

بکارگیری روش پتانسیل المان در محاسبه خواص تراک CJ در مواد شدیدالانفجار ایده آل

میثم بابا احمدی^۱ - کیومرث مظاهری^{۲*}

دانشگاه تربیت مدرس، بخش مهندسی مکانیک، آزمایشگاه دینامیک گازها، صندوق پستی ۳۱۱-۱۴۱۱۵
(kiumars@modares.ac.ir^۳)

چکیده

در کار حاضر پارامترهای تعادلی موج تراک در مواد شدیدالانفجار ایده آل تعیین شده‌اند. برای اولین بار از روش پتانسیل المان برای تعیین خواص تراک در محصولات تراک مواد شدیدالانفجار استفاده شده است. در روش پتانسیل المان، هر یک از اتم‌های هر عنصر بدون در نظر گرفتن اینکه در کدام مولکول یا فاز قرار دارد نقش یکسانی در کمینه کردن تابع انرژی آزاد گیبس محصولات دارند. در این روش به تعداد عناصر در ترکیب مخلوط انفجاری مورد بررسی مجهول وجود دارد، در حالی که در دیگر روشها تعداد مجهولات همان تعداد گونه‌های شیمیایی حاضر در محصولات می باشد. مزیت‌های اصلی استفاده از این روش حجم محاسباتی بسیار پایین آن و جلوگیری از منفی شدن کسر مولی گونه‌ها در مراحل عددی کمینه سازی انرژی آزاد گیبس محصولات می باشد. برای معادله حالت محصولات تراک مواد شدیدالانفجار در کار حاضر از معادله حالت BKW استفاده شده است. برای اطمینان از درستی عملکرد تحقیق انجام شده، نتایج بدست آمده با نتایج کد تعادلی CHEETAH و نتایج تجربی در دسترس، مقایسه شده‌اند. نتایج بدست آمده برای مواد شدیدالانفجار نشان دهنده تطابق بسیار خوب این نتایج با نتایج تجربی و نتایج مشابه کد CHEETAH می باشد.

واژه‌های کلیدی: تراک- ماده شدیدالانفجار- انرژی آزاد گیبس- روش پتانسیل المان- معادله حالت BKW

۱- مقدمه

مواد شدیدالانفجار^۳ - یا مواد منفجره - در دسته‌ای از مواد احتراق پذیر قرار می‌گیرند که در این گونه مواد، سوخت و اکسید کننده به‌طور پیش مخلوط در هر مولکول ماده منفجره وجود دارند. به طور کلی موج تراک^۴ از یک موج ضربه‌ای پیش‌تاز که با ناحیه واکنش خود به صورت جفت منتشر می‌شود، تشکیل شده است [۱]. با عبور موج ضربه‌ای، واکنش آغاز شده و تا انتهای ناحیه واکنش ادامه می‌یابد [۲]. با توجه به اهمیت تعیین پارامترهای تراک برای طراحی تجهیزات مرتبط، گسترش شیوه‌های محاسباتی و همچنین تهیه برنامه‌های کامپیوتری برای تعیین پارامترهای تراک، بسیار مورد توجه می‌باشد. در میان تئوری‌های موجود برای مدل سازی تراک پایا، تئوری CJ بیش از بقیه موارد مورد توجه قرار گرفته است. در این تئوری تراک یک فرایند یک بعدی پایا با ضخامت صفر در نظر گرفته می‌شود و فرض بر این است که محصولات پس از خروج از موج تراک در تعادل ترمو- شیمیایی می‌باشند [۳]. برای تعیین ترکیب محصولات تراک از محاسبات تعادلی استفاده می‌شود. برای این منظور قانون دوم ترمودینامیک به همراه معادلات بالانس عناصر مورد استفاده قرار می‌گیرند. قانون دوم ترمودینامیک بیانگر این است که در حالت تعادل شیمیایی انرژی آزاد گیبس محصولات که تابعی از کسر مولی محصولات است، کمترین مقدار ممکن را دارا خواهد بود. با توجه به غیر خطی بودن شدید معادلات حاکم (معادلات بقا، معادله حالت، معادلات مربوط به تعادل ترموشیمیایی و روابط مربوط به خواص ترموشیمیایی مواد حاصل از انفجار)، حل عددی این معادلات از پیچیدگی فراوانی برخوردار است. به این دلیل طی سالیان گذشته کدهای متعددی بوسیله مراکز تحقیقاتی شاخص دنیا توسعه داده شده‌اند. برای نخستین بار کوان و فیکت در سال ۱۹۵۴ معادلات حاکم بر تراک مواد شدیدالانفجار را با فرض تعادل

^۱ دانشجوی دکتری مکانیک-تبدیل انرژی، دانشگاه تربیت مدرس

^۲ دانشیار مهندسی مکانیک-تبدیل انرژی، دانشگاه تربیت مدرس

^۳ High Explosive (HE)

