

بررسی تاثیر مدل های ترکیبی بر پیش بینی انتشار تراک در مواد شدیدالانفجار با استفاده از تئوری WK

سبحان امامی کویانی^۱، کیومرث مظاهری^۲، حسین سوری^۳

دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده فنی و مهندسی، آزمایشگاه دینامیک گازها

چکیده

در ادامه کار، و برای بهبود کارایی کد چیتا، فرید و همکاران [۳] هر یک از مواد منفجره مرکب را به گونه های شیمیایی مجزای تشکیل دهنده آن تقسیم کرده و برای هر یک، واکنش و ضریب نرخ واکنش متفاوتی را در نظر گرفتند. آنها همچنین برای واکنش های کند از نرخ واکنش محدود، و برای واکنش های دیگر از نرخ واکنش بی نهایت به همراه فرض تعادل ترمودینامیکی استفاده کردند. آنها نشان دادند که با استفاده از این روش می توان از معادلات حالت و نرخ های واکنش مشابه در دامنه ی وسیعی از ترکیبات مختلف مواد منفجره بهره جست. در مطالعه دیگری لو (Lu) به ارزیابی کد چیتا در شبیه سازی کارایی مواد منفجره پرداخت [۴]. وی نشان داد که کد چیتا و مدل سینتیکی WK آن دارای توانایی مناسبی در شبیه سازی انتشار تراک در مواد منفجره نسبتا غیرایده آل و بسیار غیرایده آل بوده و وابستگی سرعت انتشار تراک به قطر خرج را به خوبی نشان می دهد. وی پیشنهاد داد که برای افزایش تشابه نتایج حاصل با نتایج تجربی برای مواد بسیار غیرایده آل، نظیر PBXW-115، توان فشار در نرخ واکنش مورد استفاده در کد چیتا از ۲ به ۰.۵ تقلیل یابد. قدم بعدی در بهبود کارایی کد چیتا توسط گلاسمن (Glaesemann) و فرید برداشته شد [۵]. آنها با استفاده از معادله حالت نمائی ۶ (exponential-6) برای مدل کردن ملکول های کوچک (ملکول های گازی) دقت نتایج حاصل را بهبود بخشیدند.

در این مقاله قصد بر آن است که با به کارگیری مدل WK به بررسی تاثیر مدل های ترکیبی بر انتشار تراک در ماده منفجره PBX-9502 پرداخته شود. PBX-9502 از انواع مواد منفجره چسبیده با پلاستیک (PBX) بوده و از ۹۵٪ ذرات ماده منفجره TATB به همراه ۵٪ چسب پلیمری Kel-F800 تشکیل و تا نزدیکی بیشینه چگالی ممکن فشرده شده است. این ماده منفجره به طور قابل توجهی به آغازش های تصادفی غیرحساس بوده و از این رو موضوع تحقیقات بسیاری قرار گرفته است.

معادلات حاکم در تئوری WK

در تئوری WK با استفاده از معادلات اولر واکنشی پایای دوبعدی به تحلیل تراک کروی پایا با واگرایی کم، در راستای محور یک خرج استوانه ای پرداخته می شود. در این تئوری، انبساط شعاعی به صورت یک جمله منبع در سمت راست معادله یک بعدی پیوستگی ظاهر می شود. این معادلات بر مبنای مولفه ی محوری x عبارتند از [۱]:

$$u_x = \psi/\eta \quad (1-1)$$

$$\rho_x = -(\rho/u)(u_x + 2\omega_r) \quad (2-1)$$

$$p_x = -uu_x/v \quad (3-1)$$

$$\lambda_x = \mathfrak{R}/u \quad (4-1)$$

معادله اول از ترکیب معادلات بقای انرژی، مومنتوم و جرم حاصل شده و به معادله اصلی مشهور است. معادلات دیگر به ترتیب بیانگر بقای جرم، بقای مومنتوم و بقای گونه ها می باشند. در معادلات فوق $u, \rho, p, v, \mathfrak{R}$ و

یک مدل ترکیبی (Constitutive Model) از سه قسمت: معادله حالت واکنشگرها، معادله حالت محصولات و نرخ واکنش تشکیل شده است. مقاله حاضر با استفاده از مدل شبه یک بعدی وود (Wood) و کرک وود (Kirkwood)، مدل WK، به بررسی عددی تاثیر مدل های ترکیبی بر انتشار تراک خمیده در ماده منفجره PBX-9502 می پردازد. در مقاله حاضر سه مدل ترکیبی مختلف مورد بررسی و مقایسه قرار گرفته اند که نتایج به دست آمده از دقت بیشتر مدل تارور (Tarver) و همکاران حکایت می کند. مطالعه حاضر نشان می دهد که دقت معادلات حالت و نرخ سوزش به کار گرفته شده، نحوه ی کالیبره کردن آنها و همچنین نزدیکی قوانین مخلوط انتخابی به فیزیک مساله مورد مطالعه در دقت نتایج تاثیر دارند.

واژه های کلیدی: مدل WK - مدل ترکیبی - نرخ سوزش - معادله حالت - شعاع انحنای تراک

مقدمه

در سال ۱۹۵۴ وود و کرک وود [۱] به منظور بررسی تاثیر انحنای جبهه تراک (Detonation) بر سرعت انتشار آن، یک تئوری سینتیکی پایای دوبعدی ارائه دادند، که در آن متغیرهای جریان نظیر چگالی، فشار، سرعت ذره و ... به شعاع انحنای جبهه تراک R_c ربط داده می شد. در این تئوری معادلات اولر واکنشی پایای دوبعدی در راستای محور یک خرج استوانه ای ساده شده و به یک دسته معادلات دیفرانسیلی معمولی تبدیل می شوند. مطالعه صفحه ی فاز معادلات حاکم نشان می دهد که به هنگام انتشار تراک به صورت خوداتکا حل موجود از یک نقطه بحرانی زینی که یک نقطه صوتی (Sonic Locus) نیز می باشد عبور می کند. از این رو به این گونه مسائل، مسائل مقدار ویژه نیز گفته می شود [۲].

