lambda})}{r(p_*(\bar{\lambda}), \rho_*(\bar{\lambda}), \bar{\lambda})} d\bar{\lambda} \quad (17)$$

#### 4- حل ناحیه واکنش و استخراج رابطه D-κ

با استفاده از رابطه نرخ سوزش برای تغییر دادن متغیر  $n$  و جایگزین نمودن آن با  $\lambda$  بعنوان متغیر مستقل در معادله بقای انرژی و انجام یکسری عملیات جبری (جزئیات این کار در مرجع [23] آمده است)، معادله مهم زیر بدست می‌آید که معادله اصلی (Master equation) نامیده می‌شود:

$$\frac{dU}{d\lambda} = \frac{U[q(\gamma-1)r - c^2\kappa(U+D)]}{r(c^2 - U^2)} = \frac{U}{r} \frac{\phi}{\eta} \quad (18)$$

همچنین با انجام یکسری عملیات ریاضی روی معادله انرژی (7) می‌توان نشان داد که:

$$c^2 = \frac{(\gamma-1)}{2} [D^2 - U^2 + 2q\lambda] \quad (19)$$

در معادله اصلی، مکان هندسی حرارتی (Thermicity locus) بصورت:

$$\phi \equiv q(\gamma-1)r - c^2\kappa(U+D) = 0 \quad (20)$$

و مکان هندسی صوتی (Sonic locus) بصورت:

$$\eta \equiv c^2 - U^2 = 0 \quad (21)$$

تعریف می‌شوند.

در حالت کلی، حل معادله اصلی در نزدیکی مکان هندسی صوتی  $\eta=0$ ، تکین (Singular) می‌باشد. برای بدست آوردن یک حل قابل قبول و منطبق بر طبیعت مسئله،  $\phi$  و  $\eta$  بایستی همراه با هم صفر شوند. شرایط صفر شدن همزمان  $\phi$  و  $\eta$  در یک نقطه از جریان را شرایط CJ تعمیم یافته (Generalized CJ conditions) می‌نامند. همین شرط است که به تعیین سرعت انتشار دتونیشن کمک می‌کند. چراکه این شرط تنها زمانی قابل ارضاء است که یک رابطه ویژه بین  $D$  و  $K$  وجود داشته باشد. در این مقاله ضمن حل ناحیه واکنش، این رابطه برای  $\kappa \ll 1$  بدست خواهد آمد. لازم به ذکر است که با توجه به مثبت بودن مقدار  $U+D$  در ناحیه واکنش، معادله  $\phi$  تنها زمانی در یک نقطه صفر خواهد شد که  $K$  مثبت باشد. بنابراین تحلیل حاضر برای موج همگرا مستقیماً قابل استفاده نمی‌باشد.

در معادلات بقای جرم و مومنتم نیز می‌توان متغیر  $n$  را با متغیر  $\lambda$  جایگزین نمود. به این ترتیب مسئله به حل معادله اصلی به همراه فرم تغییر یافته معادلات بقای جرم و مومنتم روی محور واکنش  $\lambda$  تبدیل می‌شود [21]:

$$\frac{dU}{d\lambda} \equiv (U_n)_{,\lambda} = \frac{U}{r} \frac{\phi}{\eta} \quad (22)$$

$$\frac{dV}{d\lambda} = V \left[ \frac{(U_n)_{,\lambda}}{U} + \frac{\kappa}{r} (U + D) \right] \quad (23)$$

$$\frac{dp}{d\lambda} = -\frac{U}{V} (U_n)_{,\lambda} \quad (24)$$

در این روابط  $V = \frac{1}{\rho}$  می‌باشد.

در صورتی که معادلات حالت و نرخ سوزش دارای فرم نسبتاً ساده‌ای باشند، معادلات فوق را می‌توان با استفاده از تئوری اغتشاشی تکین (Singular perturbation theory) و به روش تحلیل مجانبی تطبیقی (Matched asymptotic analysis) حل نمود. به این ترتیب علاوه بر استخراج روابطی برای محاسبه خصوصیات جریان در ناحیه واکنش، رابطه بین  $D$  و  $K$  نیز بدست خواهد آمد. اما مشکل این روش، قابل استفاده نبودن آن برای مواد منفجره ای است که دارای معادلات حالت و نرخ سوزش پیچیده می‌باشند. در چنین شرایطی ادامه حل را بایستی بصورت عددی انجام داد. به این ترتیب علاوه بر نمودار  $D$ - $K$ ، نمودارهایی برای خواص جریان در مکان CJ تعمیم یافته بر حسب  $K$  بدست می‌آید. نکته ای که ذکر آن در اینجا حائز اهمیت می‌باشد، این است که برای هر ماده منفجره‌ای تنها یک بار نیاز به استخراج این نمودارها می‌باشد. لذا زمانی که صرف حل عددی معادلات فوق می‌شود، توجیه پذیر است.

معادلات بقا در ناحیه بین شوک پیشرو و مکان CJ تعمیم یافته از نوع معادلات دیفرانسیل مرتبه اول با 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 (Eigenvalue problem) تبدیل شده است. برای حل اینگونه مسائل می‌توان از روش شوتینگ (Shooting method) استفاده کرد. در صورتی که معادله نرخ سوزش به شکلی باشد که معادله اصلی تنها تابعی از  $U$  و  $\lambda$  شود، می‌توان آنرا بصورت مستقل از سایر معادلات بقا در صفحه  $U$ - $\lambda$  حل نمود. معادله نرخ سوزش آرنیوسی این خاصیت را دارا می‌باشد. در این حالت کلیات روش شوتینگ به این شکل است که:

1- برای یک مقدار سرعت دتونیشن  $D$  مورد نظر، با استفاده از روابط شاک قوی خصوصیات جریان در پشت جبهه شاک پیشرو  $(U_+, p_+, V_+)$  محاسبه می‌شود

2- معادل سرعت دتونیشن  $D$ ، یک مقدار اولیه  $K$  تخمین زده می‌شود.

3- مقادیری برای  $U_{CJ}$  و  $\lambda_{CJ}$  حدس زده می‌شود و سپس این مقادیر با استفاده از دو معادله مربوط به شرایط CJ تعمیم یافته (یعنی شرط همزمان صفر شدن  $\phi$  و  $\eta$ )، برای  $K$  تخمینی اولیه با یک الگوریتم تکراری اصلاح می‌شوند.