^۴ Detonation Wave



شیمیایی حل کردند. در دهه‌های گذشته کدهایی برای تعیین پارامترهای تعادلی در تراک مواد شدیدالانفجار و همچنین مخلوطهای گازی تهیه شده است. مدر^۱ در سومین سمپوزیوم تراک از کد BKW که با کمک فیکت^۲ بر روی کامپیوتر IBM704 اجرا می‌شده است، اسم برده است. ظاهراً این کد در سال ۱۹۵۶ تهیه شده است. این کد برای ۵ عنصر و ۱۵ گونه شیمیایی تهیه شده بود. پس از آن در سال ۱۹۶۱ کدی با قابلیت‌های مشابه با نام STRETCH BKEW برای کامپیوترهای IBM7030 تهیه شد. در سال‌های ۱۹۶۰ و ۱۹۷۰ نسخه‌های دیگری از کد BKW برای مواد شدیدالانفجار تهیه شدند. از مهمترین این کدها می‌توان به CHEETAH, TIGER, ARPEGE, RUBY اشاره کرد. شناخته شده‌ترین کدهای تعادلی برای محاسبه پارامترهای تراک مواد شدیدالانفجار، کدهای BKW و CHEETAH می‌باشند. کد BKW توسط مدر و با زبان برنامه‌نویسی فرترن و کد CHEETAH توسط فرید^۳ تهیه شده است. کد مدر تحت عنوان FORTRAN BKW در سال ۱۹۶۷ منتشر گردید. این کد بر مبنای کمینه‌سازی مستقیم تابع انرژی آزاد گیبس، با قید بقای عناصر، توسعه داده شده بود. در این کد برای حل معادلات غیر خطی حاصل از کمینه‌سازی از روش نزول ناگهانی^۴ وایت^۵ استفاده شده بود [۴]. این کد از معتبرترین کدهایی است که همچنان مورد استفاده محققین در بعضی مراکز می‌باشد. در این کد از معادله حالت BKW برای محصولات گازی و از معادله حالت Cowan برای گونه‌های جامد موجود در محصولات استفاده می‌شود. مشکل بزرگ این کد که در بسیاری از کدهای تعادلی وجود دارد نیاز به حدس اولیه دقیق می‌باشد. این مشکل بخصوص برای مواد شدید انفجار غیر ایده‌آل مسئله‌ساز می‌شود. در این حالت امکان واگرایی کد وجود دارد. تمام محاسبات تعادلی قبل از سال ۱۹۵۸ بر مبنای ثابت-های تعادل بوده است. با پیشرفت کامپیوتر و روش‌های عددی در این سال پیشنهاد استفاده از کمینه‌سازی مستقیم تابع انرژی آزاد گیبس توسط وایت، جوهانسون و دنتزیک^۶ ارائه شد. در سال‌های بعد محققان این زمینه علمی دو دسته شدند. دسته‌ای که با استفاده از روش ثابت تعادل، کدهای تعادلی را توسعه می‌دادند و دسته‌ای که از کمینه‌سازی مستقیم تابع انرژی آزاد گیبس استفاده می‌کردند. در حال حاضر روش ثابت‌های تعادل تقریباً برای کدهای کامپیوتری مورد استفاده قرار نمی‌گیرد. کد بسیار توانمند STANJAN، برای مخلوطهای گازی، در سال ۱۹۸۶ توسط رینولدز در دانشگاه استنفورد آمریکا بر مبنای روش پتانسیل المان توسط رینولدز تهیه شد. این کد قادر است که در مدت زمان بسیار کوتاه، جواب‌های بسیار دقیقی از پارامترهای تراک در مخلوطهای گازی ارائه کند. در این کد زمان حل و همچنین امکان رخ دادن خطاهای محاسباتی به طور چشمگیری نسبت به کدهای تعادلی قبلی کاهش یافته است. این امر باعث شده که استفاده از روش پتانسیل المان به عنوان یکی از توانمندترین روش‌ها در تعیین پارامترهای تعادلی تراک شناخته شود. از ابداع کنندگان روش پتانسیل المان می‌توان پاول و سارنر^۷ در سال ۱۹۵۹ را نام برد [۵]. روش رند^۸ که در سال‌های بعد توسط کلانز^۹ کلانز^۹ ارائه شد، در اصل بر اساس روش پتانسیل المان بوده است [۶]. در کار حاضر برای اولین بار از بکارگیری روش پتانسیل المان برای تعیین خواص تراک در محصولات تراک مواد شدید انفجار استفاده شده است.

۲- تعیین شرایط تعادل ترمو- شیمیایی با استفاده از روش پتانسیل المان

۲-۱- معادلات حاکم بر شرایط تعادل

قانون اول و قانون دوم ترمودینامیک به صورت روابط زیر می‌باشند [۱]:

$$\delta Q - pdV = dU$$

(۱)

1. Mader
2. Fickett
3. Fried
4. Steepest descent
5. White
6. White, Johnson, and Dantzig
7. Powell and Sarnar
8. RAND method
9. Clasen

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T} \quad (2)$$

انرژی آزاد گیبس به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$G_T = H_T - T S_T \quad (3)$$

