

شبیه‌سازی یک‌بعدی آغازش با شاک Comp-B و مقایسه با داده‌های تجربی

سعید اسمعیلی پوراندراپی^۱، حسین سوری^{۲*}، پیمان تقوی ایشکوه^۳

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد ۲- دانشیار، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، ۳- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشگاه تربیت مدرس
(تاریخ وصول: ۹۸/۱۰/۳۰، تاریخ پذیرش: ۹۹/۰۴/۱۰)

چکیده

آغازش تراک توسط شاک موضوعی مهم در ارزیابی ایمنی مواد منفجره، طراحی زنجیره آتش و تجهیزات انفجاری است. مطالعات تجربی در این زمینه بسیار مشکل و پرهزینه بوده و به تجهیزات پیشرفته نیازمند است؛ از این رو، شبیه‌سازی ابزارهای مفید و مناسب برای مطالعه این پدیده است. هدف این مقاله، توسعه یک کد رایانه‌ای برای شبیه‌سازی یک‌بعدی آغازش مستقیم مواد پراثری است. برای این منظور، هیدروکد متن‌باز Fortran SIN به‌عنوان مبنا قرار گرفته و مدل سوزش I&G به آن اضافه شده است. با استفاده از کد توسعه یافته، آغازش ماده منفجره Comp-B با شاک‌های پالسی با دوام شبیه‌سازی شده است. مطابقت خوبی بین نتایج به‌دست آمده با نتایج سایر مراجع مشاهده شد؛ به‌عنوان مثال در شبیه‌سازی آغازش Comp-B با شاک ۳/۷۸ گیگا پاسکال، فاصله پیمایش تا دتونیشن ۱۴/۸ میلی‌متر به‌دست آمد که در مقایسه با نتایج تجربی مراجع معتبر، ۵/۷ درصد اختلاف دارد.

واژه‌های کلیدی: آغازش با شاک (SDT)، شبیه‌سازی، کد Fortran SIN، مدل سوزش، I&G، Comp-B.

One-Dimensional Simulation of Direct Initiation of Comp-B and Comparison with Experimental Data

S. Esmali Pourandarabi, H. Soury*, P. Taghavi Eishkooh

Malek Ashtar University of Technology
(Received: 01/20/2020, Accepted: 06/30/2020)

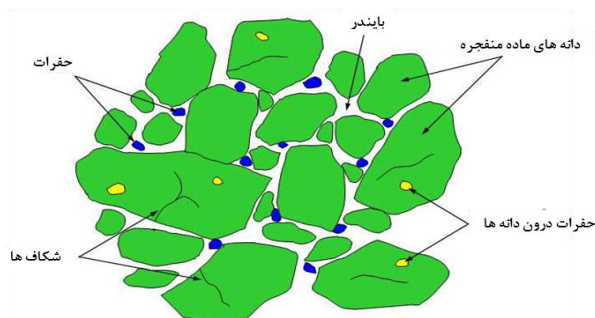
Abstract

Detonation initiation by shock is an important issue in the explosive safety assessment, design of the explosive train and explosive devices. Experimental studies in this area are very difficult, expensive, and require advanced equipment. Therefore, simulation is a useful and suitable way for studying this phenomenon. The purpose of this article is to develop a one-dimensional computer code for simulation of the direct initiation of energetic materials. The Fortran SIN hydrocode, was used for this purpose and the I&G burn model was added to this code. The developed code was used to simulate the direct initiation of the Comp-B by sustained shock pulses. A good agreement was observed between the present simulation results and the results of other references. For example, in the simulation of the initiation of Comp-B by 3.78 GPa shock, the run distance to detonation was 14.8mm, which the difference between this value and the reported experimental data is 5.7%.

Keywords: Shock Initiation, Simulation, Fortran-SIN, Reactive Burn Model, I&G, Comp-B.

1- مقدمه

ساختار فیزیکی ماده منفجره ناهمگن علاوه بر کریستال ها یا ذرات منفجره، معمولاً شامل حفرات، شکافها، مواد بایندر³ و مرزهای تمایز دهنده موجود بین اجزای مختلف است. شکل (1) ساختار فیزیکی ماده منفجره ناهمگن جامد را به صورت شماتیک نشان می‌دهد [2].



شکل 1- شماتیکی از میکرو ساختار ماده منفجره جامد ناهمگن [2].

در آغازش مواد ناهمگن، بر خلاف مواد همگن، دمای توده به صورت یکنواخت افزایش نمی‌یابد. بلکه تعامل موج شاک با ناهمگونی‌های مواد منفجره، منجر به تولید مکان‌های موضعی با دمای بالا (نقاط داغ⁴) می‌شوند. این "نقاط داغ"، آغاز کننده واکنش‌های شیمیایی درون مواد منفجره هستند. موج دتونیشن در این حالت، به جای نزدیکی سطح مشترک برخورد، در عمقی از خرج ماده منفجره (فاصله پیمایش تا دتونیشن⁵) شکل می‌گیرد. همان‌طور که در شکل (2) مشاهده می‌شود، با استفاده از نمودار $x-t$ (مکان جبهه موج-زمان) می‌توان فاصله یا زمان پیمایش تا دتونیشن را در مواد ناهمگن مشخص نمود (جایی که شیب نمودار که گویای سرعت پیشروی موج است، به سرعت دتونیشن پایا می‌رسد) [3].

فرایند آغازش شاک در مواد منفجره ناهمگن، معمولاً به صورت دو مرحله جداگانه توصیف می‌شود: (1) فاز احتراقی که در آن، نقاط داغ به واسطه تراکم شاک ایجاد گشته و منجر به تجزیه شیمیایی مواد منفجره در این مناطق متمرکز گرم می‌شود. (2) فاز رشد که با بزرگ شدن و به هم پیوستن نقاط داغ، منجر به توسعه واکنش شیمیایی برای تجزیه مواد منفجره باقی‌مانده می‌شود [4]. شکل (3) روند آغازش با موج شاک (که منجر به رشد واکنش شده است) را نشان می‌دهد. این شکل، تصویر لحظه‌ای از مراحل مختلف تجزیه مواد پشت شاک پیشرو را نشان می‌دهد. در این شکل، رشد واکنش از نواحی نقاط داغ موضعی (که به طور دینامیکی برافروخته شده‌اند)، نشان داده شده است. اگر شاک ورودی به ماده منفجره ناهمگن به اندازه کافی بزرگ و پایدار باشد، شاک به دتونیشن رشد کرده که به این فرآیند، "گذر از شاک به دتونیشن"⁶ می‌گویند [2].

مواد منفجره، منابع فشرده‌ای از انرژی شیمیایی هستند و به گونه‌ای طراحی شده‌اند که توانایی تجزیه سریع به گازهای بسیار داغ با فشار بالا را دارند. ساختار اغلب مواد منفجره متشکل از سوخت (کربن یا هیدروژن) و اکسید کننده (اکسیژن یا فلورین) در کنار یکدیگر است. مواد منفجره در حوزه تجاری (صنایع معدن، جوش و سوراخ کردن چاه‌های نفت) و حوزه نظامی، کاربردهای فراوانی دارند. مطالعه مواد منفجره، علاوه بر کاربردهای نظامی و صنعتی، در بین جوامع محققان دانشگاهی (به دلیل ساختار پیچیده و رفتار هیدرودینامیکی واکنشی آن‌ها) نیز علاقه‌مندان زیادی دارد [1].