4- انتگرال گیری معادله اصلی از مکان صوتی شروع شده و به شوک پیشرو ختم می‌شود. به این ترتیب مقداری برای سرعت در پشت شوک  $(U_S)$  بدست می‌آید. این مقدار سرعت با توجه به تخمینی بودن مقدار  $K$ ، با مقدار سرعتی که با استفاده از رابطه شوک قوی  $(U_+)$  بدست می‌آید، برابر نخواهد بود.

5- با توجه به تفاوت بین مقدار سرعتهای  $U_S$  و  $U_+$ ، مقدار جدیدی برای  $K$  حدس زده میشود.

6- این روند تا رسیدن به همگرایی تکرار خواهد شد. به این ترتیب علاوه بر تعیین توزیع صحیح سرعت ذره در ناحیه حل، مقدار  $K$  معادل  $D$  مورد نظر نیز محاسبه می‌شود.

لازم به ذکر است که به علت تکین بودن نقطه CJ تعمیم یافته، شروع انتگرال گیری معادله اصلی از این نقطه با مشکل مواجه خواهد بود. جزئیات نحوه رفع تکینی و حل این مشکل در ضمیمه (آ) آمده است.

7- پس از این مرحله، به ترتیب برای  $V_{CJ}$  و  $p_{CJ}$  نیز مقادیری حدس زده می‌شود و معادلات بقای جرم و مومنتم از نقطه CJ تعمیم یافته تا پشت شوک انتگرال گیری خواهند شد. در این حالت نیز بایستی مقادیر حجم ویژه و فشار پشت شوک محاسبه

شده از این طریق با مقادیر محاسبه شده با استفاده از روابط شوک قوی یکسان باشند. بدین منظور مقادیر  $V_{CJ}$  و  $p_{CJ}$  جدید حدس زده می‌شود و این روند تا رسیدن به همگرایی تکرار خواهد شد.  
8- با تکرار کلیه مراحل فوق برای مقادیر دیگر  $D$ ، نمودار  $D-K$ ، به همراه نمودار تغییرات کلیه خواص میدان در مکان  $CJ$  تعمیم یافته به صورت تابعی از انحنای جبهه دتونیشن برای ماده منفجره مورد نظر بدست می‌آید.

## 5- ارزیابی دقت نتایج حاصل از تئوری DSD

بر مبنای الگوریتم فوق الذکر یک کد کامپیوتری توسعه داده شد که برای مشخص شدن دقت این کد، در ادامه بعضی نتایج حاصل از آن با نتایج حل عددی مستقیم (DNS) معادلات اولر واکنشی که در مرجع [24] ارائه شده، مقایسه می‌شود. این مرجع ماده شدیدالانفجار PBX-9502 را مورد بررسی قرار داده است. برای این ماده،  $\tilde{q} = 4 \text{ MJ/Kg}$  و  $\gamma = 3$ ، و برای معادله نرخ سوزش آن  $\tilde{E} = 0.0$  و  $\tilde{k} = 2.5147 \mu\text{s}^{-1}$  می‌باشند. مقدار  $\tilde{k}$  به نحوی تعیین شده که طول نیم-واکنش برابر یک میلیمتر شود. شرایط بالادست جریان نیز بصورت  $\tilde{p}_0 = 0$ ،  $\tilde{\rho}_0 = 2 \text{ g/cm}^3$  و  $\tilde{u}_0 = 0$  است. با استفاده از این مقادیر، برای سرعت دتونیشن چپمن-ژوگت مقدار  $\tilde{D}_{CJ} = 8 \text{ mm}/\mu\text{s}$  بدست خواهد آمد، و طول ناحیه واکنش پایای یک بعدی برابر 4mm خواهد بود.

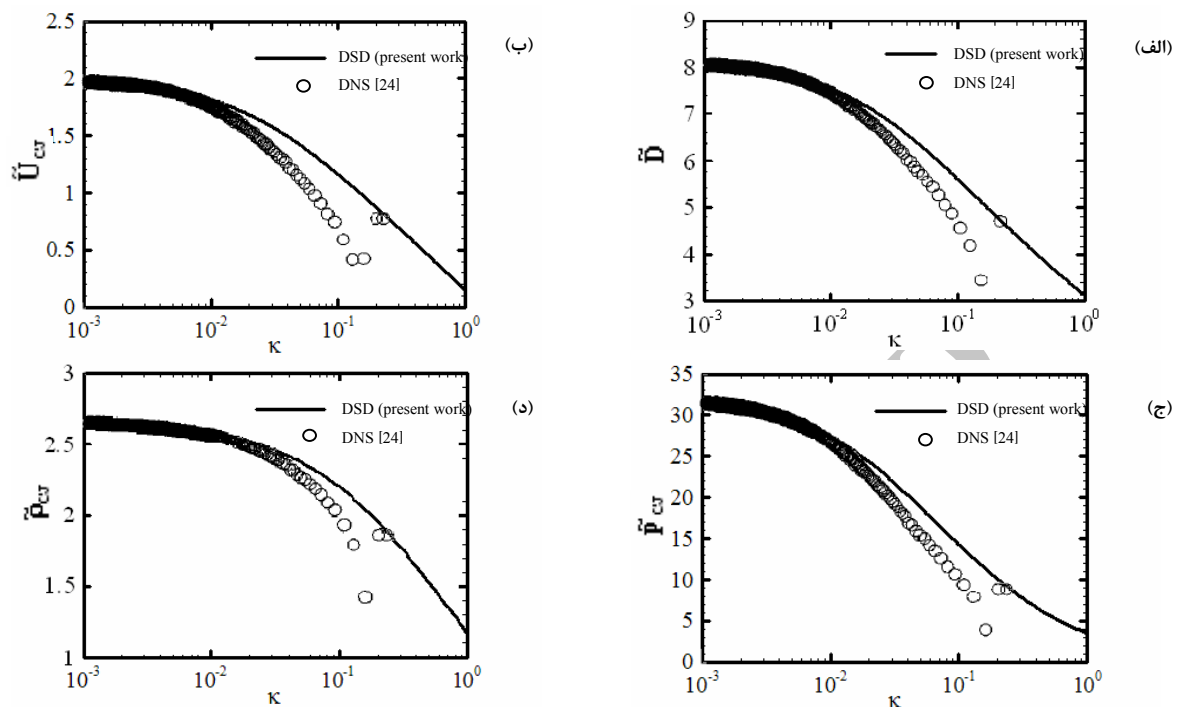
در شکل (الف-1) نمودار  $D-K$  که در کار حاضر با استفاده از روش DSD بدست آمده، با حل عددی مستقیم مقایسه شده است. در ابتدا ذکر این نکته لازم است که افزایش ناگهانی سرعت در بیشترین مقدار انحناء در نتایج حل عددی مستقیم، در واقع خطای شروع محاسبات گذرا می‌باشد که به علت استفاده از داده‌های اولیه غیر دقیق ایجاد شده است [25]. همانطور که مشاهده می‌شود، سرعت دتونیشن در انحنای صفر برابر سرعت چپمن-ژوگت می‌باشد و با افزایش انحناء، سرعت دتونیشن کاهش یافته است. با توجه به شکل، نمودار  $D-K$  بدست آمده از روش DSD در مقادیر کم انحنای جبهه دتونیشن از دقت خیلی خوبی برخوردار می‌باشد. با افزایش انحناء نتایج DSD از DNS دور می‌شوند. علت اصلی کاهش دقت نمودار به هنگام افزایش انحناء، ساده سازی معادلات اولر واکنشی بر مبنای دو فرض اولیه تحلیل DSD یعنی فرض کم بودن انحنای جبهه دتونیشن و شبه پایا بودن آن می‌باشد. لازم به ذکر است که با توجه به فرض اول، در معادلات اولر واکنشی در دستگاه چسبیده به شاک، جمله‌های از مرتبه  $O(K^2)$  و کوچکتر حذف شده‌اند. بر مبنای فرض دوم نیز از جمله‌های وابسته به زمان صرف نظر شده است.