با توجه به تعریف انرژی آزاد گیبس در رابطه (۱) و قانون اول ترمودینامیک و قانون دوم ترمودینامیک، رابطه زیر بدست می‌آید:

$$dU + pdV - TdS = (dG)_{T,p} \leq 0 \quad (4)$$

در یک فرایند برگشت ناپذیر در دما و فشار ثابت:

$$(dG)_{T,p} \leq 0 \quad (5)$$

رابطه بالا نشان می‌دهد که در یک سیستم در دما و فشار ثابت در یک فرایند برگشت ناپذیر، انرژی گیبس در حال کاهش می‌باشد تا به کمترین مقدار خود در حالت تعادل برسد. رابطه (۳) را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$G_T = RT(\psi + \ln p) \quad (6)$$

که ψ تنها تابعی از T می‌باشد. با ترکیب روابط بالا، انرژی گیبس در دما و فشار مشخص برای هر مخلوط گاز ایده‌آل از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$G = \Delta G_{mix} + G_T^o \quad (7)$$

$$G = RT \sum N_i (\psi_i + \ln p + \ln X_i) \quad (8)$$

کوچکترین تغییری در تعادل شیمیایی، باعث تغییر انرژی گیبس که تابعی از تمام متغیرهای مستقل سیستم می‌باشد، می‌شود [۵]. بنابراین، $G = G(p, T, N_i)$

$$dG = \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, N_i} dT + \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T, N_i} dP + \sum_i \left(\frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{p, T, N_i} dN_i \quad (9)$$

با استفاده از روابط ترمودینامیکی می‌توان به روابط زیر رسید [۵]:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p, N_i} dP = -S \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, N_i} dT = V \quad (11)$$

با جایگزاری دو رابطه بالا در رابطه (۹) بدست می‌آید:

$$dG = -S dT + V dP + \sum_i \left(\frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{p, T, N_i} dN_i \quad (12)$$

مشتق را پتانسیل شیمیایی (انرژی گیبس جزئی) گونه i ام (μ_i) می‌نامند که تابعی از T و P و بقیه N_i ها می‌باشد.

بنابراین می‌توان رابطه (۱۲) را به صورت زیر نشان داد:

$$dG = -S dT + V dp + \sum_i \mu_i dN_i \quad (13)$$

نسبت دادن پتانسیل شیمیایی به یک حالت مبنا بسیار سودمند می‌باشد. به عنوان مثال، رابطه (۱۲) در N_i های ثابت و دمای ثابت با انتگرال گیری از فشار ۱ تا P_i اتمسفر، به صورت زیر می‌باشد (بالا نویس ۰ نشانگر شرایط استاندارد می‌باشد):

$$G_T - G_T^0 = \int_1^{P_i} V dp \quad (14)$$

سپس با استفاده از معادله حالت گاز ایده‌ال به فرم زیر:

$$V = \frac{N_i RT}{P_i} \quad (15)$$

در نهایت رابطه زیر بدست می‌آید:

$$G_T - G_T^0 = N_i RT \ln p_i \quad (16)$$

با مشتق گیری از رابطه بالا نسبت به هر N_i بدست می‌آید:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln p_i \quad (17)$$

رابطه بالا معنای فیزیکی به تابع ψ می‌دهد و در یک دما و فشار مشخص رابطه (۱۳) به رابطه زیر تبدیل می‌شود:

$$G = \sum_i \mu_i N_i \quad (18)$$

و می‌توان رابطه (۸) را به صورت زیر بیان کرد:

$$G = \sum N_i (\mu_i^0 + RT \ln p_i) \quad (19)$$

که $\mu_i^0 / RT = \psi_i$ می‌باشد. در نتیجه رابطه (۱۹) را می‌توان برای یک گونه گازی به صورت زیر بیان کرد:

$$G = \sum N_i (\mu_i^0 + RT \ln p + RT \ln X_i) \quad (20)$$

برای گونه‌هایی که در فاز گازی قرار ندارند، رابطه (۱۲) به صورت زیر می‌باشد [۵]:

$$G = \sum N_i (\mu_i^0 + RT \ln X_i) \quad (21)$$

همانطور که دیده می‌شود، تفاوت رابطه (۲۱) حذف شدن ترم فشار از رابطه (۲۰) می‌باشد. این امر به این دلیل است که پتانسیل شیمیایی در فازهای جامد و مایع مستقل از فشار می‌باشد، بطوریکه در فازهای غیر از فاز گازی می‌توان گفت:

$$\mu_i = \mu_i^0 \quad (22)$$

و در نتیجه تغییرات فشار تاثیری بر روی کسر مولی گونه‌های موجود در فازهای غیر از فاز گازی (فازهای جامد و مایع) ندارد [۵].