برای حل معادلات اولر واکنشی به روابطی برای تعیین معادله حالت مواد منفجره (فاز جامد)، معادله حالت محصولات تراک (فاز گاز) و معادلات مربوط به نرخ سوزش نیاز می باشد. همچنین به روابطی برای تعیین چگونگی ارتباط خواص محصولات و خواص ماده منفجره در یک سلول محاسباتی مخلوط نیاز می باشد. به این روابط قوانین مخلوط (Mixture Rules) گفته می شود. به مجموع روابط فوق در اینجا مدل ترکیبی اطلاق می شود.

در سال ۱۹۹۷، فرید (Fried) و همکاران [۲] مدل WK را به عنوان مدل سینتیکی اصلی به ویرایش جدید کد چیتا (CHEETAH 2.0) اضافه کرده و به موفقیتی نسبی در شبیه سازی تراک در مواد منفجره غیرایده آل دست یافتند. در این کد از معادله حالت BKW (Becker, Kistiakowski, Wilson) و (Jacobs, Cowperthwaite, Zwissler) JCZ برای محصولات گازی انفجار و از معادله حالت مرناقان (Murnaghan) برای مواد منفجره و محصولات جامد استفاده می شود.

۱- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک

۲- دانشیار مهندسی مکانیک، ۸۲۸۸۳۳۵۲، Kiumars@modares.ac.ir

(نویسنده مخاطب)

۳- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک

بود. با توجه به معادله (1-1) دیده می‌شود که برای جلوگیری از تکین شدن معادلات در مکان صوتی پارامتر ψ نیز باید در این نقطه برابر صفر باشد. بنابراین برای انتشار تراک پایا با یک شعاع انحنای خاص، سرعت مورد قبول $D = D^*$ سرعتی است که با استفاده از آن معادلات غیرخطی (6) (حل‌های صوتی)، به‌طور همزمان برابر صفر شوند. این حل اولین دسته از حل‌های ممکن می‌باشد.

$$\psi(\lambda, D) = \eta(\lambda, D) = 0 \quad (6)$$

به این شرط، شرط CJ سینتیکی (Kinetic CJ Condition) اطلاق می‌شود [2]. نقطه‌ای که در آن پارامترهای صوتی و تولیدفشار با هم صفر می‌شوند، شرط مرزی انتهایی مساله می‌باشد. در حل دیگر معادلات η, WK هرگز صفر نمی‌شود. این حل به تراک بیش‌رانده (Overdriven Detonation) مربوط می‌شود. در این حل فشار، از نقطه‌ای که $\psi < 0$ می‌شود (در تراک بیش‌رانده η در طول ناحیه واکنش همیشه بزرگتر از صفر می‌باشد) با افزایش فاصله زیاد می‌شود. این موضوع با مراجعه به معادلات (1) به وضوح مشاهده می‌شود. افزایش فشار رخ داده در ناحیه واکنش همانند وجود یک پیستون متحرک در پشت تراک عمل کرده و باعث تقویت بیشتر جبهه تراک می‌شود. اگر $\eta = 0$ و $\psi \neq 0$ ، مخرج کسر در معادله (1-1) صفر شده و به اصطلاح معادلات نامحدود می‌شوند. در این صورت انتشار تراک پایا با سرعت D مورد نظر، امکان پذیر نخواهد بود. در حل‌های ذکر شده تنها در حل‌های صوتی، $D = D^*$ است که با افزایش x به سمت بی‌نهایت، فشار به سمت صفر میل می‌کند.

معادله حالت و قوانین مخلوط

مواد منفجره و محصولات انفجار توسط دو معادله حالت مجزا توصیف می‌شوند. با توجه به اینکه در ناحیه واکنش، مخلوطی از مواد اولیه و محصولات به‌طور هم زمان حضور دارند. انرژی داخلی و حجم مخصوص این مخلوط از قوانین مخلوط زیر به‌دست می‌آیند:

$$e(v, p, \lambda) = (1 - \lambda)e_e(v_e, p_e, \lambda) + \lambda e_p(v_p, p_p, \lambda) \quad (7)$$

$$v = (1 - \lambda)v_e + \lambda v_p \quad (8)$$

با استفاده از قانون مشتقات زنجیره‌ای، مشتقات انرژی به‌صورت زیر نوشته می‌شوند. در این روابط از فرض تعادل مکانیکی یا به عبارت بهتر تعادل فشاری یعنی $p = p_e = p_p$ که یکی از قوانین مخلوط متداول در حوزه‌ی مواد شدیدالانفجار می‌باشد، استفاده شده است.

$$\frac{\partial e}{\partial v} = (1 - \lambda) \frac{\partial e_e}{\partial v_e} \frac{\partial v_e}{\partial v} + \lambda \frac{\partial e_p}{\partial v_p} \frac{\partial v_p}{\partial v} \quad (9)$$

$$\frac{\partial e}{\partial p} = (1 - \lambda) \left(\frac{\partial e_e}{\partial v_e} \frac{\partial v_e}{\partial p} + \frac{\partial e_e}{\partial p} \right) + \lambda \left(\frac{\partial e_p}{\partial v_p} \frac{\partial v_p}{\partial p} + \frac{\partial e_p}{\partial p} \right) \quad (10)$$

$$\frac{\partial e}{\partial \lambda} = (1 - \lambda) \left(\frac{\partial e_e}{\partial v_e} \frac{\partial v_e}{\partial \lambda} \right) + \lambda \left(\frac{\partial e_p}{\partial v_p} \frac{\partial v_p}{\partial \lambda} \right) - (e_e - e_p) \quad (11)$$

