

بدست آوردن پارامترهای تعادلی تراک CJ با استفاده از معادله حالت JCZ3

علی حسینیان^۱، کیومرث مظاهری^{*۲}

تهران - دانشگاه تربیت مدرس

(تاریخ وصول: ۸۹/۷/۱۲، تاریخ پذیرش: ۸۹/۱۰/۲۰)

چکیده

در کار حاضر از معادله حالت JCZ3 برای توصیف رفتار محصولات تراک مواد شدیدالانفجار استفاده شده است. معادله حالت JCZ3 متکی به مفاهیم ترمودینامیک آماری بوده و ضرایب آن، ضرایب تابع پتانسیل مولکولی می‌باشند. با توجه به اینکه ضرایب این معادله حالت محدود به شرایط (فشار و دما) خاصی نمی‌باشند، انتظار می‌رود در محدوده‌های مختلف جواب قابل قبول ارائه کنند. نتایج نشان می‌دهند که دقت معادله حالت JCZ3 در محاسبه خواص تراک مواد شدیدالانفجار با دقت معادله حالت BKW برابری می‌کند. همچنین در محدوده فشارهای پایین (محدوده معادله حالت گاز کامل) نتایج مربوط به تراک گازی حاصل از این معادله حالت در توافق خوبی با نتایج مربوط به معادله حالت گاز کامل می‌باشد. نتایج کار حاضر همچنان نشان می‌دهد که دقت معادله حالت JCZ3 در محاسبه خواص تراک در فشارهای متوسط بیشتر از معادله‌های حالت BKW و گاز کامل می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: معادله حالت JCZ3، تراک، مواد شدیدالانفجار، فشارهای متوسط، کد تعادلی.

۱- مقدمه

امکان تشکیل آنها وجود دارد. این نقطه با نام نقطه CJ شناخته می‌شود [۱]. محاسبات مربوط به پیش‌بینی پارامترهای تراک با استفاده از مدل CJ، توسط کدهای کامپیوتری که کدهای ترمو-شیمیایی نامیده می‌شوند انجام می‌گیرد. تاکنون چندین کد ترمو-شیمیایی در سطح جهان تهیه شده‌اند که می‌توان به کدهای BKW، FORTRAN [۱]، TIGER [۲]، CHEETAH [۳] و AMRL [۴] برای مواد شدیدالانفجار و CEA و STANJAN برای مخلوط‌های گازی در فشارهای پایین اشاره نمود. متأسفانه این کدها برای

تئوری چاپمن-ژوگت (CJ) یکی از اصلی‌ترین تئوری‌های مربوط به تراک می‌باشد که بیش از صد سال است مورد استفاده قرار می‌گیرد. پایا و یک بعدی بودن موج تراک، ضخامت ناچیز موج تراک، ناچیز بودن نیروهای سطحی و پدیده نفوذ مولکولی و تعادل ترمو-شیمیایی برای محصولات تراک فرضیات تئوری CJ می‌باشند. بر اساس این تئوری، در عمل پدیده تراک در نقطه ای رخ می‌دهد که سرعت موج مربوط به آن نقطه کمتر از سرعت همه امواجی باشد که از نظر تئوری

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

۱- کارشناس ارشد

۲- دانشیار

فشارهای میانی (حدود ۱۰۰۰ تا ۲۰۰۰ اتمسفر) معمولاً جواب‌های مناسبی ارائه نمی‌دهند.

در حالی که کدهای مربوط به مخلوط‌های گازی از معادله حالت گاز کامل استفاده می‌کنند، معادله حالت به کار رفته در کدهای ترمو-شیمیایی مربوط به مواد شدید الانفجار باید بتواند در دماها و فشارهای بالایی که در انفجار رخ می‌دهد رفتار ترمودینامیکی محصولات انفجار را توصیف نماید. در چنین فشارهای بالایی استفاده از معادله حالت گاز کامل ممکن نبوده و لازم است از معادله‌های حالت مناسب دیگری استفاده شود. دو نمونه از معادله‌های حالت پرکاربرد برای فاز گازی محصولات انفجار معادله حالت BKW و معادله حالت JCZ می‌باشند. معادله حالت BKW که از تغییر شکل معادله حالت ویرال^۱ اقتباس شده [۱] از قدمت بیشتری برخوردار است و اولین کدهای ترموشیمیایی بر مبنای این معادله حالت تهیه شده‌اند. یکی از ضعف‌های معادله حالت BKW اتکای ضرایب آن بر داده‌های تجربی می‌باشد که کاربرد آن را محدود می‌نماید. اغلب کدهای معروف از این معادله حالت استفاده می‌کنند.