۲-۲- مبانی تئوری پتانسیل المان

یکی از روشها برای کمی‌سازی انرژی گیبس، با در نظر گرفتن قید بقای عناصر، بکارگیری روش ضرایب لاگرانژ^۱ می‌باشد [۶]. قید بقای بقای تعداد عناصر را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\sum_{i=1}^S n_{ij} N_i = b_j \quad , \quad j = 1, \dots, a \quad , \quad i = 1, \dots, S \quad (23)$$

¹. Lagrange Multipliers Method



در این رابطه n_{ij} تعداد اتم‌های نوع j در گونه i ام است و b_j تعداد کل اتم‌های j ام در سیستم می‌باشد، a تعداد عناصر در ترکیب بوده و S تعداد گونه‌ها در ترکیب می‌باشد. حل شرایط تعادل در یک دما و فشار مشخص، به معنی پیدا کردن یک توزیع N_i است (هیچکدام از N_i ها نباید منفی باشند) که G را کمینه کنند. یکی از شیوه‌هایی که بطور وسیع در علوم و مهندسی برای کمینه‌سازی یک تابع چند متغیره با اعمال قیدهایی بکار می‌رود، روش ضرایب لاگرانژ است. ابتدا برای راحتی محاسبات $\tilde{\mu}_i$ به صورت زیر برای فاز گازی تعریف می‌شود:

$$\frac{\mu_i^o}{RT} + \ln p = \tilde{\mu}_i \quad (24)$$

برای فاز غیر گازی $\tilde{\mu}_i$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{\mu_i^o}{RT} = \tilde{\mu}_i \quad (25)$$

با استفاده از دو رابطه بالا، روابط (۱۹) و (۲۰) را می‌توان به صورت زیر در حالت کلی بازنویسی کرد:

$$\frac{G}{RT} = \sum_{i=1}^S N_i (\tilde{\mu}_i + \ln X_i) \quad (26)$$

می‌توان نشان داد:

$$d\left(\frac{G}{RT}\right) = \sum_{i=1}^S (\tilde{\mu}_i + \ln X_i) dN_i \quad (27)$$

در نهایت هدف ما کمینه کردن تابع G/RT می‌باشد. می‌توان نشان داد با صفر قرار دادن $d(G/RT)$ رابطه زیر بدست می‌آید [۷]:

$$\tilde{\mu}_i + \ln X_i - \sum_{j=1}^a \lambda_j n_{ij} = 0 \quad (28)$$

رابطه بالا برای یک گونه مشخص بدست آمده است. با توجه به این رابطه، برای گونه i ام:

$$X_i = \exp\left(-\tilde{\mu}_i + \sum_{j=1}^a \lambda_j n_{ij}\right) \quad (29)$$

رابطه (۲۹) بدست می‌آید که نتیجه اصلی روش پتانسیل المان است. این رابطه کسر مولی هر گونه شیمیایی را به مقدار پتانسیل شیمیایی آن گونه، آرایش اتمی و یک دسته ضرایب مجهول (ضرایب لاگرانژ)، مربوط می‌کند. هر یک از ضرایب λ_j به عنوان پتانسیل المان برای اتم j ام معرفی می‌شوند. نکته بسیار جالب در رابطه بالا این است که هر یک از اتم‌های هر عنصر بدون در نظر گرفتن اینکه در کدام مولکول یا فاز قرار دارد، نقش یکسانی در کمینه کردن تابع گیبس دارند [۶]. مقادیر پتانسیل المان‌ها با توجه به قید بقای عناصر که به صورت رابطه (۲۳) بیان شده است، بدست می‌آیند. بدین منظور رابطه (۲۳) به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$\sum_{i=1}^S n_{ij} N X_i = b_j, \quad j = 1, \dots, a \quad (30)$$

در رابطه (۳۰)، N مجموع تعداد مول در ترکیب می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$N = \frac{N_i}{X_i} \quad (31)$$

با استفاده از روابط بالا، یک دستگاه معادلات جبری غیر خطی شامل a معادله برای بدست آوردن a مجهول (ضرایب لاگرانژ یا همان پتانسیل المان‌ها) بدست می‌آید.

۲-۳- روش عددی بکار رفته برای محاسبه پتانسیل المان‌ها

برای بدست آوردن پتانسیل المان‌ها استفاده از قید بقای عناصر و واحد بودن مجموع کسر مولی گونه‌ها، به صورت زیر استفاده می‌شود [۴]:

$$X (= \sum_i X_i) = 1 \quad (32)$$

$$B_j \left(= \frac{b_j}{\sum_j b_j} \right) = B_j^0 \quad (33)$$

که در رابطه (۳۳):

$$b_j = \sum_i n_{ij} X_i \quad (34)$$

می‌باشد. مقدار B_j^0 با توجه به مقدار واکنش دهنده‌ها بدست می‌آید و بالانویس (0) نشان دهنده حالت اولیه می‌باشد و از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$B_j^0 = \frac{\sum_{i=1}^R n_{ij} X_i}{\sum_{j=1}^a \sum_{i=1}^R n_{ij} X_i} \quad (35)$$

$$\sum_{i=1}^a B_j^0 = 1 \quad (36)$$

در رابطه (۳۵)، R بیانگر تعداد واکنش دهنده‌ها می‌باشد. قید دیگر نیز، رابطه (۳۲) می‌باشد [۴]. با استفاده از قیدها به صورت بالا و با استفاده از روش نیوتن رافسن یک دستگاه معادلات خطی برای محاسبه پتانسیل‌المان‌ها بدست می‌آید [۷].