در شکل‌های (ب-1)، (ج-1) و (د-1) به ترتیب نمودارهای تغییرات سرعت ذره (نسبت به ناظر ساکن)، فشار و چگالی در مکان  $CJ$  تعمیم یافته برحسب انحنای جبهه دتونیشن که در کار حاضر با استفاده از تئوری DSD بدست آمده‌اند، با حل DNS مقایسه شده‌اند. در این نمودارها مشاهده می‌شود که با افزایش انحناء، مقادیر کلیه کمیت‌های فوق الذکر نسبت به مقادیر مربوط به دتونیشن چپمن-ژوگت (یعنی انحنای صفر) کاهش می‌یابد. با توجه به این نمودارها می‌توان نتیجه گرفت که در مقادیر انحنای کم، دقت تئوری DSD بسیار خوب است اما با افزایش انحناء این دقت کاهش می‌یابد.

## 6- مطالعه پارامتری دتونیشن خمیده

پیش از بررسی اثر کمیت‌های مختلف بر دتونیشن خمیده، ابتدا قسمت‌های مختلف نمودار  $D-K$  مورد بررسی قرار گرفته است. در این راستا، ساختار کلی نمودار  $D-K$  برای حالتی که مقدار انرژی تحریک غیر صفر باشد، در شکل (2) نشان داده شده است [26]. همانطور که مشاهده می‌شود، در حالت کلی نمودار  $D-K$  به شکل حرف  $Z$  بوده و دارای دو نقطه بازگشت است. این نمودار دارای سه شاخه بالایی، میانی و پایینی است. در بعضی از نقاط به ازای یک مقدار  $K$ ، سه مقدار  $D$  وجود دارد. در شاخه بالایی این نمودار با افزایش انحناء، سرعت دتونیشن کاهش می‌یابد. پس از رسیدن به نقطه بازگشت بالایی، افزایش انحناء در

این شاخه در یک انحناى ماگزیمم که انحناى بحرانی نامیده می‌شود، متوقف خواهد شد. وجود چنین نقطه‌ای به این معنی است که با افزایش بیش از حد انحناى جبهه، امکان انتشار دتونیشن شبه-پایا وجود ندارد و موج دتونیشن خاموش می‌شود.



شکل (1): مقایسه تغییرات (الف) سرعت دتونیشن ( $\text{mm}/\mu\text{s}$ )، (ب) سرعت ذره ( $\text{mm}/\mu\text{s}$ )، (ج) فشار (Gpa) و (د) چگالی ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ) در مکان CJ تعمیم یافته برحسب انحنا ( $\text{mm}^{-1}$ ) بدست آمده از روش DSD با نتایج DNS [24] برای ماده شدیدالانفجار PBX-9502

همانطور که در شکل نشان داده شده، خاموش شدن دتونیشن بصورت پرش به شاخه پایینی اتفاق می‌افتد. نقطه بازگشت پایینی دلالت بر آغاز دتونیشن در زمانی دارد که جبهه خمیده به سمت تخت شدن پیش می‌رود [26]. با رسیدن به شرایط نقطه بازگشت پایینی، آغازش با پرش به شاخه بالایی بوقوع می‌پیوندد. طبق نظر استوارت و یو [21] شاخه میانی یک شاخه ناپایدار است. زیرا با شتاب گرفتن دتونیشن، انحنا کاهش می‌یابد. لذا هیچ مسیری به این شاخه از شاخه‌های پایدار بالایی یا پایینی وجود ندارد. شاخه پایینی، برای دتونیشن در مواد شدیدالانفجار، یک شاخه دتونیشن با سرعت کم (Low Velocity Detonation) است. در این شاخه شاک پیشرو خیلی ضعیف است و با سرعتی خیلی نزدیک به سرعت صوت حرکت می‌کند، بنابراین جریان در عمل غیر واکنشی است. با این حال استوارت و یو [21] اظهار داشته‌اند که نقطه بازگشت در محل اتصال شاخه پایینی و میانی (نقطه بازگشت پایینی) دارای اهمیت است چراکه مربوط به یک نقطه آغاز می‌باشد.