مواد منفجره امروزی از لحاظ انرژی در حالت نیمه پایدار هستند و تا زمانی که انرژی اولیه کافی را دریافت نکنند، نمی‌توانند دستخوش تجزیه سریع شیمیایی شوند. معمولاً به شروع این فرایند، آغازش دتونیشن¹ ماده منفجره می‌گویند.

برای دانشمندان و مهندسان که از مواد منفجره استفاده می‌کنند، فهم دقیق چگونگی رفتار مواد منفجره لازم است. به ویژه، درک بالایی از آغازش مواد منفجره، برای ارزیابی ایمنی آن‌ها، جلوگیری یا کاهش احتمال وقوع انفجارهای ناخواسته و همچنین طراحی و توسعه تسلیحات و سامانه‌های ضد هوایی، ضروری است.

روش‌های مختلفی برای آغازش مواد منفجره از جمله گرما، محرک‌های الکترواستاتیک، اصطکاک، امواج شاک و یا ترکیبی از این منابع انرژی وجود دارد [1]. برخوردی سرعت بالا ($\sim km/s$) ممکن است باعث گذر از شاک به دتونیشن (SDT)²، یا اصطلاحاً آغازش مواد منفجره با شاک، در مقیاس میکروثانیه شوند. SDT، به دلیل ارتباط مستقیمی که با عملکرد ماده منفجره دارد، از مهم‌ترین موضوعات تحقیقاتی است. اگر چه در سال‌های گذشته درباره SDT تحقیقات زیادی انجام شده است، با این حال به منظور درک بیشتر، مطالعات ادامه دارند [1].

به منظور درک پدیده آغازش و ارزیابی حساسیت مواد منفجره تحت تأثیر امواج شاک، انواعی از آزمایش‌های تجربی به‌طور متداول انجام می‌شود. آزمایش‌ها، اطلاعات ارزشمندی درباره رفتار واکنش و حساسیت مواد منفجره فراهم می‌کنند. با این وجود، بسیاری از روش‌های تجربی، بینش اندکی در مورد اساس فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی طی فرایند آغازش ارائه می‌دهند.

هزینه‌های بالای آزمایش‌ها و محدودیت‌های ایمنی، لزوم توسعه مدل‌های محاسباتی آغازش با شاک را افزایش داده تا قابلیت درک و پیش‌بینی افزایش یابد. مدل‌سازی و شبیه‌سازی عددی، ابزاری ساده، ارزان، سریع و بی‌خطر برای بررسی و طراحی سامانه‌ها می‌باشد. شبیه‌سازی می‌تواند منجر به درک واضح‌تری نسبت به سازوکار انفجار، آغازش و پارامترهای تأثیرگذار بر آن شود.

1- تراک یا دتونیشن، امواج فراصوت احتراقی با یک جبهه شاک پیشرو است.

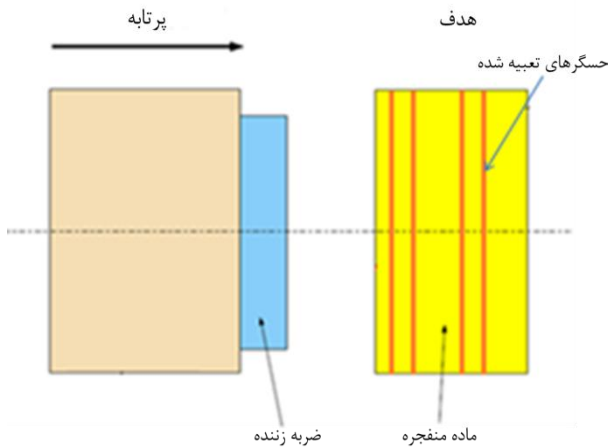
2- Shock to Detonation Transition

3- Binder Material

4- Hot-Spots

5- Run to Detonation Distance

6- Shock to Detonation Transiti

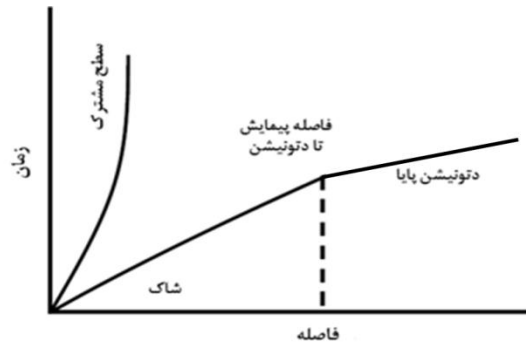


شکل ۴- پیکربندی تجربی شلیک‌های تفنگ گازی [۲].

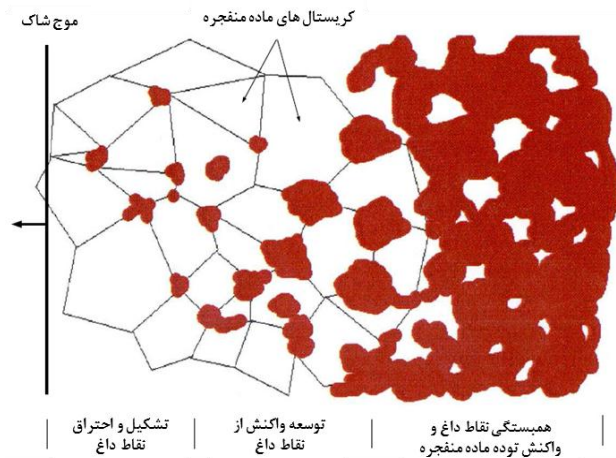
در سال‌های گذشته، تعداد زیادی از مدل‌های آغازش با شاک توسعه داده شده است که با عنوان مدل‌های سوزش^۶ نیز شناخته می‌شوند. مدل‌های آغازش با شاک به هیدروکدها^۷ متصل می‌شوند تا بتوان دینامیک آغازش با موج شاک در مواد منفجره را محاسبه نمود [۱۰]. هیدروکدها برنامه‌هایی هستند که از روش‌های مختلفی برای حل طیف وسیعی از مسائل غیرخطی دینامیک جامد، مایع و گاز استفاده می‌کنند [۱۱].

مدل‌ها بر اساس میزان پیچیدگی، به‌عنوان مثال پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی که به‌طور صریح در توصیف مدل در نظر گرفته می‌شوند، به دو دسته تقسیم می‌شوند: (۱) مدل‌های مبتنی بر محیط پیوسته و (۲) مدل‌های مبتنی بر فیزیک^۸ یا میان-مقیاس^۹. در مقاله حاضر به‌منظور شبیه‌سازی آغازش، از مدل مبتنی بر محیط پیوسته استفاده شده است. مدل مبتنی بر محیط پیوسته فورست فایر^{۱۰}، اولین و ساده‌ترین مدل سوزشی است که برای آغازش دتونیشن مواد منفجره با شاک‌های پایدار منفرد ارائه شده است [۱۲]. نرخ سوزش در این مدل، به‌صورت تابع نمایی از فشار بیان می‌شود. این مدل کاملاً پدیدار شناختی^{۱۱} بوده و نرخ سوزش ماده منفجره را به داده‌های نمودار پاپ و هگونیوت موادی که به‌طور جزئی واکنش داده‌اند، مرتبط می‌کند؛ بنابراین این مدل توسط انطباق با داده‌های نمودار پاپ، کالیبره می‌شود.