۳- تراک چاپمن - ژوگت

۳-۱- محاسبات ترمودینامیکی تراک

برای انجام محاسبات تعادلی لازم است انرژی آزاد گیبس، انرژی داخلی و آنترپی محصولات انفجار محاسبه شوند. محاسبات تعادلی محصولات مواد شدید انفجار نسبت به مواد گازی که از معادله حالت گاز ایده‌آل پیروی می‌کنند از پیچیدگی‌های بیشتری برخوردار است. از طرفی لازم است معادله حالت مناسب فشارهای بالا استفاده شود و از طرف دیگر بدلیل فشارهای بسیار بالا و اهمیت نیروهای بین مولکولی خواص ترمودینامیکی نیز باید برای این شرایط خاص محاسبه گردند. در کار حاضر برای محصولات گازی تراک از معادله حالت BKW و برای محصولات جامد (کربن جامد) از روش کد Cheetah [۸] استفاده شده است. اغلب جداول ترمودینامیکی برای گازهای ایده‌آل (فشارهای کم و دماهای بالا) تهیه شده‌اند. با توجه به اینکه معمولاً محصولات انفجار مواد شدید انفجار از معادله حالت گاز کامل پیروی نمی‌کنند، در محاسبه خواص ترمودینامیکی در این شرایط، ابتدا خواص برای حالت ایده‌آل محاسبه می‌شوند و سپس تاثیرات غیر کامل بودن به عنوان تصحیحاتی به خواص محاسبه شده اضافه می‌شوند [۹]. در این بخش بعد از معرفی معادلات حالت غیر ایده‌آل در فازهای جامد و گازی، تصحیحات لازم نسبت به حالت ایده‌آل ارائه می‌شوند. محصولات تراک شامل ترکیباتی در فازهای جامد و گاز می‌باشند. اگر H و h به ترتیب خواص مولی و خواص وابسته به جرم محصولات باشند رابطه حاکم بر این خواص به صورت رابطه (۳۷) قابل نمایش است که در آن زیرنویس g نشانگر محصولات گازی و زیرنویس s نشانگر محصولات جامد تراک است.

$$h = n_g H_g + n_s H_s \quad (37)$$

آنتالپی، آنترپی و دیگر خواص ترمودینامیکی محصولات تراک شدید انفجار را می‌توان با انتگرال گیری از معادلات ماکسول و جایگزاری پارامترها از معادلات حالت BKW بدست آورد [۵].

۳-۲- محاسبات ترمودینامیکی تراک در مواد شدید انفجار

۳-۲-۱- معادله حالت فاز گازی محصولات تراک مواد شدید انفجار

معادله حالت BKW به صورت رابطه (۳۸) بیان می‌شود [۹].

$$\frac{PV_g}{RT} = 1 + (X \times e^{\beta X}) = F(X) \quad (38)$$

که در رابطه بالا، X به صورت رابطه (۳۹) تعریف می‌شود.

$$X = \frac{\kappa K}{V_g \times (T + \theta)^\alpha} \quad (39)$$

در رابطه (۳۸)، V_g نشان دهنده حجم مولی محصولات گازی است که از رابطه (۴۰) بدست می‌آید و P نشانگر فشار (مگا بار)، T دما (کلوین) و R ثابت جهانی گازها است.

$$V_g = \frac{V_{TOT} - V_S}{n_g} \quad (40)$$

در رابطه (۴۰)، V_{TOT} حجم کل و V_S حجم گونه‌های جامد و n_g تعداد مول گونه‌های گازی می‌باشند. در روابط (۳۸) و (۳۹)، α مقادیر β و θ و K ضرایبی تجربی هستند که از مطابقت دادن^۱ معادله BKW با نتایج آزمایشگاهی بدست می‌آیند. در رابطه (۳۹) پارامتر κ ، Covolume کل محصولات نامیده می‌شود و با رابطه (۴۱) محاسبه می‌شود.

$$\kappa = \sum (X_i \times \kappa_i) \quad (41)$$

در رابطه (۴۱)، κ_i ، Covolume هندسی گونه شیمیایی نام است. این مقدار نشان دهنده حجم اشغال شده با واحد (m^3) توسط مولکول در حال چرخش هر گونه شیمیایی به دور مرکز جرمش ضربدر $10/46$ می‌باشد. عدد $10/46$ برای این افزوده شده که مقدار Covolume مولکول CO با مقدار ابتدایی‌اش که قبلاً استفاده می‌شده، تطابق یابد [۹].

۳-۲-۲- معادله حالت فاز جامد محصولات تراک مواد شدید الانفجار

در کار حاضر برای توصیف رفتار فاز غیرگازی از معادله حالت زیر استفاده شده است [۸].

$$V = V_0 + aT + bP \quad (42)$$

که P فشار برحسب اتمسفر، T دما بر حسب کلوین، V حجم مولی بر حسب cm^3/mol و V_0, a, b ضرایب تجربی می‌باشد. اندیسه‌های صفر بکار رفته در این بخش بیانگر مقدار خواص مورد نظر در شرایط استاندارد محیط می‌باشند.

۳-۳- تعیین کسر مولی و خواص محصولات در دما و فشار مشخص

الگوریتم بکار رفته برای تعیین کسر مولی و خواص محصولات در دما و فشار مشخص با استفاده از روش پتانسیل المان به شرح

زیر می‌باشد:

۱. ابتدا دما و فشار مشخص می‌شوند.