در شاخه پایینی نمودار D- $\kappa$  سرعت دتونیشن کم است. با کاهش سرعت دتونیشن، دمای پشت شاک نیز کاهش یافته و در نتیجه سرعت واکنش کم می‌شود. به این ترتیب طول ناحیه واکنش افزایش خواهد یافت. در چنین شرایطی طول نیم-واکنش دتونیشن پایایی یک بعدی ( $\tilde{L}_{1/2}$ ) دیگر مقیاس خوبی از طول ناحیه واکنش نخواهد بود، بلکه بجای آن فاصله شاک تا مکان صوتی ( $\tilde{L}_{CJ}$ )، یعنی بخشی از ناحیه واکنش که می‌تواند بر جبهه دتونیشن تأثیر بگذارد، مقیاس خوبی از طول ناحیه واکنش است [26]. فرض کم بودن انحناى جبهه دتونیشن که در استخراج روابط D- $\kappa$  بکار رفت، ایجاب می‌کند که انحناى بی بعد شده نسبت به  $\tilde{L}_{CJ}$  مقدار کوچکی باشد. این انحناى بی بعد که  $\kappa^*$  نامیده می‌شود، از رابطه زیر بدست می‌آید:

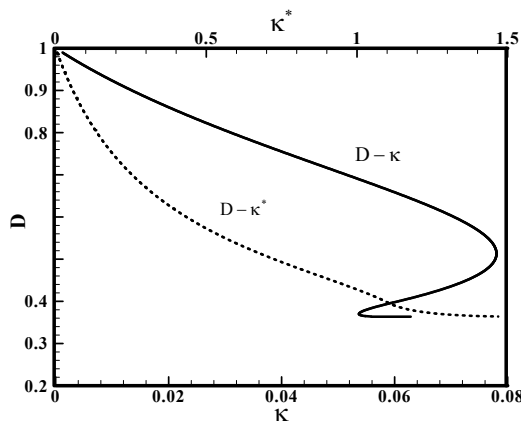
$$\kappa^* = \tilde{L}_{CJ} * \tilde{\kappa} \quad (25)$$

در شکل (3) نمودارهای D- $\kappa$  (خط ممتد) و D- $\kappa^*$  (خط-چین) برای PBX-9502 رسم شده‌اند. مشاهده می‌شود که نمودار D- $\kappa$  دارای دو نقطه بازگشت است. این در حالی است که  $\kappa$  هنوز مقدار کوچکی دارد. از طرف دیگر با توجه به نمودار

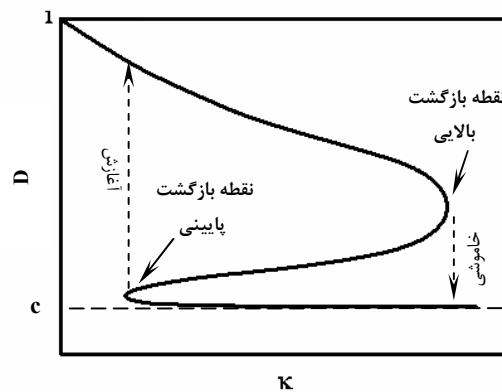


$D-\kappa^*$ ، با کاهش سرعت دتونیشن مقدار  $\kappa^*$  بصورت یکنواخت افزایش یافته و به مقادیر بزرگی می‌رسد. با توجه به این نمودار، برای سرعت‌های کم، شعاع انحنای جبهه دتونیشن قابل مقایسه با طول ناحیه واکنش می‌شود. بنابراین در این بخش از نمودار، فرض کم بودن انحنای جبهه دتونیشن صادق نیست. در واقع در چنین شرایطی در مورد شاخه پایینی نمودار Z شکل  $D-\kappa$  و نقطه آغازش مربوط به آن، که بر اساس دو فرض کم بودن انحنای جبهه دتونیشن و شبه پایا بودن آن بدست آمده اند، نمی‌توان اظهار نظر کرد [26]. در مرجع [27] در تحلیل دتونیشن گازی، گفته شده که وجود نقطه بازگشت پایینی یک خصوصیت غیر فیزیکی ناشی از نرخ واکنش یک مرحله ای آرنیوسی است. در صورتی که سینتیک مناسبی برای واکنش ماده منفجره در نظر گرفته شود، این نقطه در عمل وجود نخواهد داشت. اینکه این استدلال برای مواد شدیدالانفجار نیز قابل تعمیم است یا نه، نیاز به بررسی بیشتر دارد.

از بحث فوق این نتیجه را می‌توان گرفت که تنها شاخه قابل استفاده از نمودار  $D-\kappa$ ، شاخه بالایی و نقطه خاموشی مربوط به آن است. به این دلیل در این مقاله تنها در مورد این بخش از نمودار مذکور بحث می‌شود.



شکل (3) نمودارهای  $D-\kappa$  و  $D-\kappa^*$  برای PBX-9502  
( $\tilde{k} = 4.7204 \mu s^{-1}$  و  $\tilde{E} = 10.0 \text{ MJ/Kg}$ )



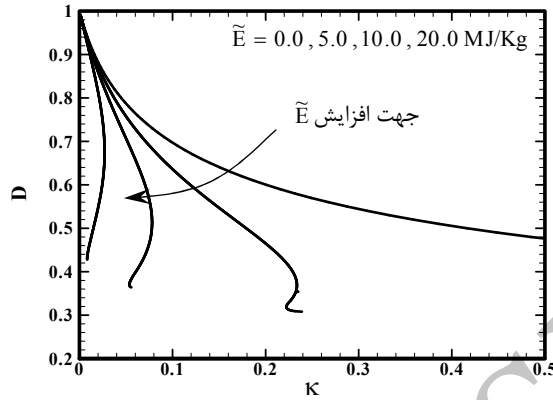
شکل (2): ساختار کلی نمودار  $D-\kappa$  [26]

در شکل (4) تاثیر افزایش انرژی تحریک بر نمودارهای  $D-\kappa$  نشان داده شده است. این نمودارها برای مقادیر انرژی تحریک  $\tilde{E} = 0.0, 5.0, 10.0, 20.0 \text{ MJ/Kg}$  رسم شده‌اند. مقادیر  $\tilde{k}$  به نحوی انتخاب شده اند که طول نیم-واکنش برابر 1 mm باشد. سایر خصوصیات مشابه با PBX-9502 در نظر گرفته شده‌اند. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود، در نمودار مربوط به انرژی  $\tilde{E} = 0.0$  هیچ نقطه بازگشتی وجود ندارد. اما افزایش انرژی تحریک باعث پدیدار شدن دو نقطه بازگشت می‌شود که با افزایش  $\tilde{E}$  به سمت مقادیر کوچکتر  $\kappa$  حرکت می‌نمایند. واضح است که کاهش انحنای معادل این دو نقطه بازگشت را می‌توان به کاهش حساسیت ماده منفجره و افزایش احتمال خاموشی دتونیشن تعبیر نمود.