تحلیل کامل دتونیشن خود اتکا، نه تنها نیازمند تحلیل کامل ماکروسکوپی جریان هیدرودینامیکی است، بلکه به بررسی جزئیات میکروسکوپی در مقیاس‌های کوچک و همچنین پدیده توربولانس نیز نیازمند است. بر این اساس در سال ۱۹۷۸ لی و تارور [۴] مدل سوزش I&G^{۱۲} را برای پیش‌بینی آغازش در مواد منفجره ناهمگن معرفی کردند. بر



شکل ۲- گذر از شاک به دتونیشن در مواد منفجره ناهمگن [۳].



شکل ۳- روند تولید و رشد نقاط داغ در فرآیند آغازش مواد منفجره ناهمگن جامد با شاک (نواحی تیره، نشانگر مواد واکنش داده است) [۲].

توصیف آغازش مواد منفجره با شاک در مطالعات تجربی گذشته، تنها به تعیین فاصله (یا زمان) لازم برای گذر از شاک به دتونیشن محدود می‌شد. با استفاده از فناوری‌های نوری و آزمون‌های گوه^۱، داده‌های پیمایش تا دتونیشن به‌صورت تابعی از فشار ورودی (نمودارهای پاپ^۵) به‌دست آمده است [۶ و ۷].

اخیراً، با پیشرفت فناوری‌های اندازه‌گیری درون مواد^۳، پاسخ آغازش مواد منفجره با شاک همراه با جزئیات بیشتری نشان داده شده است [۸ و ۹]. در حال حاضر، معمولاً برای ارائه اطلاعات تاریخچه واکنش در مواد منفجره مورد نظر، از حسگرهای تعبیه شده^۴ در آزمایش‌های ساده یک‌بعدی تفنگ گازی^۵ استفاده می‌کنند. در این آزمایش‌ها، پرتابه‌هایی به سمت ماده منفجره شلیک شده تا شاک‌های معینی درون نمونه‌ها القاء کنند. چیدمان آزمایشگاهی شلیک تفنگ گازی، با استفاده از حسگرهای فشار از جنس مانگنین تعبیه شده درون خرج ماده منفجره، در شکل (۴) نشان داده شده است.

6- Reactive Burn
7- Hydrocodes
8- Physics-Based
9- Mesoscale
10- Forest Fire
11- Phenomenological
12- Ignition and Growth

1- Wedge Test
2- Pop-Plots
3- In-Material Gauging Techniques
4- Embedded Gauges
5- Gas Gun Test

۱-۲- مدل نرخ واکنش

مدل نرخ واکنش یکی از مهم‌ترین جنبه‌های هر مدل سوزش است؛ چرا که نرخ آزاد شدن انرژی شیمیایی ذخیره شده در مواد منفجره را کنترل می‌کند. در معادله نرخ واکنش مدل لی-تارور فرض می‌شود که احتراق مواد منفجره از نقاط داغ موضعی شروع شده و به سایر نقاط توسعه می‌یابد.

مدل سه جمله‌ای نرخ واکنش I&G شامل یک عبارت احتراقی و دو عبارت رشد است که به صورت رابطه (۱) بیان می‌شود [۱۴].

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

در این رابطه، λ کسر جرمی محصولات واکنش، ρ چگالی موضعی، ρ_0 چگالی اولیه و $I, a, b, c, d, e, G_1, G_2, x, y, z$ ثابت‌ها هستند. ثابت‌ها نرخ واکنش به کمک داده‌های آزمایشگاهی آغازش با شاک کالیبره می‌شوند. اولین عبارت، نشان دهنده تشکیل نقاط داغ و متعاقباً احتراق آن‌ها است. دومین عبارت، رشد به نسبت آهسته واکنش به داخل و یا بیرون نقاط داغ منفرد را مدل کرده، در حالی که عبارت سوم نشان دهنده تکمیل سریع واکنش با شروع همبستگی نقاط داغ می‌باشد.

برای جلوگیری از آغاز واکنش تا قبل از ایجاد حداقل تراکم، از پارامتر تراکم بحرانی a استفاده می‌شود. برای ایجاد احتراق باید شرط آستانه، $\frac{\rho}{\rho_0} \geq 1 + a$ ارضا شود. در این مدل، از نسبت چگالی به چگالی اولیه به عنوان معیار قدرت شاک در عبارت احتراقی استفاده شده است که معمولاً تنها برای $0 < \lambda \leq 0.025$ به کار برده می‌شود [۴].

قیود مربوط به مقادیر λ نیز به محاسبات نرخ واکنش اضافه می‌شوند به طوری که می‌توان با مقادیر مختلف λ عبارات مختلف در معادلات نرخ واکنش را فعال یا غیر فعال نمود. نرخ احتراق (جمله اول) تا زمانی که $\lambda \geq \lambda_{igmax}$ و نرخ رشد (جمله دوم) زمانی که $\lambda \geq \lambda_{G1max}$ باشد، برابر با صفر بوده و نرخ تکمیل (جمله سوم)، زمانی که $\lambda \leq \lambda_{G2min}$ است، برابر با صفر است. این امر امکان تنظیم سهم نسبی هر یک از عبارات احتراق و رشد را هنگام انطباق با داده‌های تجربی فراهم می‌کند [۴].

۲-۲- معادلات حالت

معادلات حالت تعیین کننده حالات ترمودینامیکی مواد طی شبیه‌سازی‌های شاک و دتونیشن هستند. این حالات ترمودینامیکی، نرخ واکنش‌های شیمیایی را کنترل می‌کنند؛ بنابراین معادله حالت، یک

اساس شواهد تجربی، نرخ سوزش در این مدل محیط پیوسته، به یک فاز احتراقی و یک یا دو فاز رشد تقسیم می‌شود. در فاز احتراقی، در نتیجه تراکم مواد با شاک، نقاط داغ تشکیل می‌شوند. در مورد دوم، نقاط داغ، بزرگ‌تر شده و واکنش شیمیایی توسعه می‌یابد. نسخه اصلی این مدل، فرایند آغازش را به یک فاز احتراقی و یک فاز رشد تقسیم می‌کند [۱۳]. بعدها به منظور تطبیق بیشتر با آزمایش‌های آغازش با شاک کوتاه مدت پالسی^۱ و مدل‌سازی دقیق‌تر، این مدل با افزودن عبارت رشد دیگری، اصلاح شد [۱۴]. از آنجا که این مدل به راحتی در دسترس است، در بسیاری از هیدروکدها تعبیه شده و برای بسیاری از مواد منفجره تنظیم شده است. از این رو، مدل لی و تارور پرکاربردترین مدل سوزشی است که امروزه استفاده می‌شود. مدل لی و تارور در پیش‌بینی داده‌های فاصله پیمایش تا دتونیشن (نمودار پاپ) [۴]، نتایج حاصل از فشارسنج‌های مانگانیی [۱۳]، داده‌های چرخش در گوشه [۱۳]، داده‌های آغازش با شاک پالسی کوتاه [۱۴]، داده‌های انتشار دتونیشن و زوال [۱۵] موفق بوده است. هدف از تحقیق حاضر، شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره Comp-B، با مدل سوزش لی و تارور (I&G) است. بدین منظور از هیدروکد لاگرانژی یک‌بعدی Fortran SIN [۱۶] به عنوان مبنای کار استفاده شده است. نسخه اصلی این هیدروکد، شامل مدل سوزش فورست فایر است. در ابتدا سعی شده است که با برنامه‌نویسی، مدل سوزش I&G درون هیدروکد SIN تعریف شود. در این راستا لازم است، علاوه بر تعریف معادله نرخ سوزش I&G، معادلات حالت مای-گرونایزن^۵ و JWL^۶ جایگزین معادله حالت HOM (معادله حالت مدل سوزش فورست فایر) شود. پس از تغییرات لازم، نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره، با داده‌های محاسباتی و تجربی سایر مراجع، اعتبارسنجی شده است.