۲. به پتانسیل المان‌ها، مقدار اولیه داده می‌شود.

۳. مقادیر توابع ترمودینامیکی در دما و فشار مشخص شده، تعیین می‌شوند.

۴. با توجه به غیر ایده‌آل بودن معادله حالت بکار رفته برای محصولات انفجار، تصحیح‌سازی توابع ترمودینامیکی نسبت به معادله حالت گاز ایده‌آل صورت می‌گیرد.

۵. پس از تصحیح‌سازی توابع ترمودینامیکی در دما و فشار مشخص، کسر مولی محصولات تعیین می‌شوند.

۶. سپس با استفاده از روش نیوتن رافسن، به حل دستگاه معادلات خطی برای محاسبه المان پتانسیل‌های جدید پرداخته می‌شود.

۷. با استفاده از روش LU، روش عددی بکار رفته برای محاسبه پتانسیل المان‌ها، پتانسیل المان‌ها نهایی محاسبه می‌شوند.

۸. در پایان با مشخص شدن پتانسیل المان‌ها نهایی، کسر مولی نهایی و خواص محصولات محاسبه می‌شوند.

¹. Fitting

۳-۴- روش عددی محاسبه نقاط منحنی هوگونویوت

طبق تئوری ترمودینامیکی CJ، در نقطه CJ خط رایلی بر منحنی هوگونویوت مماس می‌باشد. در بین تمام خطوط رایلی که از نقطه مربوط به شرایط اولیه رسم شده و منحنی هوگونویوت را قطع می‌کنند، خطی که بر هوگونویوت مماس است، کمترین شیب را دارد. برای تعیین نقطه CJ از این خاصیت استفاده می‌شود. با توجه به اینکه روابط مربوط به خط رایلی و منحنی هوگونویوت برای حالت کلی معادله حالت روابط صریحی نمی‌باشند، روش کلی مورد استفاده برای تعیین نقطه CJ یک روش سعی و خطا می‌باشد. روش مورد استفاده شامل دو مرحله می‌باشد، تعیین نقاط روی منحنی هوگونویوت و تعیین نقطه‌ای از منحنی هوگونویوت که خط رایلی واصل به آن کمترین شیب را دارد (نقطه CJ). برای محاسبه یک نقطه از منحنی هوگونویوت معادله هوگونویوت زیر بایستی حل شود:

$$e - e_0 - \frac{1}{2}(P + P_0)(v_0 - v) = 0 \quad (43)$$

که متغیرهای با زیرنویس صفر مربوط به حالت قبل از انفجار و متغیرهای دیگر مربوط به حالت بعد از انفجار می‌باشند. e_0 مجموع انرژی داخلی و گرمای تشکیل ماده منفجره می‌باشد، که در کتابخانه مربوط به واکنشگرها موجود می‌باشد. v_0 حجم اولیه ماده منفجره و P_0 فشار اولیه می‌باشند. در حالت کلی برای محاسبه یک نقطه از منحنی هوگونویوت، ابتدا فشار نقطه انتخاب می‌شود. سپس با استفاده از یک تخمین برای دما، و با تکرار، دمایی که در معادله (۴۳) صدق می‌کند، تعیین می‌شود. فشار انتخاب شده و دمای محاسبه شده یک نقطه از منحنی هوگونویوت محصولات می‌باشد. می‌توان گفت که با مشخص شدن دما و فشار، کسر مولی محصولات و در نتیجه کلیه پارامترهای تعادلی شامل آنتالپی، آنتروپی، انرژی آزاد گیبس و ... تعیین می‌شود.

۴-۱-۱- اعتبار سنجی کار حاضر

در این قسمت به اعتبار سنجی کد تهیه شده بر مبنای روش پتانسیل المان برای تراک CJ در مواد شدید الانفجار پرداخته می‌شود. محاسبات مربوط به مقدار گونه‌ها، با توجه به عدم دسترسی به نتایج تجربی در این رابطه صورت نگرفته است. محاسبات مربوط به تراک علاوه بر برخی نتایج تجربی موجود با نتایج در دسترس کد CHEETAH نیز مقایسه شده‌اند. در تمامی محاسبات این بخش محصولات تراک ۱۷ گونه CHNO موجود در بانک اطلاعاتی BKWC کد CHEETAH می‌باشند. این گونه‌ها عبارت‌اند از: $C(s), CH_2O_2, C_2H_4, CH_3OH, CH_2O, C_2H_6, CO, CO_2, CH_4, H_2, H_2O, H_3N, N_2, NO, NO_2, OH, O_2$