در سال ۱۹۶۸ جاکبس یک معادله حالت تحلیلی بر پایه مفاهیم ترمودینامیک آماری برای توصیف گونه‌ها در فشارهای بالا ارائه نمود [۵]. کپرسویت و زویسلر با بکارگیری قوانین اختلاط^۲، معادله حالت جاکبس را برای مخلوطی از گونه‌های مختلف توسعه دادند و معادله حالت جدید را JCZ نامیدند [۲]. در سال ۱۹۷۶ کپرسویت و زویسلر نسخه‌ای از معادله حالت JCZ را که از تابع پتانسیل نمایی برای توصیف نیروهای بین مولکولی استفاده می‌نماید (معادله حالت JCZ3)، به کد TIGER اضافه نمودند [۶]. موضوع تحقیقات بعدی مربوط به معادله حالت JCZ، عمدتاً توسعه ضرایب آن بوده است. بعنوان مثال، استیل و همکارانش طی تحقیقی دقت ضرایب معادله حالت JCZ3 بکار رفته در کد TIGER را با استفاده از مقایسه هوگونیوت^۳ گونه‌ها و پارامترهای تراک محاسبه شده توسط این کد با نتایج تجربی، مورد بررسی قرار دادند. آنها به این نتیجه رسیدند که ضرایب مذکور بطور کلی دقت قابل قبولی دارند. با اینحال می‌توان دسته ضرایب بهتری برای معادله حالت JCZ3 بدست آورد [۷]. در سال ۲۰۰۲ برگ و

کمیسر معادله حالت JCZ3 را به کد AMRL افزودند و برای محاسبه پارامترهای انفجاری ماده منفجره‌های غیرایده‌آل از آن استفاده نمودند [۴]. در سال ۱۹۹۸ مگگی و همکاران با استفاده از روش‌های مختلف ضرایب JCZ3 را برای ۷۵۰ گونه گازی محاسبه نمودند. ضرایب این کتابخانه بزرگ که JCZS نامیده شده منتشر شده است. کتابخانه JCZS در نسخه‌های جدید کد ترموشیمیایی CHEETAH اعمال شده است و نتایج منتشر شده از آن دقت بسیار خوبی دارند [۸]. متأسفانه این نسخه‌های کد CHEETAH و همچنین کدهایی مانند AMRL در دسترس نمی‌باشند و تنها از نتایج منتشر شده آنها می‌توان استفاده کرد.

برخلاف ضرایب معادله حالت BKW که وابستگی زیادی به نتایج تجربی شرکت داده شده در کالیبره نمودن معادله حالت دارند، ضرایب معادله حالت JCZ بر پایه مفاهیم ترمودینامیک آماری استخراج شده‌اند و انتظار می‌رود دقت بیشتری نسبت به معادله حالت BKW داشته باشد. در دسترس بودن ضرایب معادله حالت JCZ3 برای محدوده وسیعی از گونه‌های شیمیایی از دیگر مزیت‌های آن می‌باشد. در کار حاضر پارامترهای تراک مواد شدیدالانفجار با استفاده از معادله حالت JCZ محاسبه شده و با نتایج سایر مراجع مقایسه می‌گردند. همچنین، با توجه به اینکه ضرایب معادله حالت JCZ3 از نظر شرایط فیزیکی (به خصوص فشار) محدودیت خاصی ندارند، کارایی این معادله حالت برای فشارهای پایین و بخصوص میانی مورد ارزیابی قرار خواهد گرفت. محاسبات تعادلی انجام شده در کار حاضر با استفاده از کدهای تعادلی که قبلاً در کشور توسعه داده شده اند انجام گرفته است [۹ و ۱۰].

۲- مبانی تئوری

۲-۱- تئوری چاپمن - ژوگت

در تئوری چاپمن و ژوگت فرض بر این است که هنگام متراکم شدن ماده توسط موج شوک، واکنش‌های شیمیایی بصورت آنی انجام می‌شوند. در این تئوری جریان یک بعدی فرض شده و جبهه موج به صورت یک صفحه ناپیوستگی در نظر گرفته می‌شود.

1- Virial Equation of state

2- Mixing rules

3- Hugoniot

بیان می‌کند. در معادله حالت JCZ3 از تابع پتانسیل expo-l,m برای محاسبه $P_0(V)$ و $G(V,T)$ استفاده شده است. این تابع پتانسیل بصورت معادله (۳) می‌باشد.

$$\phi(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{m}{l-m} \right) \exp \left[l \left(1 - r/r^* \right) \right] - \left(\frac{l}{l-m} \right) \left(\frac{r^*}{r} \right)^m \right] \quad (3)$$

که ε عمق چاه پتانسیل^۲ و r^* شعاع متناظر با انرژی کمینه می‌باشد. مقدار m ثابت و برابر با ۶ در نظر گرفته می‌شود. برای تعیین تابع پتانسیل مولکولی هر گونه شیمیایی سه پارامتر نیروی مولکولی یعنی l ، r^* و ε باید معلوم باشند. در تحقیق حاضر نیز مقدار پارامترهای r^* و ε برای گونه‌های مختلف برابر با مقادیر نشان داده شده در جدول ۱ در نظر گرفته شده است. همچنین مقدار پارامتر l برای تمام گونه‌ها برابر با ۱۳/۵ در نظر گرفته شده است [۶ و ۷].