مشتقات فوق به دو کمیت v_e و v_p وابسته می‌باشند. برای کاهش این وابستگی، به یک حجم مخصوص و در نهایت کاهش تعداد مجهولات مساله، کمیت Φ به‌صورت زیر تعریف می‌شود [6]:

$$\Phi = \frac{v_e}{v_p} \quad (12)$$

کمیت Φ تنها تابعی از v و λ فرض می‌شود. با ترکیب معادلات (8) و (12) روابط زیر برای کمیت‌های v_e و v_p به‌دست می‌آید:

ω به‌ترتیب بیانگر سرعت محوری، فشار، چگالی، حجم مخصوص، کسر جرمی محصولات یا متغیر پیشرفت واکنش، نرخ واکنش و نرخ انبساط شعاعی (معرف واگرایی جریان) می‌باشند. دو پارامتر ψ و η پارامتر تولید فشار (Pressure Production Parameter) و پارامتر صوتی (Sonic Parameter) نامیده شده و به‌صورت زیر معرفی می‌شوند. در این معادلات c سرعت صوت محلی می‌باشد.

$$\eta = 1 - u^2/c^2 \quad (2)$$

$$\psi = \sigma \mathfrak{R} - 2\omega_p \quad (3)$$

$$\sigma = (\partial p / \partial \lambda)_{E,v} / \rho c^2 = -(e_\lambda / e_x) / \rho c^2 \quad (4)$$

$$c^2 = v^2 (p + e_x) / e_p \quad (5)$$

هنگامی که $\eta > 0$ است، جریان نسبت به موج ضربه‌ای مادون صوت بوده و ارتباط با جبهه تراک امکان پذیر است. اما هنگامی که $\eta < 0$ باشد، جریان نسبت به موج ضربه‌ای مافوق صوت بوده و ارتباط با جبهه تراک امکان پذیر نخواهد بود.

پارامتر تولید فشار، در حقیقت بیانگر رقابت مابین تولید فشار حاصل از واکنش‌های شیمیایی گرمازا و اتلاف فشار در اثر واکنش‌های گرماگیر و یا انبساط شعاعی می‌باشد. به‌طوری که اگر $\psi > 0$ باشد، فشار تولیدی حاصل از واکنش‌های شیمیایی (جمله اول سمت راست در رابطه (3)) نسبت به کاهش فشار در حین انبساط شعاعی (جمله دوم سمت راست در رابطه (3)) بیشتر خواهد بود. اما هنگامی که $\psi < 0$ است یک اتلاف فشار در اثر واکنش‌های کاهش دهنده فشار و یا در اثر انبساط شعاعی به وجود می‌آید [2]. جمله $\sigma \mathfrak{R}$ در رابطه (3) ترمیسیتی (Thermicity) یا ترمیسیتی محصولات نامیده شده و تغییرات فشار در اثر انجام واکنش را نشان می‌دهد. علامت این جمله به علامت ضریب بدون بعد حرارتی σ ، و جهت واکنش (علامت \mathfrak{R}) وابسته می‌باشد. در این تئوری نرخ انبساط شعاعی مورد استفاده با توجه به مدل پیشنه‌ادی وود و کرک‌وود از رابطه $\omega(x) = (D - u(x)) / R_c$ به‌دست می‌آید. مشتقات پاره‌ای موجود در روابط 4 و 5 نیز با استفاده از معادله حالت مخلوط محاسبه می‌شوند.

برای حل کامل میدان جریان در تئوری حاضر، با توجه به مدل انبساط شعاعی در نظر گرفته شده، مجهول‌های $u, \rho_e, \rho_p, \rho, \psi_e, \psi_p, e_e, e_p, \lambda, D, \mathfrak{R}$ وجود دارند. زیر نویس‌های e و p به‌ترتیب نشانگر ماده‌ی منفجره و محصولات انفجار می‌باشند. برای محاسبه‌ی این متغیرها، معادلات فوق به همراه معادله حالت مواد منفجره $e_e(\rho_e, p_e)$ معادله حالت محصولات تراک $e_p(\rho_p, p_p)$ معادلات مربوط به نرخ سوزش $\mathfrak{R} = d\lambda/dt = \mathfrak{R}(p, \lambda, \dots)$ و قوانین مخلوط حل می‌شوند.

حل معادلات WK

برای به‌دست آوردن خواص جریان در پشت جبهه‌ی موج تراک، از معادلات WK در ناحیه بین جبهه‌ی موج (شرط مرزی ابتدایی) و مکان صوتی (جایی که $u=c$ می‌باشد) انتگرال‌گیری می‌شود. از این‌رو مساله حاضر جزء مسائل مقدار مرزی دو نقطه‌ای قرار می‌گیرد. متغیرهای حالت اولیه (شرط مرزی ابتدایی) برای معادلات WK با به‌دست آوردن نقطه تقاطع خط رایلی (Rayleigh) و منحنی هوگونویوت (Hugoniot) مواد منفجره (نقطه فون نیومن (von Neumann))، به شرط مشخص بودن سرعت موج ضربه‌ای، به‌دست می‌آیند. به‌علت آنکه سرعت تراک در قدم اول معلوم نمی‌باشد، روش‌های موجود بر اساس الگوریتم تکرار شوتینگ عمل می‌کنند. با توجه به مقدار سرعت تراک انتخابی، معادلات WK دارای سه حل ممکن می‌باشند. در مکان صوتی، یعنی جایی که $u=c$ است، پارامتر صوتی، η برابر صفر خواهد