۴-۱-۱-۱- محاسبات تعادلی برای تراک CJ در مواد شدید الانفجار

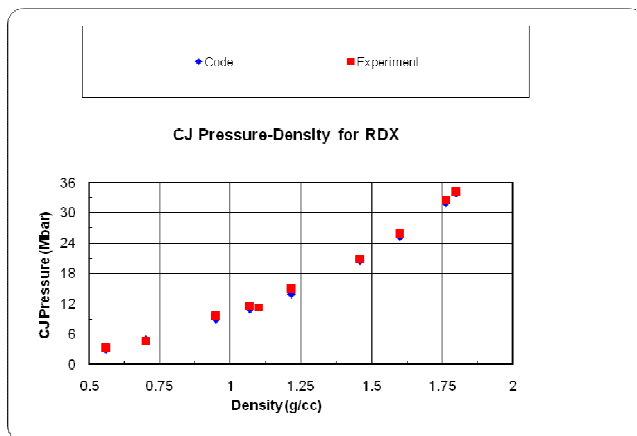
در مرحله اول تعداد نسبتاً زیادی ماده شدید الانفجار CHNO که مقدار تجربی حداقل یکی از خواص انفجاری آنها در دسترس می‌باشد انتخاب شده و نتایج محاسبه شده کار حاضر در جدول ۱- با مقدار تجربی مقایسه شده‌اند.

۴-۱-۲- محاسبات تعادلی برای تراک CJ مواد شدید الانفجار در دانسیته های مختلف

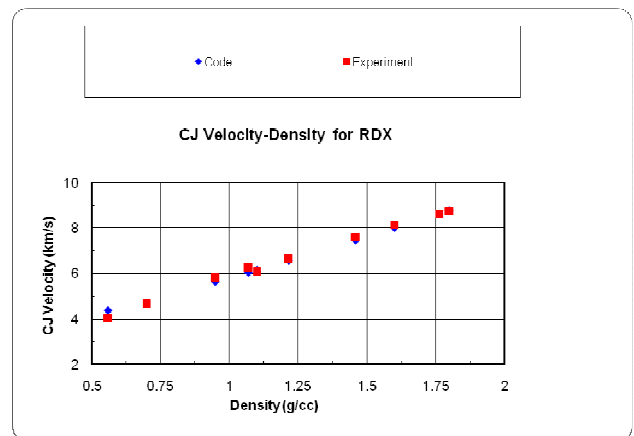
یکی از کاربردهای کدهای ترموشیمیایی محاسبه تغییرات خواص با تغییر دانسیته اولیه ماده منفجره می‌باشد. در شکل ۱- و شکل ۲- تغییرات سرعت و فشار تراک با دانسیته اولیه برای مواد RDX، TNT با کد حاضر و مقادیر تجربی مقایسه شده‌اند. این شکلها نشان می‌دهند که فشار محاسبه شده در چگالی‌های مختلف تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد.

جدول ۱- نتایج اعتبار سنجی کد حاضر برای تراک CJ در مواد شدید انفجار، P_{cj} (Gpa), D_{cj} (km/s).

مشخصات ماده منفجره		متغیر	تجربی [۱۰]	کد حاضر	CHEETAH 2.0 [۱۰]
نام	دانسیتیه اولیه				
HMX	1.89(gr/cc)	P_{cj}	۳۸.۷	۳۸.۰	۳۸.۶
		D_{cj}	۹.۱۱	۹.۱۴	۹.۲۴
PETN	1.76(gr/cc)	P_{cj}	۳۱	۲۹.۰۴	۳۰.۸۴
		D_{cj}	۸.۲۶	۸.۲۹	۸.۲۷
RDX	1.77(gr/cc)	P_{cj}	۳۳.۷۹	۳۲.۱۸	۳۳.۱۲
		D_{cj}	۸.۶۳	۸.۶۷	۸.۸۰
TATB	1.847(gr/cc)	P_{cj}	۲۵.۹	۲۶.۹۱	۲۷.۰۳
		D_{cj}	۷.۶۶	۷.۷۴۱	۷.۸۱۴
TETRYL	1.61(gr/cc)	P_{cj}	۲۲.۶۴	۲۱.۹۱	۲۲.۱۱
		D_{cj}	۷.۵۸	۷.۲۵	۷.۳۶
TNT	1.64(gr/cc)	P_{cj}	۱۹.۰	۱۸.۹۱	۱۹.۱۷
		D_{cj}	۶.۹۵	۶.۶۷	۶.۸۴
PENTOLITE	1.68(gr/cc)	P_{cj}	۲۴.۶	۲۳.۹۱	۲۴.۱۹
		D_{cj}	۷.۷۵	۷.۴۷	۷.۶۷۷
OCTOL (78-22)	1.8 (gr/cc)	P_{cj}	۳۲.۰	۳۲.۳۳	۳۰.۳۳
		D_{cj}	۸.۱۶	۸.۴۸	۸.۲۲

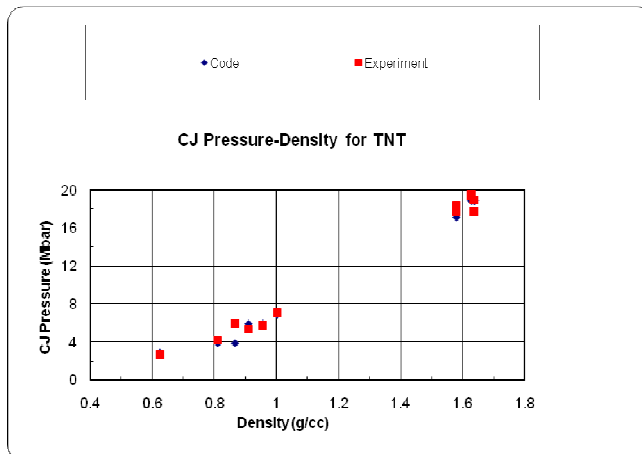


(ب)