جدول ۱- ضرایب گونه‌ها در معادله حالت JCZ3 [۵].

گونه	$r_i^* (10^{-10} m)$	$\varepsilon_i / k (K)$
H ₂ O	۳/۳۵۰	۱۳۸/۰
N ₂	۴/۰۵۰	۱۲۰/۰
CO ₂	۴/۲۰۰	۲۰۰/۰
CO	۴/۰۵۰	۱۲۰/۰
O ₂	۷/۷۳۰	۱۳۲/۰
H ₂	۳/۳۴۰	۳۷/۰
NH ₃	۳/۳۵۰	۱۳۸/۰
NO	۳/۹۷۰	۱۰۵/۰
CH ₄	۴/۲۹۰	۱۵۴/۰

در معادله (۲) تابع $P_0(v)$ از معادله:

$$P_0(V) = - \frac{dE_0(V)}{dV}$$

بدست می‌آید که $E_0(v)$ پتانسیل حجمی یک شبکه مولکولی مکعبی^۳

و به صورت زیر می‌باشد [۶]:

$$E_0(V) = e_0 \frac{ml}{2(l-m)} \left\{ \frac{B_l}{l} \exp \left[l \left(1 - \left(\frac{V}{V^*} \right)^{1/3} \right) \right] - \frac{B_m}{m} \left(\frac{V}{V^*} \right)^{m/3} \right\} \quad (4)$$

در رابطه (۴)، B_1 و B_m ضرایب ثابت می‌باشند. رابطه r^* با V^* به صورت زیر می‌باشد:

با ترکیب معادلات پیوستگی، بقای ممتنم و بقای انرژی در دو طرف این موج و با استفاده از یک معادله حالت مناسب $e=e(P,v)$ می‌توان به رابطه‌ای بین فشار و حجم رسید که معادله هوگونیوت نامیده می‌شود (معادله ۱):

$$e_2 - e_1 + q = \frac{1}{2} (v_2 - v_1) (P_2 + P_1) \quad (1)$$

در رابطه (۱) زیرنویسهای ۱ و ۲ بترتیب شرایط قبل و بعد از انفجار را نشان می‌دهند. e ، p و v بترتیب انرژی، فشار و حجم مخصوص و q نشان دهنده اختلاف انرژی‌های تشکیل مواد اولیه و محصولات تراک می‌باشد.

منحنی هوگونیوت مکان هندسی خواص بعد از موج برای شرایط اولیه داده شده می‌باشد. چاپمن و ژوگت بیان کردند که در عمل پدیده تراک در نقطه‌ای از منحنی هوگونیوت رخ می‌دهد که خط واصل نقطه مذکور و نقطه اولیه (که خط رایلی نامیده می‌شود) بر منحنی هوگونیوت مماس باشد. این نقطه به نام نقطه CJ شناخته می‌شود [۱]. بنابراین نقطه CJ با استفاده از دو شرط زیر تعیین می‌شود:

الف- نقطه CJ روی منحنی هوگونیوت قرار دارد لذا شرایط آن باید در معادله (۱) صدق نماید.

ب- در نقطه CJ خط رایلی بر منحنی هوگونیوت مماس می‌باشد (به عبارت دیگر شیب خط واصل نقطه CJ و نقطه اولیه مینیمم می‌باشد).

۲-۲- معادله حالت JCZ3

در تحقیق حاضر جهت بکار بردن معادله (۱) برای تراک، از معادله حالت^۱ JCZ3 استفاده شده است.