$$v_e = \frac{v\Phi}{\lambda + (1-\lambda)\Phi} \quad (13)$$

$$v_p = \frac{v}{\lambda + (1-\lambda)\Phi} \quad (14)$$

اولین نرخ رشد (رشد آهسته) نیز زمانی که λ از کمیت λ_{G1max} بیشتر شود برابر صفر قرار داده می شود. دومین نرخ رشد (رشد سریع) هم تا زمانی که λ کمتر از λ_{G2min} است برابر صفر فرض می شود. این مقادیر به صورت تجربی به دست می آیند.

$$\mathfrak{R} = I(1-\lambda)^b \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^x + G_1(1-\lambda)^c \lambda^d p^y + G_2(1-\lambda)^e \lambda^g p^z \quad (19)$$

$0(\lambda) \lambda_{G1max}$ $0(\lambda) \lambda_{G2min}$

اگر مدل آغازش و رشد برای شبیه سازی انتشار موج تراک استفاده شود، جمله های فوق به صورت زیر تعبیر می شوند: جمله اول بیانگر آغازش در ماده منفجره در اثر تراکم حاصل از عبور موج ضربه ای پیشتاز و تشکیل نقاط داغ به هنگام انقباض حفره ها می باشد. جمله دوم، تشکیل سریع محصولات گازی اصلی واکنش CO_2 ، N_2 ، H_2O ، CO و غیره) و متعاقب آن، انبساط و به تعادل رسیدن آنها را مدل می کند. جمله سوم نیز تشکیل ذرات کربن جامد به شکل الماس، گرافیت و یا کربن بی شکل را توصیف می نماید.

در شکل های ۱ و ۲ رفتار نرخ واکنش آغازش و رشد و متغیر پیشرفت واکنش در طول ناحیه واکنش برای تراکی که با سرعت D_{CJ} در ماده منفجره PBX-9502 منتشر می شود (تراکی که انحنای آن صفر است) رسم شده است. در این شکل ها از ثوابت تجربی موجود در جدول های ۱ و ۲ استفاده شده است.

جدول ۱- ضرایب معادله حالت JWL برای ماده منفجره PBX-9502 [۸].

ضرایب JWL ماده منفجره						
ρ_0 (gr/cc)	A (GPa)	B (GPa)	R_1	R_2	ω	C_v (GPa/K)
۱/۸۹۵	۶۳۲۰۷	-۶/۰۲۰۶	۱۱/۳	۱/۱۳	۰/۸۹۳۸	۲/۴۸۷E-۳

ضرایب JWL محصولات انفجار						
E_0 (GPa)	A (GPa)	B (GPa)	R_1	R_2	ω	C_v (GPa/K)
۷/۱۵۸	۱۳۶۱۷۷	۷۱/۹۹	۶/۲	۲/۲	۰/۵	۱/۰E-۳

جدول ۲- ضرایب نرخ سوزش آغازش و رشد برای ماده منفجره

[۸] PBX-9502

ضرایب نرخ آغازش				
$I(\mu s^{-1})$	a	b	x	λ_{igmax}
۴/۰E+۶	۰/۲۱۴	۰/۶۶۷	۷/۰	۰/۰۲۵

ضرایب نرخ رشد اول				
G_1 (GPa ^۲ μs ^{-۱})	c	d	y	λ_{G1max}
۱۱۰۰/۰E-۴	۰/۶۶۷	۱/۰	۲/۰	۰/۸

ضرایب نرخ رشد دوم				
G_2 (GPa ^۱ μs ^{-۱})	e	g	z	λ_{G2min}
۳۰/۰E-۲	۰/۶۶۷	۰/۶۶۷	۱/۰	۰/۸

در مدل ترکیبی سوم (کد چیتا [۲]) از مدل WK به همراه معادله حالت مرنافان (Murnaghan) برای مواد جامد و معادله حالت BKW برای محصولات انفجار استفاده می شود. همچنین نرخ سوزش نیز از رابطه (۱۶)، با توان فشار $n=2$ محاسبه می شود. ثوابت نرخ سوزش مورد استفاده در این رابطه در جدول ۳ آورده شده اند. باید توجه داشت که در معادلات حالت پلی تروپیک و JWL، نیازی به مشخص بودن گونه های محصولات نمی باشد (معادلات حالت بدون شیمی صریح) اما در معادله حالت BKW باید گونه های محصولات مشخص باشند. این رو در جدول ۳ گونه هایی که در طی فرآیند واکنش تاثیر گذار می باشند (واکنش های کند)، معرفی شده و دیگر گونه ها در تعادل ترموشیمیایی فرض می شوند.

با توجه به فشار بسیار زیاد مخلوط واکنشی در طول ناحیه ی واکنش (که حتی در انتهای ناحیه نیز به چند ده گیگا پاسکال می رسد)، می توان با دقت قابل قبولی مقدار Φ را برابر $\Phi=1$ فرض کرد [۶]. در این صورت قانون مخلوط مورد استفاده برای محاسبه ی حجم مخصوص مخلوط (رابطه (۸)) به صورت $v = v_e = v_p$ ساده می شود. معادله حالت مورد استفاده با قوانین مخلوط حاضر به شکل $e(p, v)$ می باشد. شکل کامل تر معادله حالت به صورت $e(p, v, T)$ می باشد. به هنگام استفاده از این معادله حالت در نظر گرفتن فرض تعادل دمایی $T = T_e(v_e, p) = T_p(v_p, p)$ به جای فرض $\Phi=1$ ، مناسب تر می باشد [۶]. در این حالت پس از حل معادلات و به دست آوردن فشار و حجم مخصوص کل در هر گام، با استفاده از یک معادله حالت وابسته به دما به شکل $p = p(\rho, T)$ و $p = p(\rho, T)$ انتخاب یک الگوریتم تکرار می توان حجم مخصوص واکنش گر ها و محصولات و همچنین دما را نیز به دست آورد.