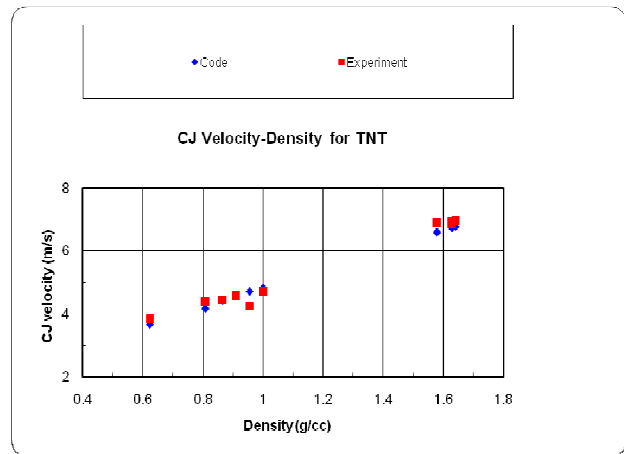


(الف)

شکل ۱: (الف) تغییرات سرعت جبهه تراک با دانسیته (ب) تغییرات فشار جبهه تراک با دانسیته، برای ماده شدید انفجار RDX (مقایسه نتایج کد حاضر با نتایج تجربی مرجع [۱۱]).



(ب)



(الف)

شکل ۲: (الف) تغییرات سرعت جبهه تراک با دانسیته (ب) تغییرات فشار جبهه تراک با دانسیته، برای ماده شدید انفجار TNT (مقایسه نتایج کد حاضر با نتایج تجربی مرجع [۱۱]).

۵- جمع بندی و نتیجه گیری

با استفاده از کد تهیه شده در کار حاضر می توان پارامترهای تعادلی موج تراک را در مواد شدیدالانفجار محاسبه کرد. برای این منظور نیاز است تا معادلات رانکین- هوگونیوت به همراه معادلات تعادل ترمودینامیکی حل گردند. دستگاه تشکیل شده توسط این معادلات به شدت غیر خطی است و حل این معادلات به شدت سخت می باشد. در اکثر روشها ممکن است در روند تکرار حل، گونه های با تعداد مول منفی نیز ظاهر شوند که این امر باعث حذف گونه مذکور در روند حل و در نهایت ایجاد خطا در جواب نهایی می شود. در روش پتانسیل المان تعداد گونه ها تاثیر مهمی در روند حل نداشته و در روند تکرار حل جهت همگرایی، تعداد مول گونه ها با مقدار بسیار کم نیز منفی نمی شود.

نتایج بدست آمده برای مواد شدید انفجار نشان دهنده تطابق بسیار خوب این نتایج با نتایج تجربی در دسترس و نتایج مشابه کد CHEETAH می باشد. با توجه به عدم امکان بدست آوردن دقیق ضرایب معادلات حالت برای مواد شدید انفجار و خطای موجود در نتایج تجربی، نتایج بدست آمده موجود نشان دهنده قابلیت اعتماد بالای کد توسعه داده شده می باشند.

مراجع :

- [1]. S. R. Turns, "An introduction to combustion", Second Edition, McGraw-Hill, 2000.
- [2]. W. Fickett, W. C. Davis, "Detonation", University of California Press, 1979.
- [3]. S. Esen, "A non-Ideal detonation model for evaluating the performance of explosives in rock blasting", Rock Mech Rock Engng., 2006.
- [4]. W. B. White, "Numerical determination of Chemical equilibrium and the Partitioning of Free Energy", J.Chem.Phys, p.4171, Vol. 46, 1967.
- [5]. F. Van Zeggeren and S. H. Storey, "The Computation of Chemical Equilibria", New York: Cambridge University Press, 1970.
- [6]. W. C. Reynolds, "The Element Potential Equilibrium Analyses", CA 94305, Department of Mechanical Engineering Stanford University, 1986.
- [7]. میثم بابااحمدی "توسعه یک کد تعادلی قابل اطمینان و سریع برای محاسبه سرعت دتونیشن CJ در مواد شدیدالانفجار ایده آل" پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه تربیت مدرس، تیرماه ۱۳۸۸.
- [8]. L. E. Fried, P. C. Souers, "BKWC: An Empirical BKW Parametrization Based on Cylinder Test Data", Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 1996.
- [9]. C. L. Mader, "Detonation Performance Calculation using the Kistiakowsky-Wilson Equation of State", Proceedings of 3rd International Symposium on Detonation, 1961.
- [10]. J. P. Lu, "Evaluation of the Thermochemical Code-CHEETAH 2.0 for Modelling Explosives Performance", Report No. DSTO-TR-1199, Weapons System Division, 2001.
- [11]. P. W. Cooper, "Explosives Engineering", Wiley-VCH, 1996.