۲- روش تحقیق

مدل I&G لی-تارور شامل دو عنصر اساسی است: (۱) مدل معادله حالت برای ماده در حال واکنش و (۲) مدل نرخ واکنش برای کنترل سرعت تجزیه ماده منفجره. در این مدل، ماده ی در حال واکنش به عنوان مخلوطی متشکل از ماده منفجره جامد واکنش نداده و محصولات گازی است که در آن مواد واکنش نداده و محصولات واکنش در تعادل فشار و دما فرض می‌شوند. برای توصیف هر دو فاز واکنش نداده و گازی از دو معادله حالت مجزای شبه-گرونایزن به فرم JWL [۱۷] استفاده می‌شود. همچنین فرض مخلوط ایده‌آل که در آن حجم‌ها و انرژی‌های اجزاء جمع‌پذیر هستند، به کار برده می‌شود [۴].

- 1- Short Pulse Duration Shock Initiation
- 2- Corner Turning
- 3- Short Pulse Shock Initiation
- 4- Detonation Propagation and Extinction
- 5- Mie-Gruneisen
- 6- Jones-Wilkins-Lee

۳-۲- کد رایانه‌ای FORTRAN SIN

کد متن‌باز یک‌بعدی اجزاء محدود لاگرانژی Fortran SIN [۱۶] که به زبان فرترن ۷۷ نوشته شده است، شامل اثرات هدایت گرما، لزجت، جریان الاستیک-پلاستیک، اسپالینگ^۱ و جریان واکنشی است. شرایط مرزی می‌تواند پیوسته، سطح آزاد، پیستونی با سرعت ثابت، پیستونی با تغییر خطی سرعت یا برای هندسه مسطح، پیستونی با ناحیه واکنش پایا باشد [۱۸]. می‌توان از فرم‌های PIC یا Landshoff برای لزجت مصنوعی استفاده نمود [۱۶].

در محاسبات از معادله حالت HOM برای ماده منفجره متراکم^۲، محصولات دتوینیشن و مخلوطی از هر دو فاز استفاده شده است. قانون هوک-مدل فون میزس برای جریان الاستیک-پلاستیک به کار رفته است [۱۹]. همچنین امکان استفاده از نرخ واکنش آرنیوسی، مدل سوزش فورست‌فایر و احتراق حجمی C-J را به کار می‌دهد [۱۶].

کد SIN برای هدف خاصی نوشته نشده است بلکه با هدف عمومی به‌عنوان یک ابزار تحقیقاتی و مهندسی انتشار یافته است. از اولین باری که این کد ارائه شده، به‌طور پیوسته ارتقاء یافته است. در کار حاضر تلاش شده است که مدل سوزش I&G لی-تارور را به این کد اضافه نموده و از آن برای شبیه‌سازی آغازش با شاک استفاده شود.

۴-۲- تغییرات اعمال شده در کد

همان‌طور که قبلاً اشاره شد، مدل سوزش I&G [۴] پس از مدل سوزش فورست‌فایر [۱۲] ارائه گردید. نرخ سوزش به کار رفته در مدل I&G در مقایسه با مدل فورست‌فایر، علاوه بر فشار محلی، به چگالی مواد پشت موج شاک (که بیانگر قدرت موج است) وابسته است. در مدل I&G از معادله حالت JWL به جای معادله حالت HOM استفاده می‌شود. این مدل، در شبیه‌سازی پدیده آغازش توان‌تر بوده و با نتایج تجربی مطابقت بیشتری دارد [۱ و ۲۰]. همچنین این مدل برای اکثر مواد منفجره به کار برده شده و ثوابت معادلات آن در دسترس است.

در تحقیق حاضر با هدف اضافه نمودن مدل سوزش I&G به کد FORTRAN SIN و ارتقای آن، ابتدا نسخه اصلی کد به‌طور کامل مورد بررسی قرار گرفت. در گام بعد، قسمت‌هایی از متن کد تغییر داده شد. به‌طوری که با برنامه‌نویسی، معادله حالت JWL جایگزین معادله حالت HOM شده و همچنین معادله نرخ واکنش I&G درون کد تعریف شده است. پس از اعمال تغییرات لازم در متن کد و همچنین تغییر ساختار ورودی‌ها و خروجی‌ها و شرایط مرزی، از نرم‌افزار Absoft16.0 برای کامپایل کد استفاده شده است. سپس با استفاده از کد ارتقاء یافته، آغازش با شاک ماده منفجره Comp-B شبیه‌سازی گردید. در انتها نتایج به‌دست آمده با داده‌های تجربی و مراجع معتبر مقایسه شده است.

عنصر کلیدی در مدل‌های سوزش است و با نرخ واکنش آن‌ها ترکیب شده است. امکان تعویض معادله حالت در مدل‌های سوزش وجود ندارد، مگر اینکه نرخ واکنش دوباره کالیبره شود.

در مدل I&G، دو معادله JWL به‌صورت جداگانه برای ماده منفجره واکنش نداد و محصولات واکنش مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای ماده منفجره واکنش نداد، فرم وابسته به انرژی معادله JWL به‌صورت رابطه (۲) بیان می‌شود [۱۴]:

$$P_s = A \left(1 - \frac{\omega_s}{R_1 v_s} \right) e^{-R_1 v_s} + B \left(1 - \frac{\omega_s}{R_2 v_s} \right) e^{-R_2 v_s} + \frac{\omega_s I_s}{v_s} \quad (2)$$

که در آن، v_s حجم ویژه نسبی ماده منفجره واکنش نداد $(\frac{V_s}{V_0})$ ، انرژی درونی و A ، ω_s ، B ، R_1 و R_2 ثابت‌ها هستند. این معادله حالت با داده‌های تجربی هگونیوت و با شرط $P=0$ هنگامی که $v_s = 1$ در دمای اولیه (معمولاً ۲۹۸ کلوین)، کالیبره می‌شود.

برای محصولات گازی واکنش، فرم وابسته به انرژی معادله JWL به‌صورت رابطه (۳) بیان می‌شود.

$$P_g = A \left(1 - \frac{\omega_g}{R_1 v_g} \right) e^{-R_1 v_g} + B \left(1 - \frac{\omega_g}{R_2 v_g} \right) e^{-R_2 v_g} + \frac{\omega_g I_g}{v_g} \quad (3)$$

که در آن، v_g حجم ویژه نسبی محصولات گازی $(\frac{V_g}{V_0})$ ، انرژی داخلی و A ، B ، ω_g ، R_1 و R_2 ثابت‌ها هستند. پارامترهای معادله حالت محصولات واکنش، به‌طور عمده از انطباق با داده‌های آزمون سیلندر به‌دست می‌آیند [۴]. آغازش با شاک، به معادله حالت مواد واکنش نداد حساس بوده و به معادله حالت محصولات واکنش غیر حساس است [۱].