معادله حالت JCZ3 یک معادله P-V-T به شکل زیر می‌باشد:

$$P = \frac{G(V,T)nRT}{V} + P_0(V) \quad (2)$$

که n تعداد مول و R ثابت جهانی گازها می‌باشد. $P_0(V)$ تابع فشار داخلی وابسته به حجم و $G(V,T)$ تابع گرونایزن می‌باشند. این دو تابع با استفاده از پتانسیل مولکولی بدست می‌آیند. پتانسیل مولکولی یک تابع ریاضی است که نیروهای بین مولکولی را بر حسب فاصله آنها

2- Well depth

3- Face-centered cubic lattice

1- Jacobs-Cowperthwaite-Zwisler

با مشخص شدن تابع f می توان تابع $G(V,T)$ را مشخص نمود. تابع $G(V,T)$ بگونه ای تعریف می شود که انرژی آزاد هلمهولتز متناظر با معادله حالت JCZ3 برابر با معادله (۸) باشد. برای انجام اینکار لازم است با استفاده از روابط ترمودینامیکی، ارتباطی بین انرژی آزاد هلمهولتز و معادله حالت JCZ3 برقرار شود. رابطه ترمودینامیکی مربوطه عبارتست از [۱۱]:

$$P = - \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_T \quad (13)$$

پس از انجام عملیات ریاضی لازم، معادله تابع $G(V,T)$ به صورت زیر استخراج خواهد شد:

$$G(V,T) = 1 - \frac{1}{f_g + f_s} \left[-y f'_g + \left(\frac{2-z}{2} - \frac{1}{2-z} \right) f'_s \right] \quad (14)$$

بدین ترتیب محاسبه توابع $G(V,T)$ و $P_0(V)$ و در نتیجه تعریف معادله حالت JCZ3 کامل می شود. پتانسیل شیمیایی (μ_i) و انرژی داخلی با استفاده از جاگذاری معادله (۸) در معادلات (۱۵) محاسبه می گردند:

$$E = A - T \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_V, \quad \mu_i = \frac{\partial A}{\partial n_i} \quad (15)$$

۲-۳- معادله حالت فاز جامد

برای توصیف رفتار فاز غیرگازی از معادله حالت زیر استفاده شده است [۳]:

$$V(P,T) = V_0 + aT + bP \quad (16)$$

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 می باشند. مشابه با فاز گازی، برای این فاز نیز باید معادلات مربوط به پتانسیل شیمیایی، انرژی داخلی و آنترپی استخراج شوند.

برای فاز غیرگازی پتانسیل شیمیایی با استفاده از معادله زیر محاسبه می شود:

$$\mu_s = \mu_s^0(T) + \int_{P_0}^P V(P,T) dP \quad (17)$$

که $\mu_s^0(T)$ پتانسیل شیمیایی در فشار P_0 یک اتمسفر می باشد و با استفاده از خواص حالت ایده آل محاسبه می شود. انرژی داخلی فاز غیرگازی نیز برابر است با:

$$V^* = \frac{nN_A (r^*)^3}{\sqrt{2}} \quad (5)$$

N_A عدد آووگادرو می باشد. e_0 و V^* برای مخلوط گازها با استفاده از قوانین مخلوط^۱ زیر محاسبه می شوند [۶]:

$$V^* = \frac{1}{n} \sum_i \sum_j n_i n_j v_{ij}^*, \quad i=1, \dots, s \quad j=1, \dots, s \quad v_{ij}^* = \frac{N_A}{\sqrt{2}} \left(\frac{r_i^* + r_j^*}{2} \right)^3 \quad (6)$$

$$e_0 = \frac{1}{n} \sum_i \sum_j n_i n_j e_{ij}, \quad i=1, \dots, s \quad j=1, \dots, s \quad e_{ij} = R \left(\frac{\varepsilon_i}{k} \frac{\varepsilon_j}{k} \right)^{1/2} \quad (7)$$

تابع $G(V,T)$ به گونه ای ساخته می شود که انرژی آزاد هلمهولتز^۲ (A) را بتوان بصورت تابع صریحی از $E_0(V)$ ، انرژی آزاد هلمهولتز یک گاز ایده آل (A_{ideal}) و یک تابع f نوشت [۶]:

$$A = A_{ideal} + E_0(V) + nRT \ln f(V,T) \quad (8)$$

که تابع f بصورت زیر تعریف می شود:

$$f = f_g + f_s \quad (9)$$

به طوریکه در چگالی های پایین f_g و در چگالی های بالا f_s غالب باشد. تابع f_g بصورت زیر تعریف می شود:

$$f_g = 1 + a_1 y + a_2 y^2 + \dots + a_q y^q \quad (10)$$

مقدار ضرایب a_1, a_2, \dots, a_q بگونه ای تعیین می شود که در چگالی های پایین معادله حالت JCZ تبدیل به معادله حالت ویربال شود. y نیز بصورت زیر تعریف می شود:

$$y = \frac{V^*}{V} \left(\frac{F}{l} \right)^3, \quad F = c + l - \ln \left[\frac{(l-m)nRT}{m e_0} \right] \quad (11)$$

C ثابت اویلر^۳ می باشد.

f_s نیز بصورت زیر تعریف می شود:

$$f_s = 2 \left[\frac{e_0}{nRT} \left(\frac{m}{l-m} \right) \frac{z}{\pi} (z-2) \exp(l-z) \right]^{3/2} \quad (12)$$

1- Mixture rules
2- Helmholtz
3- Euler's constant

$$E_s = E_s^0 + n_s \left[V_0 (P - P_0) + \frac{b}{2} (P^2 - P_0^2) \right] \quad (18)$$

که n_s تعداد مول گونه غیرگازی می‌باشد. بالانویس صفر بیانگر مقدار خواص مورد نظر در شرایط استاندارد محیط می‌باشد.