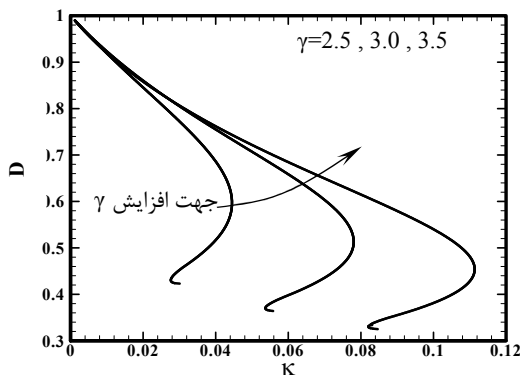
در شکل های (5) و (6) به ترتیب تاثیر درجه واکنش  $\nu$  و توان پلی تروپیک  $\gamma$  بر نمودار  $D-\kappa$  بررسی شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، افزایش هردوی این کمیتها باعث افزایش انحنای بحرانی خواهد شد، اما اثر  $\gamma$  بیشتر است.

در شکل (7) تغییر فاصله بی بعد شاک تا مکان CJ تعمیم یافته (مکان صوتی)  $L_{CJ}$  برحسب انحنای جبهه دتونیشن برای مقادیر مختلف انرژی تحریک رسم شده است. همانطور که پیش از این نیز ذکر شد، تنها بخشی از ناحیه واکنش که بین شاک تا مکان صوتی قرار دارد، بر رفتار موج دتونیشن تاثیر می‌گذارد. در شکل (7) مشاهده می‌شود که  $L_{CJ}$  به تغییر انحنای خیلی حساس است. این حساسیت با نزدیک شدن به انحنای بحرانی تشدید می‌شود. همچنین با توجه به این شکل می‌توان دریافت که افزایش انرژی تحریک باعث افزایش شدید  $L_{CJ}$  خواهد شد. در چنین شرایطی طول نیم-واکنش  $\tilde{L}_{1/2}$  مقیاس

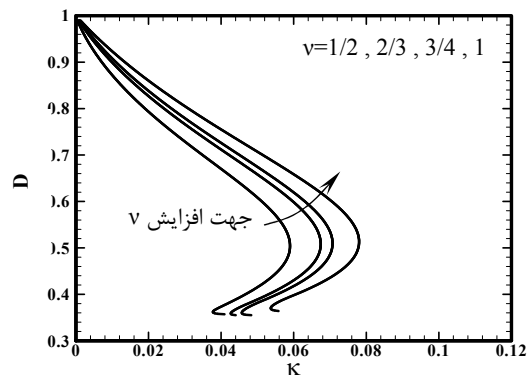
خوبی از طول ناحیه واکنش نخواهد بود. در شکل (8) پارامتر پیشرفت واکنش در مکان CJ تعمیم یافته  $\lambda_{CJ}$  برحسب انحنای جبهه دتونیشن برای مقادیر مختلف انرژی تحریک رسم شده است. با توجه به این شکل با افزایش انحناء ابتدا مکان صوتی به ناحیه‌ای که کمتر واکنش داده است، حرکت خواهد کرد ( $\lambda_{CJ}$  کم می‌شود). اما اگر انحناء از حدی بیشتر شود، مکان صوتی می‌تواند به شرایطی که در آن واکنش پیشرفت بیشتری کرده است، باز گردد.



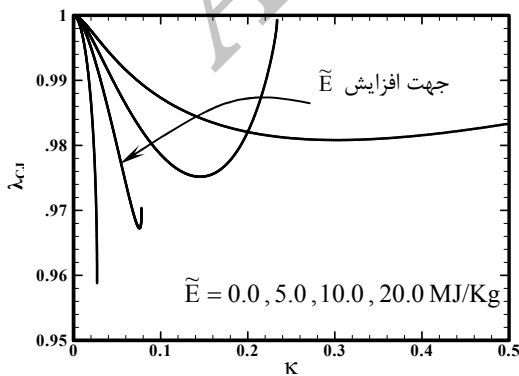
شکل (4) نمودار  $D-\kappa$  برای ماده شدیدالانفجار PBX-9502 با مقادیر مختلف انرژی تحریک



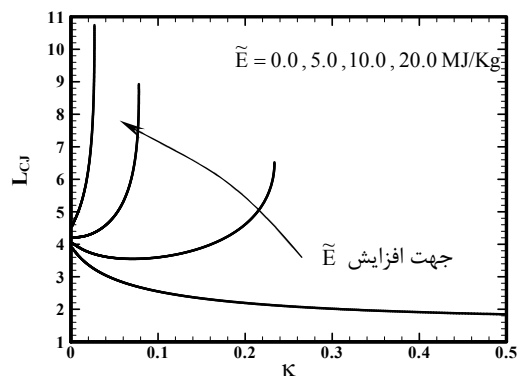
شکل (6) نمودار  $D-\kappa$  برای PBX-9502 برای انرژی تحریک  $\tilde{E} = 10.0 \text{ MJ/Kg}$  و مقادیر مختلف  $\gamma$



شکل (5) نمودار  $D-\kappa$  برای PBX-9502 برای انرژی تحریک  $\tilde{E} = 10.0 \text{ MJ/Kg}$  و مقادیر مختلف  $\nu$

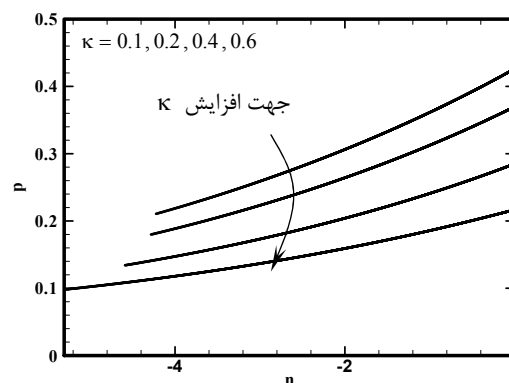
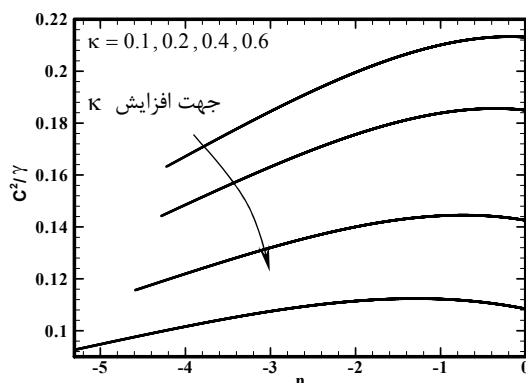


شکل (8) نمودار  $\lambda_{CJ}$  برای PBX-9502 و مقادیر مختلف انرژی تحریک



شکل (7) نمودار  $L_{CJ} = \tilde{L}_{CJ} / \tilde{L}_{1/2}$  برای PBX-9502 و مقادیر مختلف انرژی تحریک