ماده در حال واکنش به‌عنوان مخلوطی از دو فاز، شامل ماده منفجره جامد واکنش نداد و محصولات گازی واکنش تلقی می‌شود. برای بیان حجم نسبی و انرژی داخلی موضعی مخلوط، از قانون اختلاط ساده‌ای بر حسب کسر جرمی محصولات واکنش λ ، به‌صورت مجموع وزنی حجم‌ها و انرژی‌های نسبی در فازهای جداگانه، استفاده می‌شود (روابط ۴ و ۵) [۱].

$$V = (1 - \lambda)V_s + \lambda V_g \quad (4)$$

$$I = (1 - \lambda)I_s + \lambda I_g \quad (5)$$

کسر جرمی ماده منفجره واکنش داده (λ) ، از مقدار ۰ به سمت ۱ رفته که در آن $\lambda = 0$ نشان دهنده نبود واکنش (ماده منفجره واکنش نداد) و $\lambda = 1$ نشان دهنده واکنش کامل (تماماً محصولات) است. برای هر فاز، معادله حالت مربوط به آن استفاده شده و طبق روابط (۶ و ۷)، فشار و دمای مواد اولیه و محصولات در تعادل ترمودینامیکی فرض می‌شوند.

$$P = P_s = P_g \quad (6)$$

$$T = T_s = T_g \quad (7)$$

۳- نتایج و بحث

در شبیه‌سازی، فشار اولیه ۱ بار و مدل لزجت مصنوعی PIC با ضریب لزجت برابر با ۲ در نظر گرفته شده است. همچنین مدول برشی برابر ۳/۵۴ گیگاپاسکال و مقاومت تسلیم برابر ۰/۲ گیگاپاسکال لحاظ شده است [۲۱]. هندسه یک‌بعدی تعریف شده در برنامه که در شکل (۵) نشان داده شده، معادل سامانه آزمون تفنگ گازی است که به صورت شماتیک در شکل (۴) قابل مشاهده است.



شکل ۵- هندسه تعریف شده در برنامه.

شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره Comp-B تحت شاک بادوام ۳/۷۸ گیگاپاسکال انجام شده است. نمودارهای تاریخچه فشار در نقاط مختلف داخل خرج به صورت شکل (۶) هستند. فاصله نقاط از مرزی که شاک به آن برخورد می‌کند، در داخل نمودار مشخص شده است. در شکل (۶)، اولین نمودار (۰ mm) نشان دهنده تاریخچه فشار در مرز سمت چپ هندسه است و شاک ورودی به سامانه را ثبت می‌کند. مرحله به مرحله در پروفیل نمودارهای بعدی، در ابتدا افزایش کمی در دامنه جبهه شاک را نشان می‌دهند. متعاقباً افزایش شدیدی در قله فشار ایجاد شده که ناشی از واکنش شیمیایی ماده منفجره است. با افزایش فاصله از مرز خرج، به دلیل قوی‌تر شدن واکنش، قله فشار ناحیه واکنش افزایش می‌یابد. اگر فشار اولیه اعمال شده به سامانه به اندازه کافی بالا باشد، ناحیه واکنش حاصل از آن سرانجام به جبهه شاک نزدیک شده و موج دتونییشن ایجاد می‌گردد (نمودار ۲۰/۷۷ mm). طبق این شکل، فاصله پیمایش تا دتونییشن در محدوده ۱۴/۲۶ تا ۲۰/۷۷ میلی‌متری از مرز خرج و نزدیک به موقعیت ۱۴/۲۶ میلی‌متری است. زمان پیمایش تا دتونییشن نیز کمی بیشتر از ۳/۶ میکروثانیه است. فاصله و زمان پیمایش تا دتونییشن را به طور دقیق‌تر می‌توان از نمودار x-t جبهه موج به دست آورد.

در شکل (۷) نمودارهای تاریخچه فشار به دست آمده از این شبیه‌سازی، با نتایج محاسباتی و تجربی تارور و همکاران [۲۲] در فواصل ۰، ۷/۷۵ و ۲۰/۷۷ میلی‌متری، مقایسه شده است. رنگ‌های مشابه، مربوط به فواصل یکسان هستند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج این شبیه‌سازی، با نتایج محاسباتی و تجربی تارور و همکاران [۲۲]، مطابقت خوبی داشته و الگوی نمودارها بسیار نزدیک به هم هستند. حتی می‌توان ادعا کرد که نتایج به دست آمده از کار حاضر در مقایسه با نتایج محاسبات تارور و همکاران به داده‌های تجربی نزدیک‌تر است.

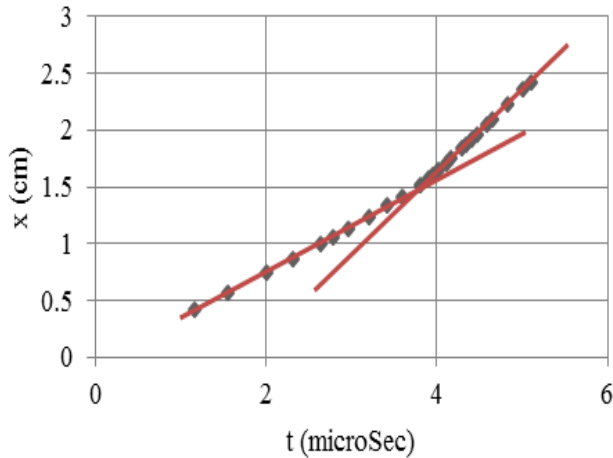
به منظور ارزیابی دقت کد ارتقاء یافته Fortran SIN، فرآیند آغازش با شاک در ماده منفجره Comp-B شبیه‌سازی می‌شود. ثابت‌های معادله حالت JWL برای ماده منفجره Comp-B و محصولات واکنش در جدول (۱) ارائه شده است [۲۱]. ثابت‌های معادله نرخ واکنش I&G نیز در جدول (۲) آورده شده است [۲۱]. این ثابت‌ها، مربوط به دمای اولیه ۲۹۸ کلوین هستند.

جدول ۵- ثوابت معادله حالت JWL برای Comp-B [۲۱].

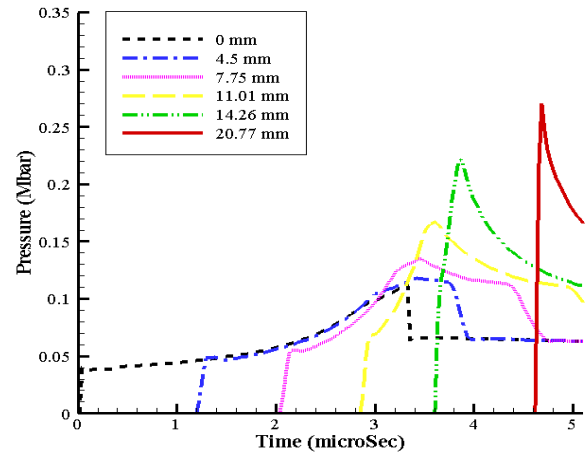
مقدار برای مواد اولیه	مقدار برای محصولات واکنش	ثابت
۱/۷۱۷	۱/۷۱۷	$\rho_0 (gr/cc)$
۴۸۵	۵/۲۴۲	$(Mbar) A$
-۰/۰۳۹۰۹۲۵	۰/۰۷۶۷۸	$(Mbar) B$
۱۱/۳	۴/۲	R_1
۱/۱۳	۱/۱	R_2
۰/۱۸۹۳۸	۰/۵	ω
$۲/۴۸۷ \times 10^{-۵}$	$۱۰^{-۵}$	$(Mbar/K) C_V$

جدول ۶- ثوابت معادله نرخ واکنش I&G برای Comp-B [۲۱].