معرفی مدل های ترکیبی حاضر

در مقاله حاضر سه مدل ترکیبی مختلف مورد بررسی قرار گرفته اند. در مدل اول از معادله حالت پلی تروپیک (رابطه (۱۵)) برای توصیف ماده اولیه و محصولات انفجار استفاده می شود. نرخ سوزش (نرخ واکنش) انتخابی نیز یک رابطه وابسته به فشار (رابطه (۸)) می باشد.

$$e = pv/(\gamma-1) - \lambda q \quad (15)$$

$$\mathfrak{R} = G(1-\lambda)p^n \quad (16)$$

در معادلات فوق q و G بیانگر گرمای حاصل از انفجار و ثابت نرخ سوزش می باشند. در این مدل فشار و چگالی ماده منفجره و محصولات انفجار برابر فرض می شوند.

در مدل دوم (مدل تارور و همکاران [۷]) از معادله حالت JWL (Jones, Wilkins, Lee) برای هردو مواد اولیه و محصولات انفجار در کنار نرخ سوزش آغازش و رشد (Ignition and Growth) استفاده شده است. همچنین فرض می شود ماده منفجره و محصولات انفجار در تعادل فشاری و دمایی بوده و انرژی داخلی مخصوص و حجم مخصوص مخلوط به ترتیب، از قوانین مخلوط (۷) و (۸) به دست می آیند.

معادله حالت JWL که یکی از پرکاربردترین نوع معادلات حالت برای محصولات انفجار محسوب می شود به صورت معادله های (۱۷) و (۱۸) بیان می شود. در این معادله حالت پارامترهای A, B, R_1, R_2 و ω مقادیر ثابت تجربی می باشند.

$$e = A \left[\frac{v_0}{R_1} - \frac{v}{\omega} \right] \exp \left(-R_1 \frac{v}{v_0} \right) + B \left[\frac{v_0}{R_2} - \frac{v}{\omega} \right] \exp \left(-R_2 \frac{v}{v_0} \right) + p \frac{v}{\omega} \quad (17)$$

$$p = A \exp \left(-R_1 \frac{v}{v_0} \right) + B \exp \left(-R_2 \frac{v}{v_0} \right) + \frac{\omega v_0 c_v}{v} T \quad (18)$$

نرخ سوزش آغازش و رشد نیز به صورت رابطه (۱۹) معرفی می شود. در این رابطه $G_1, G_2, a, b, c, d, e, g, x, y$ و z کمیت های ثابت می باشند. کمیت a یک تراکم بحرانی بوده که برای جلوگیری از آغازش تا قبل از ایجاد درجه معینی از تراکم (یا یک فشار ورودی مشخص)، به کار می رود. نرخ آغازش زمانی که λ از کمیت λ_{igmax} بیشتر شود برابر صفر قرار داده می شود.

معادله حالت مرناقان که در رابطه (۲۰) آورده شده است، از دقت خوبی در توصیف مواد منفجره جامد برخوردار بوده و شکل نسبتاً ساده‌ای نیز دارد.

$$p(v) = \frac{\beta_0}{\beta'_0} \left(\left(\frac{v_0}{v} \right)^{\beta_0} - 1 \right) \quad (20)$$

در این معادله فرض می‌شود که مدول بالک یک جسم جامد متراکم شده دارای رابطه‌ای خطی با فشار به شکل $\beta = \beta_0 + \beta'_0 p$ می‌باشد. در این رابطه β مدول بالک، β_0 مدول بالک هم دما، و β'_0 مشتق مدول بالک نسبت به فشار در شرایط محیط می‌باشند. معادله حالت مرناقان رابطه‌ای مابین فشار و حجم مخصوص (یا حجم مولی) ارائه می‌کند. ثوابت مورد استفاده در این معادله حالت برای TATB و Kel-F800، که مواد تشکیل دهنده‌ی PBX-9502 می‌باشند، در جدول ۴ آورده شده‌اند.

جدول ۳- محصولات موثر سینتیکی برای PBX-9502 [۳].

واکنشگرها	محصولاتی که به صورت سینتیکی کنترل می‌شوند.	$G (\mu s^{-1} GPa^{-2})$
TATB	N ₂ , H ₂ O, CO ₂ , C	۰/۰۶
KEL-F	C, CHF ₃ , F ₂ , Cl	۰/۰۱

جدول ۴- پارامترهای مورد استفاده در معادله حالت مرناقان [۳].