۳- روش تعیین حالت تعادل ترمودینامیکی محصولات انفجار

در تئوری CJ فرض می‌شود که محصولات انفجار در تعادل ترمودینامیکی قرار دارند. بنابراین برای استفاده از تئوری CJ باید ترکیب محصولات انفجار را در حالت تعادل ترمودینامیکی تعیین نمود. برای تعیین شرایط تعادل ترمو-شیمیایی از قانون دوم ترمودینامیک استفاده می‌شود که بموجب آن در حالت تعادل انرژی آزاد گیبس محصولات، کمترین مقدار خود را دارد. کمینه سازی انرژی آزاد گیبس با قید بقای عناصر شیمیایی صورت می‌گیرد. در نتیجه مسئله تعیین حالت تعادل به یک مسئله کمینه‌سازی مقید تبدیل می‌گردد. جزئیات الگوریتم تعیین شرایط تعادل در مراجع [۹ و ۱۰] توضیح داده شده است.

کلیات روش مورد استفاده برای اولین بار در مراجع [۱۲ و ۱۳] پیشنهاد و استفاده شده است.

۴- نتایج ۴-۱- تراک گازی

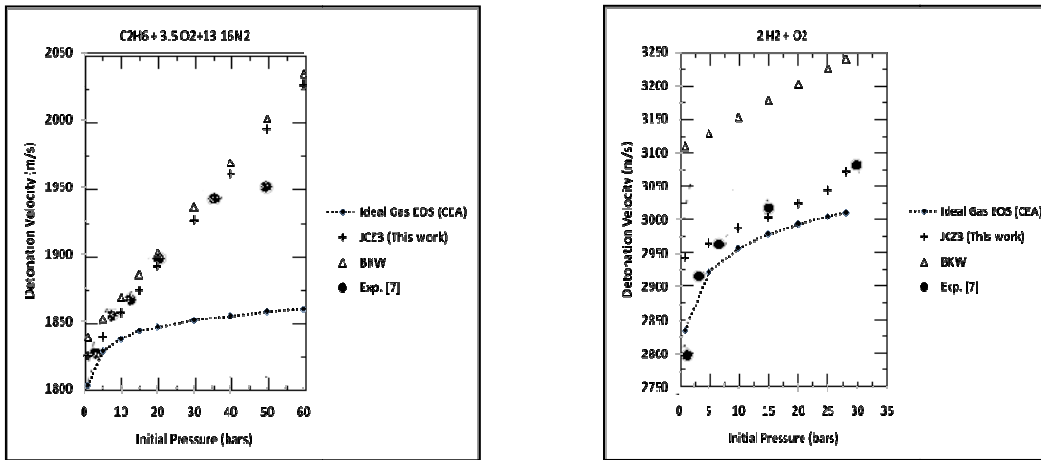
در مرحله اول، انفجار مخلوط های گازی در شرایط محیط در نظر گرفته شده است. پارامترهای تراک مخلوط های گازی در شرایط محیط با استفاده از کد CEA [۱۴] قابل پیش‌بینی می‌باشند. کد CEA که در سازمان ناسا تهیه شده از معادله حالت گاز کامل استفاده می‌نماید. در جدول ۲ پارامترهای تراک CJ دو محیط گازی با استفاده از معادله حالت JCZ3 محاسبه و با نتایج کد CEA مقایسه شده است. این مقایسه نشان می‌دهد که معادله حالت JCZ3 در محدوده گاز کامل نیز جواب های قابل قبولی ارائه می‌دهد.

۴-۲- مقایسه معادله حالت JCZ3 با معادله حالت گاز کامل در پیش‌بینی انفجار مخلوط های گازی در فشارهای متوسط

معادله حالت گاز کامل به دلیل دقت قابل قبول آن در فشارهای پایین، کاربرد گسترده‌ای در محاسبات تراک مخلوط های گازی دارد. با این حال اگر مخلوط های گازی تحت فشار اولیه قرار داشته باشند فشار محصولات تراک آنها می‌تواند بسیار بالا باشد.