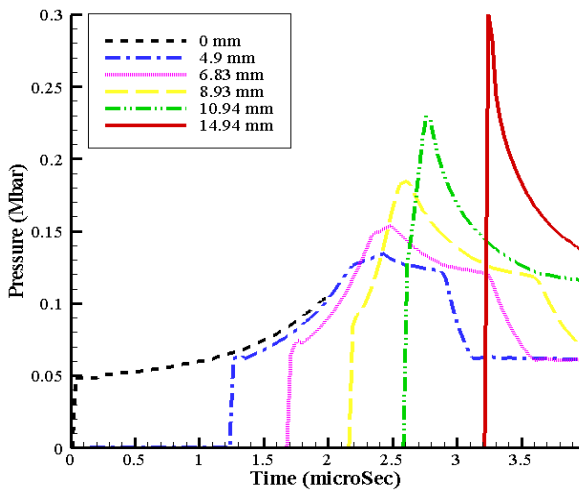
مقدار	ثابت
۴۰	$(\mu s^{-1}) I$
۰/۶۶۷	B
۰/۰۳۶۷	A
۷	X
۱۴۰	$(Mbar^{-\gamma} \mu s^{-1}) G_1$
۰/۶۶۷	C
۰/۳۳۳	D
۲	Y
۱۰۰۰	$(Mbar^{-z} \mu s^{-1}) G_2$
۰/۲۲۲	E
۱	G
۳	Z
۰/۰۲۲	W_{igmax}
۰/۷	W_{G1max}
۰	W_{G2max}



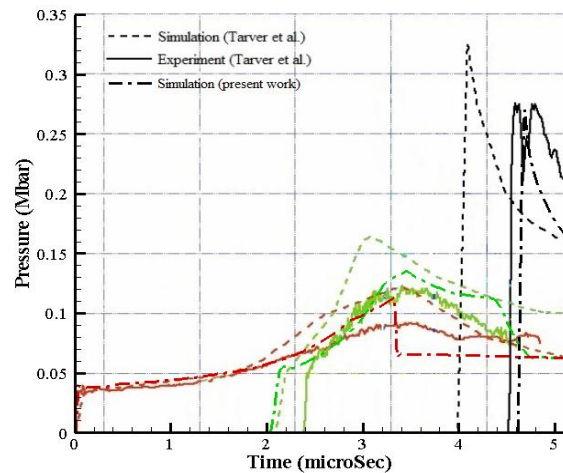
شکل ۸- نمودار $x - t$ مربوط به آغازش Comp-B با شاک ۳/۷۸ گیگاپاسکال.



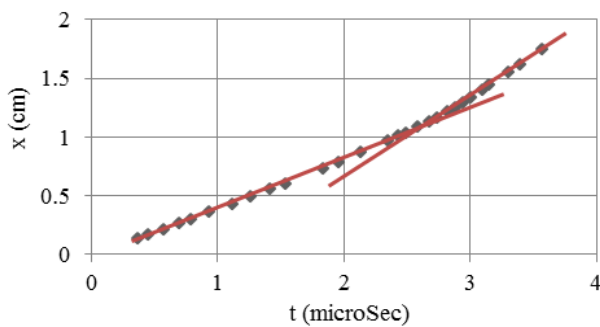
شکل ۶- نمودارهای تاریخچه فشار به‌دست آمده از شبیه‌سازی آغازش Comp-B با شاک بادوام ۳/۷۸ گیگاپاسکال.



شکل ۹- نمودارهای تاریخچه فشار حاصل از شبیه‌سازی آغازش Comp-B با شاک ۴/۸ گیگاپاسکال.



شکل ۷- مقایسه نتایج به‌دست آمده با نتایج محاسباتی و تجربی تارور و همکاران [۲۲] برای خرج Comp-B تحت شاک پایدار ۳/۷۸ گیگاپاسکال.



شکل ۱۰- نمودار $x - t$ مربوط به آغازش Comp-B با شاک ۴/۸ گیگاپاسکال.

طبق نمودار $x - t$ (شکل ۱۰)، فاصله پیمایش تا دتونیشن تقریباً برابر ۱۱ میلی‌متر است. تارور و همکاران [۲۲]، این مقدار را برابر با ۹ میلی‌متر و همچنین گیبس و پاپولاتو [۲۳] این مقدار را برابر ۱۱/۷ میلی‌متر گزارش داده‌اند؛ بنابراین نتیجه به‌دست آمده از این شبیه‌سازی، به ترتیب ۲۲٪ و ۶٪ با نتایج آن‌ها اختلاف داشته است.

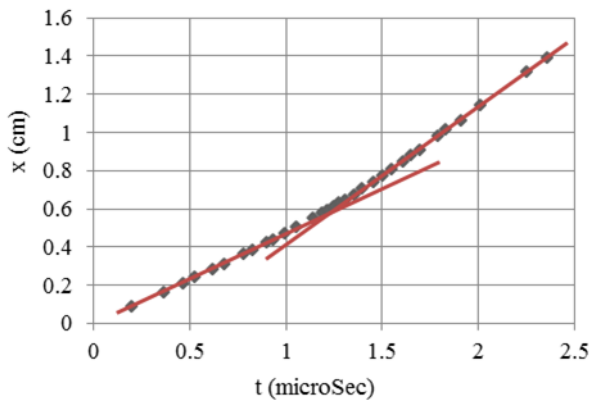
نمودار $x - t$ جبهه شاک مربوط به آغازش ماده منفجره Comp-B با شاک ۳/۷۸ گیگاپاسکال در شکل (۸) رسم شده است. محل گذر از شاک به دتونیشن با برازش دو خط بر نتایج قبل و بعد از شکستگی (تغییر شیب) نمودار به‌دست آمده است. طبق این شکل، فاصله پیمایش تا دتونیشن تقریباً برابر ۱۴/۸ میلی‌متر است. تارور و همکاران [۲۲] این فاصله را طبق آزمایش‌هایشان ۱۴ میلی‌متر گزارش داده‌اند؛ بنابراین، نتیجه شبیه‌سازی این مقاله با نتایج تجربی مذکور تنها ۵/۷ درصد اختلاف دارد.

در شکل‌های (۹ و ۱۰) به ترتیب نمودارهای تاریخچه فشار و $x - t$ به‌دست آمده از شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره Comp-B با شاک ۴/۸ گیگاپاسکال آورده شده است. طبق شکل (۹)، همان‌طور که انتظار می‌رفت، با افزایش فشار شاک ورودی، فاصله و زمان پیمایش تا دتونیشن کاهش یافته و موج دتونیشن سریع‌تر ایجاد می‌شود. در این مورد، موج دتونیشن پایا بین فواصل ۱۰/۹۴ و ۱۴/۹۴ میلی‌متری شکل می‌گیرد.

نمود. به کمک نمودار پاپ می‌توان برای فشارهای شاک برخوردی مختلف، فاصله پیمایش تا دتونیشن را به دست آورد.