ماده	V_0 (cc/mol)	β_0 (GPa)	β'_0
TATB	۱۳۳/۲۸	۱۶/۲۹۰	۵/۷۲
KEL-F	۲۰۴/۶۹	۶/۲۸۶	۵/۴۴

از طرفی معادله حالت BKW (رابطه ۲۱) نیز یکی از متداول‌ترین، معادلات حالت برای مواد گازی می‌باشد. در این رابطه R_{um} ثابت جهانی گازها و V_g حجم مولی محصولات گازی (برابر با تفاضل بین حجم کل محصولات و حجم محصولات جامد تقسیم بر تعداد مول گونه‌های گازی، n_g) می‌باشند. همچنین x به صورت زیر تعریف می‌شود [۳]:

$$\frac{pV_g}{R_{um}T} = 1 + x \exp(\beta x) = F(x) \quad (21)$$

$$x = \frac{K}{V_g (T + \theta)^\alpha} \quad (22)$$

$$K = \kappa \sum x_i k_i$$

پارامترهای $\theta, \kappa, \beta, \alpha$ و مقادیر ثابت تجربی می‌باشند. x_i ، کسر مولی و k_i ، کوالیوم (Covolume) هندسی گونه گازی i ام محصولات انفجار می‌باشند. کوالیوم هندسی بیان کننده حجم اشغال شده توسط یک مولکول به هنگام چرخش به دور مرکز جرم خود (بر حسب A^3) ضربدر $۱۰/۴۶$ می‌باشد. در مرجع ۳ مقادیر $\theta, \kappa, \beta, \alpha$ به ترتیب برابر $۳۸۲۶/۷۱, ۰/۵۲۰۸, ۰/۴۰۱۸۶, ۱۲/۳۱۱۷۶$ در نظر گرفته می‌شوند. همچنین کوالیوم گونه‌های گازی مورد استفاده در معادله حالت BKW در جدول ۵ آورده شده است.

جدول ۵- کوالیوم گونه‌های گازی مورد استفاده در معادله BKW [۳].

گونه گازی	کوالیوم	گونه گازی	کوالیوم
CO ₂	۵۲۲/۹	H ₂ O	۲۲۶/۲
N ₂	۳۶۹/۳	C	۲۵۰/۰
CHF ₃	۱۱۵۲/۱	F ₂	۳۴۳/۰
Cl	۲۳۴/۰		

نتایج

در ادامه به مدل سازی انتشار تراک در ماده منفجره PBX-9502 با چگالی اولیه $\rho_0 = ۱/۸۹۵ \text{ gr/cc}$ ، گرمای حاصل از انفجار $q = ۳/۷۸۳ \text{ KJ/gr}$ و سرعت تراک $D_{Cl} = ۷/۷۸ \text{ mm}/\mu\text{s}$ پرداخته شده است. نتایج مطالعات حاضر در شکل‌های ۳ و ۴، در کنار نتایج تجربی ترسیم شده‌اند. نتایج شکل ۳ با استفاده از مدل ترکیبی اول به دست آمده‌اند. در این مطالعه علاوه بر بررسی دقت مدل WK به بررسی توان فشار در نرخ سوزش وابسته به فشار نیز پرداخته شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود برای ماده منفجره تحت مطالعه با افزایش توان فشار n از ۲ به ۲/۱۵ نتایج حاصل به نتایج تجربی نزدیک‌تر می‌شوند. به طوری که در شعاع انحنای ۱۲۸ mm درصد خطا از $۱/۷۵ -$ به $۰/۳۵ -$ کاهش می‌یابد. مطالب فوق نشان می‌دهند که مدل سوزش مورد استفاده در مدل WK تاثیر به سزایی بر دقت نتایج حاصل از این تئوری داشته و با انتخاب مدل سوزش دقیق‌تر و کالیبره کردن ضرایب ثابت آن می‌توان دقت نتایج به دست آورده را بهبود داد.

همچنین در شکل ۴، نمودار $D-\kappa$ (به طوری که κ انحنا جبهه تراک کروی و برابر $\kappa = 2/R_C$ می‌باشد) حاصل از مدل WK به کمک مدل ترکیبی دوم (مدل ترکیبی تارور و همکاران)، در کنار داده‌های تجربی به دست آمده از مرجع ۹ رسم شده‌اند. ضرایب تجربی مورد استفاده در نرخ سوزش آغازش و رشد و معادله حالت JWL در جداول ۱ و ۲ آورده شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود نمودار مدل WK از انطباق نسبتاً خوبی بر داده‌های تجربی برخوردار می‌باشد.

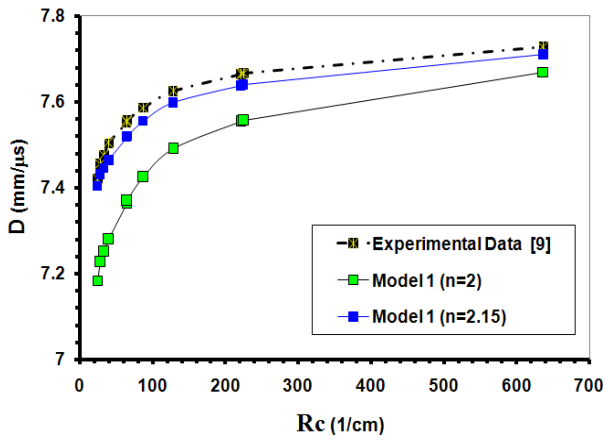
برای مقایسه نتایج به دست آمده برای PBX-9502 با دمای اولیه ۲۴°C ، نتایج حاصل از مدل‌های اول و دوم در کنار نتایج مرجع ۳ برای مدل سوم و همچنین نتایج تجربی در شکل ۵ آورده شده‌اند. این شکل نشان می‌دهد که انتخاب مدل آغازش و رشد و معادله حالت JWL در کار حاضر باعث دستیابی به نتایج دقیق‌تری شده است. همچنین با توجه به این شکل مشاهده می‌شود که نتایج به دست آمده در تحقیق حاضر از دقت بیشتری نسبت به نتایج کد چیتا برخوردار می‌باشند. برای مثال در شعاع انحنای ۶۵ mm سرعت انتشار تراک به دست آمده از مدل‌های فوق به ترتیب $۰/۲ -$ ، $۰/۷ -$ درصد انحراف از داده‌های تجربی را نشان می‌دهند.