جدول ۲- مقایسه پارامترهای تراک دو مخلوط گازی. P فشار جبهه موج، T دمای جبهه موج، D سرعت موج تراک و p چگالی محصولات انفجار در جبهه موج می‌باشد. شرایط اولیه واکنش گر شرایط اتمسفر (P=1 bar, T=298.15 K) فرض شده است. مقادیر داخل پرانتز درصد اختلاف را نشان می‌دهند.

پارامتر	محصولات تراک مخلوط اتیلن و هوا $C_2H_4 + 2.78 (O_2 + 3.76N_2)$		محصولات تراک مخلوط اتان و هوا $C_2H_6 + 3.5 (O_2 + 3.76N_2)$	
	کد CEA	کار حاضر (JCZ3)	کد CEA	کار حاضر (JCZ3)
P, bar	19.035	19.05 (0.078)	17.96	18.5 (3.0)
T, K	3031.37	3078.3 (1.55)	2811.7	2911.1 (3.53)
D, m/s	1864.4	1884.0 (1.05)	1802.4	1838.9 (1.47)
ρ , kg/m ³	2.0995	2.1061 (0.31)	2.1125	2.9693 (0.73)



شکل ۱- مقایسه دقت معادله حالت JCZ3 با معادله حالت گاز کامل (کد CEA) در پیش‌بینی سرعت موج تراک مخلوط‌های گازی در فشارهای متوسط. شکل سمت راست مربوط به مخلوط هیدروژن/اکسیژن و شکل سمت چپ مربوط به مخلوط اتان/هوا می‌باشد.

اتان- هوا استفاده از معادله حالت BKW دقت قابل قبولی دارد ولی نتایج مخلوط هیدروژن- اکسیژن نشان می‌دهد که معادله حالت JCZ3 برای استفاده در محدوده فشارهای متوسط بهتر از معادله حالت BKW می‌باشد. دلیل خطای زیاد معادله حالت BKW مربوط به محدوده کالیبره کردن ضرایب تجربی مربوط به این معادله حالت می‌باشد. ضرایب تجربی این معادله حالت برای فشارهای بسیار بالای مربوط به محصولات انفجار مواد شدید انفجار بدست می‌آیند.

۴-۳- مقایسه خواص تراک CJ با مقادیر تجربی برای مواد شدید انفجار

جهت بررسی دقت معادله حالت JCZ3 در محاسبه خواص موج تراک در مواد شدید انفجار، فشار، دما و سرعت موج تراک محاسبه شده در کار حاضر با نتایج تجربی و همچنین نتایج منتشر شده از دو کد AMRL [۴] و CHEETAH مقایسه شده است (جدول ۳). در شکل‌های ۲ و ۳ خطای نسبی^۱ سرعت و فشارهای تراک مندرج در جدول ۳ نشان داده شده است. شکل ۲ نشان می‌دهد که اگر چه در مورد ماده NQ خطای کار حاضر بیشتر از دو کد دیگر می‌باشد ولی حداکثر خطای کار حاضر کمتر از حداکثر خطای دو کد AMRL و

در نتیجه استفاده از معادله حالت گاز کامل برای تراک مخلوط‌های مذکور مناسب نخواهد بود. از طرفی فشار تراک مخلوط‌های گازی تحت فشار، معمولاً بسیار کمتر از فشار تراک مواد شدید انفجار می‌باشد. دو معادله حالت BKW و JCZ3 دقت قابل قبولی در پیش‌بینی خواص محصولات تراک مواد شدید انفجار دارند [۱]. هدف این قسمت بررسی این موضوع می‌باشد که آیا می‌توان از معادله حالت‌های BKW و JCZ3 در محدوده فشارهای مربوط به انفجار مخلوط‌های گازی تحت فشار که در این تحقیق فشارهای متوسط نامیده می‌شوند استفاده نمود.

برای بررسی این موضوع دو مخلوط گازی اتان- هوا ($C_2H_6 + 3.5O_2 + 13.16N_2$) و هیدروژن- اکسیژن ($2H_2 + O_2$) در نظر گرفته شده و خواص تراک حاصل از این دو مخلوط در فشارهای اولیه مختلف با استفاده از سه معادله حالت گاز کامل، BKW و JCZ3 محاسبه شده و با نتایج تجربی ارائه شده در مرجع [۸] مقایسه شده اند. برای محاسبات مربوط به معادله حالت گاز کامل از کد CEA استفاده شده است. نتیجه مقایسه در شکل ۱ نشان داده شده است.