در شکل های (9) و (10) تغییرات فشار و کمیت  $c^2/\gamma$  که معادل دما می باشد، برای انحنای مختلف در ناحیه بین شاک و مکان صوتی رسم شده اند. با توجه به شکل (9) همانطور که انتظار می رود، فشار در پشت شاک بیشترین مقدار را دارد و با پیشرفت واکنش کاهش می یابد. همچنین افزایش انحنای جبهه دتونیشن باعث کاهش فشار خواهد شد. در شکل (10) مشاهده می شود که با افزایش انحنای، مقدار کمیت  $c^2/\gamma$  (دما) در ناحیه واکنش کاهش می یابد. در ضمن در انحنای کم، محل ماکزیمم این کمیت در ابتدای ناحیه واکنش است. با افزایش انحنای، محل آن مقدار کمی به داخل ناحیه واکنش منتقل می شود. بنابراین می توان نتیجه گرفت که طول ناحیه تاخیر (Induction zone) (یعنی از ابتدای ناحیه واکنش تا نقطه ای که دما ماکزیمم می شود) نسبت به طول مابقی ناحیه واکنش (یعنی از نقطه ماکزیمم به بعد) نسبتاً کم است. بعنوان مثال با توجه به شکل (10) این نسبت برای حالت  $\kappa = 0.2$  کمتر از 10٪ می باشد. این وضعیت، کند شدن سرعت انجام واکنش در نزدیکی انتهای ناحیه واکنش را نشان می دهد. چنین اتفاقی از خصوصیات بارز بعضی از مواد شدیدالانفجار است [19]. در واقع تقابل بین معادله حالت پیچیده سیال متراکم با واکنش های گرمازا در نزدیکی انتهای ناحیه واکنش است که موجب کاهش سرعت آزاد شدن انرژی می شود. با این حال مشاهده شد که با استفاده از یک واکنش آرنیوسی تک مرحله ای به همراه معادله حالت پلی تروپیک با  $\gamma > 2$  می توان این خصوصیت مهم دتونیشن مواد شدیدالانفجار را بصورت کیفی پیش بینی کرد. ذکر این نکته لازم است که با این وجود نتایج بدست آمده با استفاده از معادله حالت پلی تروپیک با  $\gamma > 2$  را بایستی با احتیاط تعبیر نمود. بدین معنی که از این نتایج برای بررسی کیفی دتونیشن مواد شدیدالانفجار می توان استفاده کرد. اما برای تحلیل کمی دتونیشن در اینگونه مواد، نیاز به استفاده از معادله حالت مناسب آنها است.



شکل (9) تغییرات فشار در ناحیه واکنش PBX-9502 برای مقادیر مختلف  $\kappa$  ( $\tilde{E} = 10.0 \text{ MJ/kg}$ )  
شکل (10) تغییرات  $c^2/\gamma$  در ناحیه واکنش PBX-9502 برای مقادیر مختلف  $\kappa$  ( $\tilde{E} = 10.0 \text{ MJ/kg}$ )

## 7- جمع بندی

در این مقاله برای مواد شدیدالانفجار با حل قسمتی از ناحیه واکنش بین شاک پیشرو و مکان صوتی، تاثیر انحنای جبهه دتونیشن بر انتشار آن و خواص جریان در ناحیه واکنش مورد بررسی قرار گرفت و نتایج آن با حل عددی مستقیم مقایسه شد. نتایج این تحلیل برای دتونیشن شبه پایا با انحنای جبهه کم اعتبار دارد. مشاهده شد که در حالت کلی نمودار D- $\kappa$  به شکل حرف Z با دو نقطه بازگشت است. نقطه بازگشت بالایی مربوط به خاموشی و نقطه بازگشت پایینی مربوط به آغازش دتونیشن می باشد. استدلال شد تنها از شاخه بالایی نمودار D- $\kappa$  و نقطه بحرانی مربوط به آن می توان استفاده نمود. چراکه شرایط سایر شاخه های نمودار با فرضیات ساده کننده اصلی تئوری DSD همخوانی ندارند. همچنین دیده شد که مقدار انحنای بحرانی که معادل خاموشی دتونیشن است، با مقدار انرژی تحریک نسبت عکس و با مقدار  $\nu$  و  $\gamma$  نسبت مستقیم دارد. مشاهده شد که افزایش انحنای جبهه دتونیشن باعث کاهش فشار و دما در ناحیه واکنش می شود. یکی از نتایج سودمندی که در این مقاله

بدان اشاره شد این است که افزایش انرژی تحریک باعث افزایش شدید  $L_{CJ}$  می‌شود. در چنین شرایطی طول نیم-واکنش  $\tilde{L}_{1/2}$  دیگر مقیاس خوبی از طول ناحیه واکنش نخواهد بود و بجای آن بایستی از  $\tilde{L}_{CJ}$  استفاده شود.

لازم به ذکر است که نمودارهای تغییرات سرعت دتونیشن و خواص جریان در مکان CJ با انحناء جبهه دتونیشن، جزء خصوصیات ذاتی هر ماده است، بنابراین تنها یک بار نیاز به استخراج آنها می‌باشد. پس از استخراج این نمودارها، می‌توان از آنها بعنوان شرط مرزی استفاده کرده و پدیده انبساط گازهای حاصل از انفجار در مابقی میدان را به روش عددی، بدون نیاز به شبکه بسیار ریز شبیه سازی نمود. به این طریق زمان محاسبات نسبت به حل DNS به شدت کاهش می‌یابد.

در این مقاله برای پیش بینی رفتار مواد شدیدالانفجار، از معادله حالت پلی تروپیک با  $\gamma > 2$  و نرخ سوزش آرنیوسی تک مرحله ای استفاده شد که برای بررسی کیفی رفتار این مواد مناسب است. برای شبیه سازی دقیق تر دتونیشن در مواد شدیدالانفجار نیاز است که از معادله حالت و نرخ سوزش مناسب این مواد استفاده شود.