برای بررسی تاثیر قوانین مخلوط در مطالعات حاضر به شبیه‌سازی تراک در ماده منفجره PBX-9502 با دمای اولیه ۷۵°C پرداخته می‌شود. این شبیه‌سازی یک بار با استفاده از فرض تعادل فشاری و دمایی و بار دیگر با فرض تعادل فشاری و فرض $v_p = v_e = v$ صورت گرفته است. نتایج به دست آمده به همراه نتایج تجربی موجود در شکل ۶ رسم شده‌اند. مقادیر ثابت مورد استفاده را می‌توان در جداول ۱ و ۲ مشاهده کرد با این تفاوت که برای PBX-9502 با دمای اولیه ۷۵°C مقادیر $B = ۴/۸۱۶۲ \text{ GPa}$ ، $E_0 = ۶/۹ \text{ GPa}$ و $G_1 = ۱۵۰ \text{ GPa}^{-2} \mu\text{s}^{-1}$ در نظر گرفته شده‌اند [۸].

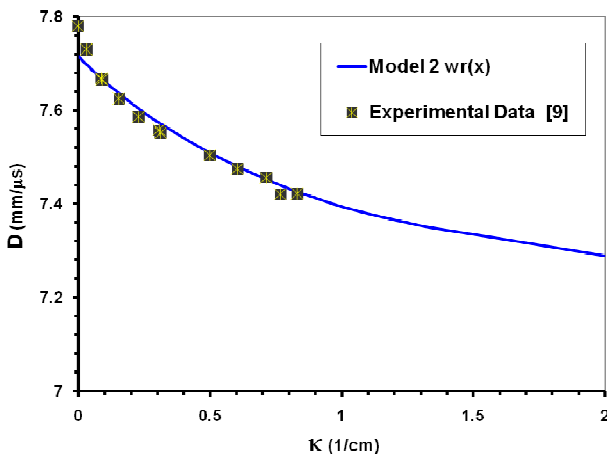
همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، اگرچه هیچ کدام از نمودارهای به دست آمده تطابق کاملی با نتایج تجربی ندارند، اما به صورت دو منحنی حدی که نتایج تجربی را در بر گرفته‌اند عمل می‌نمایند. این شکل، تاثیر گذاری قوانین مخلوط بر نتایج حاصل از مدل WK را به خوبی نشان می‌دهد. به نظر می‌رسد که برای مساله حاضر استفاده از فرض تعادل دمایی در κ های کوچکتر و فرض $v_p = v_e = v$ در κ های بزرگتر مناسب‌تر می‌باشد.

نتیجه‌گیری و جمع بندی

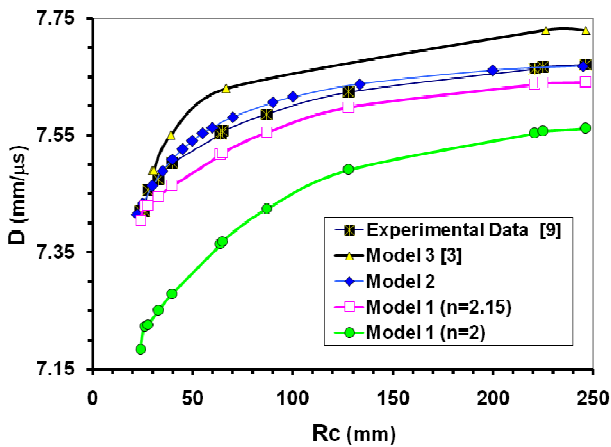
همان‌طور که ملاحظه شد استفاده از معادله حالت JWL و نرخ سوزش آغازش و رشد، باعث بهبود در جواب‌های به دست آمده شده به طوری که نتایج تحقیق حاضر در مقایسه با کد چیتا از دقت بیشتری برخوردار



شکل ۳- نمودار $D-R_c$ برای ماده منفجره PBX-9502 با دمای اولیه 24°C به کمک مدل ترکیبی اول

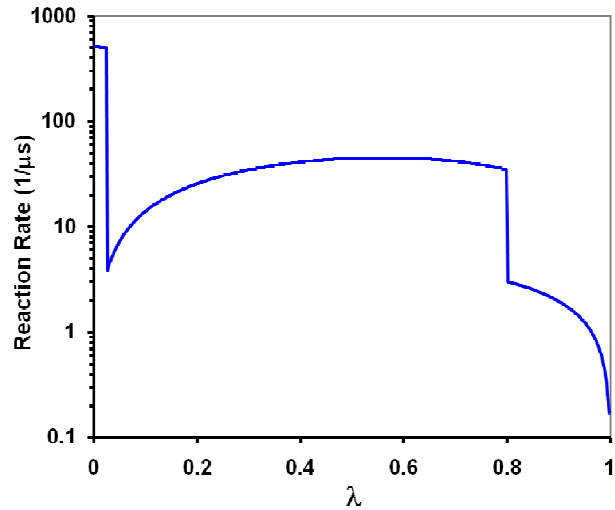


شکل ۴- نمودار $D-R_c$ برای ماده منفجره PBX-9502 با دمای اولیه 24°C به کمک مدل ترکیبی تارور و همکاران