شکل ۱ نشان می‌دهد در فشار اولیه‌های بالاتر از ۱۰ بار که موجب افزایش فشار محصولات تراک تا فشارهای بیشتر از ۲۰۰ بار می‌شود استفاده از معادله حالت گاز کامل دقت قابل قبولی ندارد در حالی که در همین محدوده فشار معادله حالت JCZ3 با دقت بسیار خوبی سرعت موج تراک را پیش‌بینی می‌کند. همچنین اگر چه در مخلوط

۱- خطای نسبی پارامتر ψ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Relative\ Error(\%) = \frac{|\psi_c - \psi_e|}{\psi_e} \times 100$$

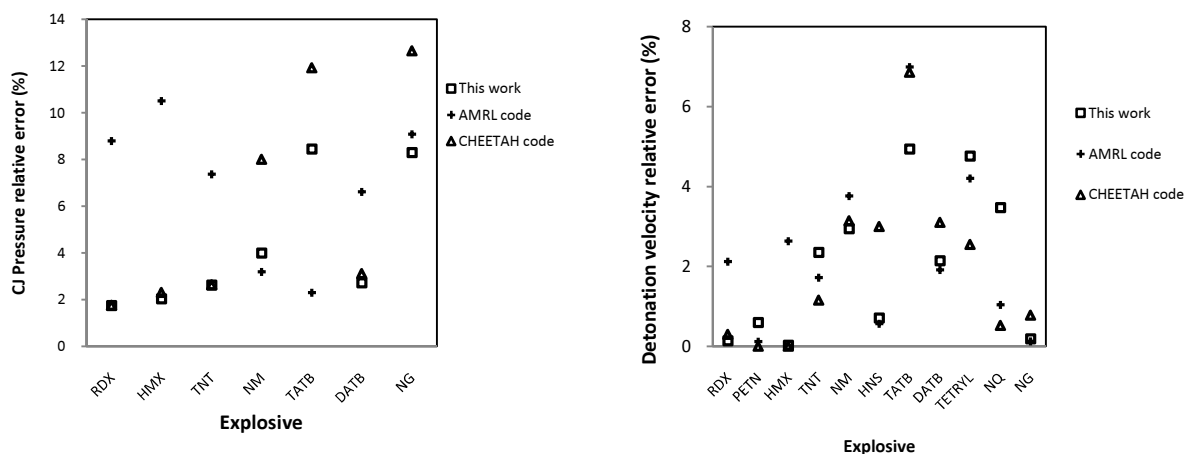
که ψ_c و ψ_e به ترتیب مقادیر محاسبه شده و تجربی پارامتر مذکور می‌باشند.

حاضر دقیق تر از نتایج کد AMRL باشد. محتمل ترین دلیل این اختلافها تفاوت معادله حالت بکار رفته برای کربن جامد می باشد. با توجه به عدم دسترسی به مشخصات سایر تحقیقات در این زمینه، امکان اظهار نظر قطعی وجود ندارد.

CHEETAH می باشد. شکل ۳ نیز که خطای نسبی فشار تراک را بین کدهای مختلف مقایسه می کند نشان می دهد که در همه موارد خطای کار حاضر در محدوده خطای دو کد دیگر قرار دارد. همچنین نتایج جدول ۳ نشان می دهند که دماهای کد AMRL بیشتر از کار حاضر می باشد و در مواردی که دماهای تجربی موجود می باشند، نتایج کار

جدول ۳- مقایسه خواص CJ با مقادیر تجربی و نتایج کدهای AMRL و CHEETAH.

نام ماده شدیدالانفجار	چگالی	تجربی [۱۵]		کار حاضر JCZ3	AMRL JCZ3 [۴]	CHEETAH JCZS [۸]
		Pcj (Gpa)	Dcj (km/s)			
RDX	1.8	Pcj (Gpa)	34.1	33.5	31.1	34.7
		Dcj (km/s)	8.754	8.94	8.741	8.78
		Tcj (K)	---	4028	4145	---
PETN	1.77	Pcj (Gpa)	33.5	28.4	28.1	---
		Dcj (km/s)	8.27	8.28	8.220	---
		Tcj (K)	---	4319	4615	---
HMX	1.89	Pcj (Gpa)	39.0	38.2	34.9	39.9
		Dcj (km/s)	9.11	9.35	9.113	9.11
		Tcj (K)	---	3900	3976	---
TNT	1.64	Pcj (Gpa)	19.0	18.5	17.6	19.5
		Dcj (km/s)	6.95	6.83	6.786	7.03
		Tcj (K)	---	3699	3799	---
NM	1.13	Pcj (Gpa)	12.5	12.	12.1	11.5
		Dcj (km/s)	6.37	6.13	6.182	6.17
		Tcj (K)	3430*	3684	3755	3394
HNS	1.69	Pcj (Gpa)	---	20.1	19.8	21.7
		Dcj (km/s)	7.0	6.96	7.050	7.21
		Tcj (K)	---	4075	4300	---
TATB	1.85	Pcj (Gpa)	26.0	28.2	25.4	29.1
		Dcj (km/s)	7.58	8.11	7.955	8.10
		Tcj (K)	---	3099	3033	---
DATB	1.79	Pcj (Gpa)	25.7	25.0	24.0	26.5
		Dcj (km/s)	7.585	7.73	7.748	7.82
		Tcj (K)	---	3392	3653	---
TETRYL	1.70	Pcj (Gpa)	---	23.6	22.3	25.0
		Dcj (km/s)	7.85	7.52	7.476	7.65
		Tcj (K)	---	4232	4242	---
NQ	1.55	Pcj (Gpa)	---	20.3	18.7	19.5
		Dcj (km/s)	7.65	7.73	7.384	7.61
		Tcj (K)	---	2582	2581	---
NG	1.60	Pcj (Gpa)	25.3	23.2	23.0	22.1
		Dcj (km/s)	7.70	7.69	7.715	7.64
		Tcj (K)	4260*	4563	4927	4575