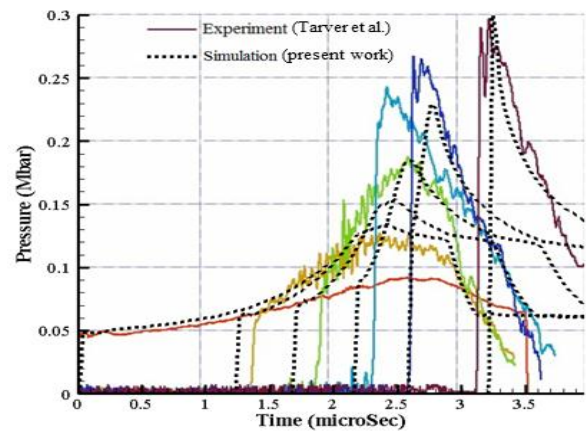
مقایسه نمودار پاپ حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی مرجع [۲۲] در شکل (۱۵) آورده شده است. طبق شکل (۱۶)، نمودار پاپ به دست آمده از این شبیه‌سازی، بسیار نزدیک به نمودار گیبس و پاپولاتو [۲۳] است. همچنین می‌توان اظهار داشت که در فشارهای پایین شاک، نمودار پاپ به دست آمده از شبیه‌سازی حاضر، به نمودار پاپ حاصل از نتایج آزمایش‌های تارور و همکاران [۲۲] بسیار نزدیک بوده و با افزایش فشار، اختلاف بین این دو افزایش می‌یابد. همچنین در شکل (۱۵) نمودار تجربی پاپ برای تعداد دیگری از مواد منفجره ارائه شده است.

به منظور ارزیابی بیشتر دقت و اعتبار کد ارتقاء یافته، آغازش ماده منفجره PBX-9404 با شاک ۲/۵ گیگاپاسکال نیز شبیه‌سازی شده است. فاصله پیمایش تا دتونیشن به دست آمده، در مقایسه با نتایج تجربی مرجع [۴]، با ۸٪ اختلاف همراه است. همچنین نمودارهای تاریخچه فشار، روندی مشابه با نمودارهای به دست آمده از آزمایش‌های تجربی دارند. در نتیجه می‌توان گفت، کد توسعه یافته از اعتبار لازم برخوردار است. با استفاده از این کد و با معلوم بودن ثوابت مدل I&G برای ماده مورد نظر، می‌توان آن ماده را شبیه‌سازی نموده و پدیده‌های مختلف، از جمله آغازش را بررسی نمود.



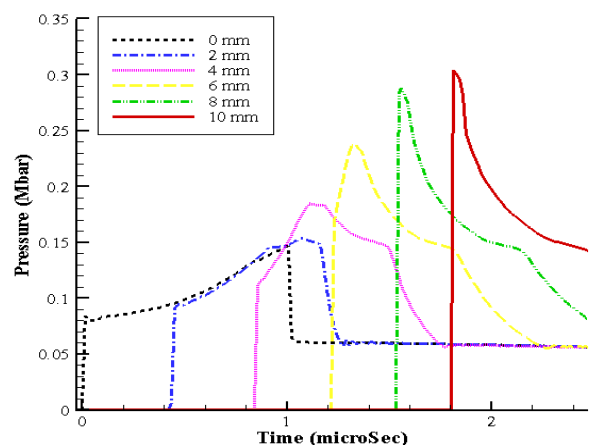
شکل ۱۱- مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج تجربی تارور و همکاران [۲۲] برای خرج Comp-B تحت شاک ۴/۸ گیگاپاسکال.

در شکل‌های (۱۲ و ۱۳) به ترتیب نمودارهای تاریخچه فشار و $x-t$ به دست آمده از شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره Comp-B با شاک ۸ گیگاپاسکال آورده شده است. طبق شکل (۱۳)، فاصله پیمایش تا دتونیشن تقریباً برابر با ۵/۸ میلی‌متر است. گیبس و پاپولاتو [۲۳] نیز همین مقدار را گزارش داده‌اند.

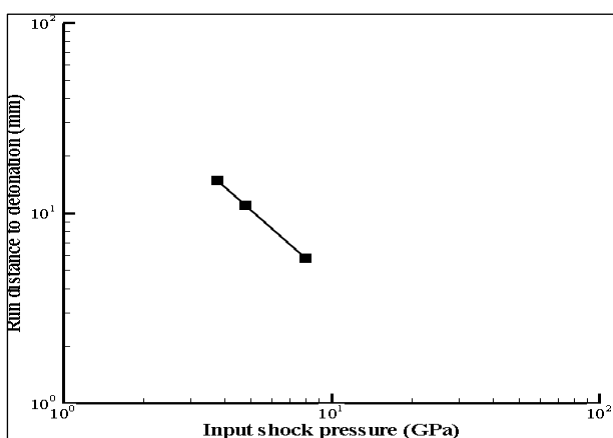


شکل ۱۲- نمودارهای تاریخچه فشار و $x-t$ به دست آمده از شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره Comp-B با شاک ۸ گیگاپاسکال آورده شده است.

شکل ۱۳- مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج تجربی تارور و همکاران [۲۲] برای خرج Comp-B تحت شاک ۴/۸ گیگاپاسکال.



شکل ۱۳- نمودار $x-t$ مربوط به آغازش ۸ گیگاپاسکال.



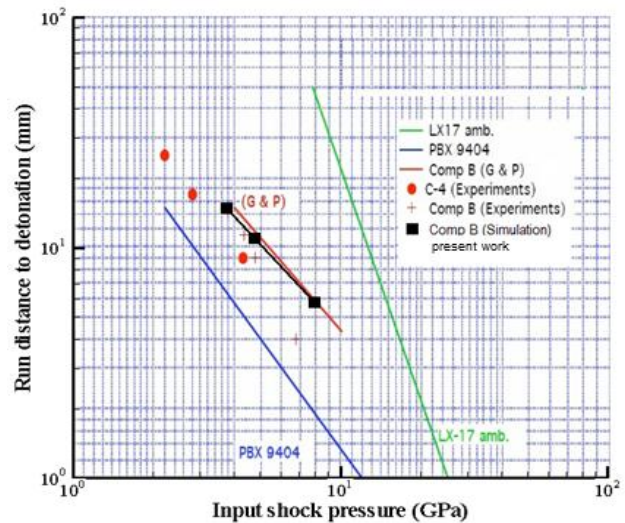
شکل ۱۴- نمودار پاپ مربوط به آغازش Comp-B.

با استفاده از نتایج به دست آمده از شکل‌های (۸)، (۱۰) و (۱۳)، می‌توان نمودار پاپ مربوط به ماده منفجره Comp-B را همانند شکل (۱۴) رسم

آزمون‌های مختلف، از جمله آزمون فاصله پیمایش تا دتونیشن و همچنین نمودارهای تجربی فشار داخل ماده منفجره شاک‌دیده که از آزمون صفحه پرنده به‌دست می‌آیند، کالیبره می‌شوند. هر چقدر تعداد و تنوع آزمون‌ها بیشتر باشد، دقت این ثابت‌ها نیز بیشتر می‌شود. با استفاده از کد توسعه یافته کنونی و در صورت در دسترس بودن داده‌های تجربی حاصل از آزمون‌های فوق‌الذکر می‌توان به کالیبراسیون ضرایب مدل سوزش اقدام نمود. از کد توسعه یافته حاضر می‌توان برای شبیه‌سازی فرآیند آغازش دتونیشن در اجزای مختلف زنجیره آتش استفاده نمود. علاوه بر این قدرت موج دتونیشن خروجی از هر یک از المان‌های زنجیره آتش با استفاده از این کد قابل محاسبه است. همچنین کد مذکور قابلیت پیش‌بینی انفجار ناخواسته ناشی از برخورد ترکش، گلوله و موج شاک به ماده منفجره را دارا است. طبیعی است که توسعه کد یک‌بعدی حاضر به دو‌بعدی، امکان شبیه‌سازی دقیق‌تر پدیده‌های فوق‌الذکر را فراهم می‌کند. توسعه این کد به حالت دو‌بعدی تقارن محوری در دست اقدام است.