ضمیمه (آ):

### آ-1- شروع انتگرال گیری در نقطه CJ تعمیم یافته

کمیت  $dU/dk$  که با استفاده از معادله اصلی بدست می‌آید، در نقطه CJ تعمیم یافته نامعین است. چرا که این معادله به نسبت  $\phi/\eta$  وابسته است و این عبارت نیز در نقطه CJ تعمیم یافته قابل محاسبه نمی‌باشد. بنابراین این نقطه یک نقطه تکین به حساب می‌آید. به همین دلیل شروع انتگرال گیری از این نقطه با مشکل مواجه خواهد بود. با این وجود با فرض هموار بودن پارامترهای حرارتی و صوتی ( $\phi$  و  $\eta$ )، با بسط دادن در همسایگی مکان صوتی تعمیم یافته، می‌توان مقدار شیب  $dU/dk$  را محاسبه نمود و به این وسیله مشکلات شروع انتگرال گیری را برطرف کرد. بسط سری تیلور برای  $\phi$  و  $\eta$  در نزدیکی مکان CJ تعمیم یافته بصورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} U &= U_{cj} + U_{,\lambda} d\lambda + \dots \\ V &= V_{cj} + V_{,\lambda} d\lambda + \dots \\ p &= p_{cj} + p_{,\lambda} d\lambda + \dots \end{aligned} \quad (1-آ)$$

با جایگذاری این عبارات تا مرتبه اول در معادله اصلی، رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\frac{dU}{d\lambda} = \frac{U}{r} \frac{d(\phi)}{d(\eta)} = \frac{U}{r} \frac{[\phi_{,p} p_{,\lambda} + \phi_{,V} V_{,\lambda} + \phi_{,U} U_{,\lambda} + \phi_{,\lambda}]}{[\eta_{,p} p_{,\lambda} + \eta_{,V} V_{,\lambda} + \eta_{,U} U_{,\lambda} + \eta_{,\lambda}]} \quad (2-آ)$$

عبارات معادل مشتقات ترمودینامیکی  $\phi_{,p}$ ،  $\phi_{,V}$ ،  $\phi_{,U}$ ،  $\phi_{,\lambda}$  و  $\eta_{,p}$ ،  $\eta_{,V}$ ،  $\eta_{,U}$ ،  $\eta_{,\lambda}$  را می‌توان با مشتق گرفتن از معادلات (20) و (21) بدست آورد. جزئیات فرم این عبارات به فرم معادله حالت و نرخ سوزش بستگی دارد. نحوه محاسبه این کمیتها برای معادله حالت و نرخ سوزش مورد استفاده در این مقاله در بخش بعد آمده است. دقت شود که کمیتهای  $V_{,\lambda}$  و  $p_{,\lambda}$  با استفاده از روابط (23) و (24) برحسب  $U_{,\lambda}$  بدست می‌آیند.

برای محاسبه  $U_{,\lambda}$  با استفاده از معادله (2-آ)، برای سادگی کار در این رابطه قرار داده می‌شود:  $x = U_{,\lambda}$ . به این ترتیب این معادله در نقطه CJ تعمیم یافته به شکل زیر در خواهد آمد:

$$x \frac{r_{CJ}}{U_{CJ}} = \frac{a_1 x + b_1}{a_2 x + b_2} \quad (3-آ)$$

که در آن مقادیر  $a_1$ ،  $b_1$ ،  $a_2$  و  $b_2$  با استفاده از روابط زیر در شرایط CJ تعمیم یافته بدست می‌آیند:

$$a_2 = \eta_{,v} \frac{V_{CJ}}{U_{CJ}} - \eta_{,p} \frac{U_{CJ}}{V_{CJ}} + \eta_{,U} \quad , \quad a_1 = \phi_{,v} \frac{V_{CJ}}{U_{CJ}} - \phi_{,p} \frac{U_{CJ}}{V_{CJ}} + \phi_{,U}$$

$$b_2 = \kappa \eta_{,v} \frac{[U_{CJ} + D]}{r} V_{CJ} + \eta_{,\lambda} \quad , \quad b_1 = \kappa \phi_{,v} \frac{[U_{CJ} + D]}{r} V_{CJ} + \phi_{,\lambda} \quad (4-آ)$$

معادله (3-آ) را برای محاسبه شیب  $x$  بصورت زیر باز نویسی می‌شود:

$$x^2 - \alpha x + \beta = 0$$

که در آن:

$$\alpha = -\frac{b_2 r_{CJ} - a_1 U_{CJ}}{a_2 r_{CJ}} \quad \beta = -\frac{b_1 U_{CJ}}{a_2 r_{CJ}} \quad (5-آ)$$

که حل آن به این صورت است:

$$x = \frac{1}{2} (\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4\beta}) \quad (6-آ)$$

اکنون کلیه کمیت‌های حالت  $[V_{CJ}, U_{CJ}, P_{CJ}, \lambda_{CJ}]$  در نقطه CJ به همراه شیب  $dU/d\lambda$  بدست آمده اند. بنابراین می‌توان سیستم ODE را به سمت عقب از نقطه CJ،  $\lambda = \lambda_{CJ}$ ، تا سطح شاک،  $\lambda = 0$ ، در ناحیه واکنش انتگرال گیری نمود.

## آ-2- محاسبه مشتقات ترمودینامیکی

همانطور که پیش از این ذکر شد، عبارات معادل  $\phi_{,p}, \phi_{,U}, \phi_{,v}, \phi_{,\lambda}$  و  $\eta_{,p}, \eta_{,U}, \eta_{,v}, \eta_{,\lambda}$  را می‌توان با مشتق گرفتن از معادلات (20) و (21) بدست آورد. برای معادله حالت پلی تروپیک و نرخ سوزش آرنیوسی، این مقادیر بصورت زیر محاسبه شده اند:

$$e_{,v} = \frac{p}{\gamma - 1}, \quad e_{,p} = \frac{V}{\gamma - 1}, \quad e_{,\lambda} = -q, \quad c^2 = \gamma p V, \quad (7-آ)$$

$$\phi = (\gamma - 1) q r - \kappa c^2 (U + D)$$

مشتقات پارامتر حرارتی عبارتند از:

$$\phi_{,\lambda} = q(\gamma - 1) \frac{\partial r}{\partial \lambda} - \kappa (U + D) \frac{\partial c^2}{\partial \lambda},$$

$$\phi_{,U} = q(\gamma - 1) \frac{\partial r}{\partial U} - \kappa \left[ c^2 + (U + D) \frac{\partial c^2}{\partial U} \right] \quad (8-آ)$$

و مشتقات پارامتر صوتی به شرح زیرند:

$$\eta_{,U} = \frac{\partial c^2}{\partial U} - 2U, \quad \eta_{,\lambda} = \frac{\partial c^2}{\partial \lambda} \quad (9-آ)$$