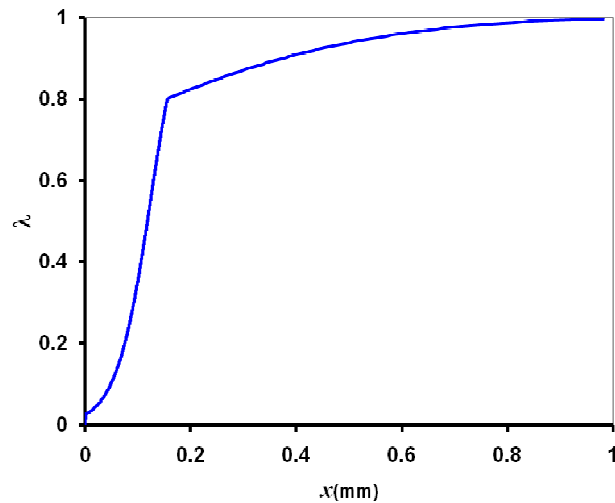


شکل ۵- نمودار $D-R_c$ برای ماده منفجره PBX-9502 با دمای اولیه 24°C مقایسه نتایج حاضر با نتایج کد چیتا

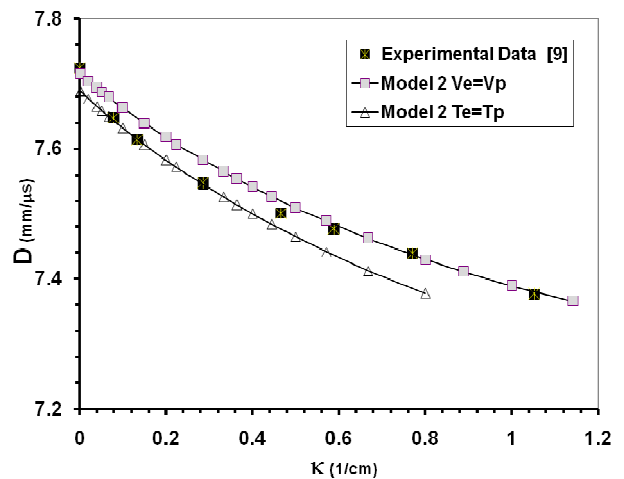
می‌باشند. اما باید توجه داشت که استفاده از معادله حالت JWL و نرخ سوزش آغازش و رشد به علت تعداد زیاد ضرایب تجربی آنها و همچنین پیچیده تر بودن محاسبه مشتقات تحلیلی، باید با دقت خاصی همراه باشد. کالیبراسون دقیق ضرایب تجربی مورد استفاده در معادله حالت و نرخ سوزش نیز از دیگر عوامل موثر در بهبود نتایج به دست آمده از مدل WK می‌باشند. در کار حاضر همچنین تاثیر توان جمله فشار در نرخ سوزش وابسته به فشار مورد بررسی قرار گرفت و نشان داده شد که می‌توان با دقت در انتخاب آن به نتایج بسیار بهتری دست یافت. در انتها نیز با بررسی قوانین مخلوط مورد استفاده مشاهده شد که برای نیل به نتایج بهتر انتخاب این روابط باید با حساسیت بیشتری همراه باشد.



شکل ۱- نرخ واکنش بر حسب متغیر پیشرفت واکنش در مدل آغازش و رشد، برای انتشار تراک تخت در ماده منفجره PBX-9502.



شکل ۲- توزیع متغیر پیشرفت واکنش در طول ناحیه واکنش در مدل آغازش و رشد، برای انتشار تراک تخت در ماده منفجره PBX-9502.



شکل ۶- نمودار $D-K$ برای ماده منفجره PBX-9502 با دمای اولیه 75°C به کمک مدل ترکیبی تارور و همکاران، با دو قانون مخلوط مختلف

مراجع

1. Wood W.W., and Kirkwood J.G., Diameter effect in condensed explosives. The relation between velocity and radius of curvature of the detonation wave. *Journal of Chem. Phys.*, v. 22, 1954, pp. 1920–1924.
2. Fried L.E., Howard W.M., Souers P.C., and Haselman L., Adding kinetics and hydrodynamics to the CHEETAH thermochemical code. *Lawrence Livermore National Laboratory Report CA 94550*, 1997.
3. Howard W.M., Fried L.E., Souers P.C., and Haselman L., Kinetic modeling of non-Ideal explosives with CHEETAH. *Proceedings of the 11th International Detonation Symposium*, Snowmass, Colorado, 30 August-4 September, 1998, pp. 998–1006.
4. Lu, J.P., Evaluation of the thermochemical code-CHEETAH 2.0 for modeling explosives performance. *Weapons Systems Division, Aeronautical and Maritime Research laboratory, DSTO-TR-1199*, August, 2001.
5. Glaesemann K.R., Fried L.E., Improved Wood-Kirkwood detonation chemical kinetics. *Theor. Chem. Account*, v. 120, 2008, pp. 37-43.
6. Stewart, D.S., Yoo, S. and Davis, W.C., Equation of state for modeling the detonation reaction zone. *Proceedings of the 12th International Detonation Symposium*, San Diego, California, 11-16 August, 2002, pp. 624–634.
7. Tarver C.M., Hallquist J.O., and Erickson L.M., Modeling short-pulse duration shock initiation of solid explosives. *The 8th Symposium (International) on Detonation*, Albuquerque, New Mexico, 15-19 July, 1985, pp. 951–960.
8. Tarver, C.M. and McGuire, E.M., Reactive flow modeling of the interaction of TATB detonation waves with inert materials. *Proceedings of the 12th International Detonation Symposium*, San Diego, California, 11-16 August, 2002, pp. 641–650.
9. Souers, P.C., A library of prompt detonation reaction zone data. *Lawrence Livermore National Laboratory Report, UCRL-ID-130055*, Rev. 1, June, 1998.