مراجع

- [1] Handley, C.; Lambourn, B.; Whitworth, N.; James, H.; Belfield, W. "Understanding the Shock and Detonation Response of High Explosives at the Continuum and Meso Scales"; Appl. Phys. Rev. 2018, 5, 11303.
- [2] Whitworth, N. "Mathematical and Numerical Modelling of Shock Initiation in Heterogeneous Solid Explosives"; Ph. D. Thesis, Cranfield University, UK, 2008.
- [3] Duran, A. "Multiscale Modeling of Shock Wave Propagation through High Energetic Composites"; Ph.D. Thesis, University of Michigan, 2017.
- [4] Lee, E. L.; Tarver, C. M. "Phenomenological Model of Shock Initiation in Heterogeneous Explosives"; Phys. Fluids 1980, 23, 2362-2372.
- [5] Ramsay, J. B.; Popolato, A. "Analysis of Shock Wave and Initiation Data for Solid Explosives"; Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-DC-6992 1965.
- [6] Campbell, A.; Davis, W.; Ramsay, J.; Travis, J. "Shock Initiation of Solid Explosives"; Phys. Fluids 1961, 4, 511-521.
- [7] Rabie, R.; Harry, H. "Characterization of British Explosives FD16, EDC29, EDC35 and EDC37"; Los Alamos Natl. Lab. Rep. LA-UR-92-1928 1992.
- [8] Vorthman, J.; Andrews, G.; Wackerle, J. "Reaction Rates from Electromagnetic Gauge Data"; Los Alamos Natl. Lab. Rep. LA-UR-85-2459 1985.
- [9] Wackerle, J.; Rabie, R.; Ginsberg, M.; Anderson, A. "Shock Initiation Study of PBX-9404"; Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-UR-78-1219 1978.
- [10] Anderson, Jr C. E.; Charles, E. "An Overview of the Theory of Hydrocodes"; Int. J. Impact Eng. 1987, 5, 33-59.
- [11] Johnson, W. E.; Anderson, Jr C. E. "History and Application of Hydrocodes in Hypervelocity Impact"; Int. J. Impact Eng. 1987, 5, 423-439.
- [12] Mader, C. L. "Numerical Modeling of Explosives and Propellants"; CRC Press, 2007.



شکل ۱۵- مقایسه نمودار پاپ به‌دست آمده از این شبیه‌سازی با نمودار پاپ ارائه شده توسط تارور و همکاران [۲۲].

۴- نتیجه‌گیری

در تحقیق حاضر به توسعه یک کد یک‌بعدی به‌منظور شبیه‌سازی یک‌بعدی آغازش با شاک در مواد شدیدالانفجار پرداخته شد. برای این منظور، کد متن‌باز یک‌بعدی تفاضل محدود لاگرانژی Fortran SIN به‌عنوان مبنا در نظر گرفته شده است. پس از مطالعه بر روی این کد و شناخت ساختار و نحوه کار آن، به توسعه آن پرداخته و مدل سوزش I&G لی و تارور به آن اضافه شد. در ادامه با استفاده از کد توسعه یافته، فرآیند آغازش دتونیشن در ماده منفجره Comp-B تحت شاک‌های مختلف شبیه‌سازی شد. جهت اعتبارسنجی کد، نتایج حاصله شامل فرآیند رشد موج فشاری و همچنین نمودار پاپ، با نتایج محاسباتی و تجربی سایر مراجع معتبر مقایسه شد. مشاهده شد که نتایج کد توسعه یافته، از مطابقت خوبی با داده‌های تجربی و محاسبات سایرین برخوردار بوده و می‌توان ادعا کرد که کد توسعه یافته از اعتبار لازم برخوردار است. در شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره Comp-B با شاک ۳/۷۸ گیگاپاسکال، فاصله پیمایش تا دتونیشن ۱۴/۸ میلی‌متر به‌دست آمد که این فاصله در نتایج تجربی تارور و همکاران [۲۲]، ۱۴ میلی‌متر گزارش شده است؛ بنابراین ۵/۷ درصد اختلاف بین نتایج مشاهده می‌شود. در شبیه‌سازی آغازش ماده منفجره با شاک ۴/۸ گیگاپاسکال، فاصله پیمایش تا دتونیشن برابر ۱۱ میلی‌متر به‌دست آمد. تارور و همکاران [۲۲] این مقدار را برابر با ۹ میلی‌متر و همچنین گیسی و پاپولاتو [۲۳] این مقدار را برابر ۱۱/۷ میلی‌متر گزارش داده‌اند؛ بنابراین نتیجه به‌دست آمده از این شبیه‌سازی، به ترتیب ۲۲٪ و ۶٪ با نتایج آن‌ها اختلاف دارد. لازم به ذکر است که دقت شبیه‌سازی‌های انجام شده، به‌دقت مقادیر ثابت‌های به‌کار رفته برای مدل سوزش نیز بستگی دارد. شاید بتوان بخشی از اختلاف بین نتایج محاسبات با نتایج تجربی را به دقت ثابت‌های مذکور ارتباط داد. این ثوابت به کمک

- [18] Mader, C. L. "A Study of the One-Dimensional, Time-Dependent Reaction Zone of Nitromethane and Liquid TNT"; Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-3297 1965.
- [19] Mader, C. L. "One-Dimensional Elastic-Plastic Calculations for Aluminum"; Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-3678 1967.
- [۲۰] مظاهری، کیومرث "بررسی مقایسه‌ای مدل‌های سوزش برای مواد شدیدالانفجار؛" مجله علمی ترویجی مواد پرنانرژی، سال چهارم، شماره ۲، صفحه ۲۹، ۱۳۸۷.
- [21] Schwer, L. E. "Impact and Detonation of COMP-B An Example using the LS-DYNA® EOS: Ignition and Growth of Reaction in High Explosives"; Int. LS-DYNA Users Conf. 2012, 1-20.
- [22] Urtiew, P. A.; Vandersall, K. S.; Tarver, C. M.; Garcia, F.; Forbes, J. W. "Shock Initiation Experiments and Modeling of Composition B and C-4"; Lawrence Livermore Natl. Lab. Rep. UCRL-CONF-222137 2006.
- [23] Baytos, J. F. "LASL Explosive Property Data"; University of California Press, 1980.
- [13] Tarver, C.; Hallquist, J. "Modeling Two-Dimensional Shock Initiation and Detonation-Wave Phenomena in PBX 9404 and LX-17"; Proc. Int. Symposium on Detonation, 1981, 488-497.
- [14] Tarver, C.; Hallquist, J.; Erickson, L. "Modeling Short Pulse Duration Shock Initiation of Solid Explosives"; Int. Symposium on Detonation 1985, 951-961.
- [15] Gustavsen, R. L.; Sheffield, S. A.; Alcon, R. R.; Forbes, J. W.; Tarver, C. M.; Garcia, F. "Embedded Electromagnetic Gauge Measurements and Modeling of Shock Initiation in the TATB Based Explosives LX- 17 and PBX 9502"; AIP Conf. Proc., 2002, 620, 1019-1022.
- [16] Mader, C. L.; Gage, W. R. "FORTRAN SIN: A One-Dimensional Hydrodynamic Code for Problems which Include Chemical Reactions, Elastic-Plastic Flow, Spalling, and Phase Transitions"; Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-3720 1967.
- [17] Menikoff, R. "JWL Equation of State"; Los Alamos Natl. Lab. Rep. LA-UR-15-29536 2015.