همچنین:

$$\frac{\partial r}{\partial \lambda} = r \left( -\frac{V}{1 - \lambda} + \frac{\theta}{c^4} \frac{\partial c^2}{\partial \lambda} \right), \quad \frac{\partial r}{\partial U} = r \frac{\theta}{c^4} \frac{\partial c^2}{\partial U}$$

$$\frac{\partial c^2}{\partial \lambda} = q(\gamma - 1), \quad \frac{\partial c^2}{\partial U} = -U(\gamma - 1) \quad (10-آ)$$

در این مورد ساده، می‌توان  $\phi$  و  $\eta$  را بصورت توابعی فقط از  $U$  و  $\lambda$  بیان کرد. چرا که  $\phi = \phi(c^2, r)$ ،  $\eta = \eta(c^2, U^2)$  و کمیت  $c^2$  را نیز با استفاده از قانون بقای انرژی، که در حالت حدی شاک قوی می‌توان آنرا بصورت زیر نوشت، میتوان مستقیماً تنها بر حسب  $U$  و  $\lambda$  بیان نمود (معادله (19)):

$$\frac{1}{2}U^2 + \frac{c^2}{\gamma - 1} - q\lambda = \frac{1}{2}D^2 \quad (11-\bar{A})$$

بنابراین بسط  $\phi/\eta$  در نزدیکی نقطه CJ تعمیم یافته عبارت است از:

$$[\phi_{,\lambda} + \phi_{,U}U_{,\lambda}] / [\eta_{,\lambda} + \eta_{,U}U_{,\lambda}] \quad (12-\bar{A})$$

به این ترتیب نهایتاً خواهیم داشت:

$$b_2 = \eta_{,\lambda}, a_2 = \eta_{,U}, b_1 = \phi_{,\lambda}, a_1 = \phi_{,U} \quad (13-\bar{A})$$

## مراجع

- 1- Michelson, V. G., Uchenye Zapiski Imperatorskogo Moskovskogo Universiteta, Vol. 10, pp. 1-92, 1891.
- 2- Chapman, D. L., "On the Rate of Explosion in Gases", London-Edinburgh-Dublin Philosophical Magazine, Vol. 47, pp. 90-104, 1899.
- 3- Jouguet, E., "On the propagation of chemical reactions in gases", J. de Mathématique Pures et Appliquées, Vol. 1, pp. 347-425, 1905; Vol. 2, pp. 5-85, 1906.
- 4- Jouguet, E., Mécanique des Explosifs, Doin et Fils Eds., Paris, 1917.
- 5- Zeldovich, Ya. B., "On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems" Zh. Eksp. Teor. Fiz., Vol. 10, pp. 542-568, 1940.
- 6- Von Neumann, J., "Theory of Detonation Waves", In John von Neumann, collected works, vol. 6, ed. J. Taub. Macmillan, New York, 1942.
- 7- Döring, W., "Über den Detonation svorgang in Gasen", Annalen der Physik, Vol. 43, pp. 421-436, 1943.
- 8- Kuznetsov, N. M., and Shvedov, K. K., Fizika Goreniya i Vzryva, Vol. 2, pp. 85-96, 1966.
- 9- Lee, E. L., and Hornig, H. C., "Equation of state of detonation product gases", Proc. Comb. Inst., Vol. 12, pp. 493-499, 1969.
- 10- Mader, C. L., "Numerical Modeling of Detonations", University of California Press, Berkeley, 1979.
- 11- Kondrikov, B. N., and Sumin, A. I., "Equation of state of gases at high pressure", Comb. Expl. & Shock Waves, Vol. 23, pp. 114-123, 1987.
- 12- Hobbs, M. L., and Baer, M. R., "Calibrating the BKW-EOS with a Large Product Species Database and Measured CJ Properties", 10th International Symposium on Detonation, pp. 409-418, 1993.
- 13- Wood, W. W., and Kirkwood, J. G., "Diameter Effect in Condensed Explosives", J. Chem. Phys., Vol. 22, pp. 1920-1924, 1954.
- 14- Bdzil, J. B., "Perturbation methods applied to problems in detonation physics", 6th International Symposium on Detonation, pp. 352-370, 1976.
- 15- Bdzil, J. B., "Steady-state Two-dimensional Detonation", J. Fluid. Mech., Vol. 108, pp. 195-226, 1981.
- 16- Stewart, D. S. and Bdzil, J. B. "The shock dynamics of stable multi-dimensional detonation", Combust. Flame, Vol. 72, pp. 311-323, 1988.
- 17- Stewart, D. S. and Bdzil, J. B. "A Lecture on Detonation Shock Dynamics", Lecture Notes in Physics, Springer, Vol. 299, pp. 17-30, 1988.
- 18- Bdzil, J. D. and Stewart, D. S. "Modeling of two-dimensional detonation with detonation shock dynamics". Phys. Fluids A, Vol. 1, pp. 1261-1267, 1989.
- 19- Klein, R. and Stewart D. S. "The relation between curvature, rate state-dependence and detonation velocity", SIAM J. Appl. Maths, Vol. 53, pp. 1401-1435, 1993.
- 20- Yao, J. and Stewart, D. S. "On the normal detonation shock velocity curvature relationship for materials with large activation energy", Combust. Flame, Vol. 100, pp. 519-528, 1995.
- 21- Stewart, D. S. and Yao, J. "The normal detonation shock velocity - curvature relationship for materials with nonideal equation of state and multiple turning points", Combust. Flame, Vol. 113, pp. 224-235, 1998.
- 22- Bdzil J. B., "Lecture on: Detonation front models; theories and methods", Los Alamos National Laboratory, October 12, 1999.
- 23- Stewart D. S., "Lectures on detonation physics: Introduction to the theory of detonation shock dynamics", Theoretical and applied mechanics, University of Illinois, Urbana, Illinois 61801, February 25, 1994.
- 24- Bdzil J. B., Stewart D. S., and Jackson T. L., "Program Burn Algorithms Based on Detonation Shock Dynamics: Discrete Approximations of Detonation Flows with Discontinuous Front Models", Journal of Computational Physics, Vol. 174, pp. 870-902, 2001.
- 25- Bdzil J. B. and Jackson T. L., Private communication (by e-mail).
- 26- Sharpe G. J., "The effect of curvature on pathological detonation", Combust. Flame, Vol. 123, pp. 68-81, 2000.
- 27- Kasimov A. R. and Stewart D. S., "Theory of direct initiation of gaseous detonations and comparison with experiment", University of Illinois at Urbana-Champaign, TAM Report No. 1043, 2004.