شکل ۲- (راست) خطای نسبی سرعت موج تراک (کار حاضر، کد AMRL و کد CHEETAH).
 (چپ) خطای نسبی فشار تراک (کار حاضر، کد AMRL و کد CHEETAH).

مراجع

- [1]. Mader, C. L. "Numerical Modeling of Detonations," University of California Press, 1979.
- [2]. Cowperthwaite, M., Zwisler, W. H., "TIGER Computer Program Documentation," Stanford Research Institute, January 1973.
- [3]. Fried, L. E., "CHEETAH 1.39 User Manual," Energetic Material Center, Lawrence Livermore National Laboratory, 1996.
- [4]. Brog, R. A., Kemister, G., Jones, D. A., "Chemical Equilibrium Calculations for Detonation Product," DSTO-TR-0226, 2002.
- [5]. Jacobs, S. J., "On the Equation of State of Compressed Liquids and Solids," NOLTR 68-214, United States Naval Ordnance Laboratory, White Oak, Maryland, 1968.
- [6]. Cowperthwaite, M., Zwisler, W. H., "The JCZ Equations of State for Detonation Products and Their Incorporation into the TIGER Code.," Sixth Symposium (International) on Detonation, 162, 1976.
- [7]. McGee, B. C., Hobbs, M. L., Baer, M. R., "Exponential 6 Parameterization for the JCZ3- EOS," SAND98-1191, 1998.
- [8]. Stiel, L. I., Gold, V. M., Baker, E.L., "Analysis of Hugoniot and Detonation Properties of Explosives with JCZ3 Equation of State," 10th Symposium (International) on Detonation, pp. 433-440, 1993.

[۹]. بابا احمدی، میثم توسعه یک کد تعادلی قابل اطمینان و سریع برای محاسبه سرعت دتونیشن CJ در مواد شدیدالانفجار، پایان‌نامه کارشناسی ارشد مهندسی هوافضا، دانشگاه تربیت مدرس، تابستان ۱۳۸۸.

۵- نتیجه گیری

در این تحقیق، با استفاده از یک کد ترموشیمیایی، کارایی معادله حالت JCZ3 در محدوده های مختلف فشاری مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج این تحقیق نشان می‌دهند که معادله حالت JCZ3 در محدوده فشار گسترده‌ای (که حد پایین در حدود فشار محیط و حد بالای آن فشارهای محصولات انفجار مواد شدید انفجار (چند صد کیلو بار) است) قابل استفاده می‌باشد. نتایج تحقیق حاضر نشان می‌دهند این معادله حالت به خوبی قابل استفاده به جای معادله های حالت گاز کامل و BKW در محدوده های مرتبط با این معادلات حالت می‌باشد. از طرف دیگر، محاسبات انجام شده دلالت بر این امر مهم دارند که در فشارهای متوسط (حدود ۱۰۰۰ بار) دقت معادله حالت JCZ3 بسیار بیشتر از دقت معادله های حالت گاز کامل و BKW می‌باشد. در نتیجه می‌توان از معادله حالت JCZ3 برای پیش‌بینی خواص تراک مخلوط های گازی تحت فشار اولیه نیز استفاده نمود.

با توجه به نتایج کار حاضر و از آن جایی که معادله حالت JCZ3 برخلاف معادله های حالت مانند BKW که متکی بر ضرایب تجربی و کالیبره شده آنها برای شرایط خاص می‌باشند، بر مبنای مفاهیم ترمودینامیک آماری می‌باشد، به نظر می‌رسد که معادله حالت JCZ3 جایگزین مناسبی برای معادله حالت BKW، حداقل در محاسبات ترمودینامیکی تراک، می‌باشد.

- [13]. Mader, C. L., "FORTRAN BKW: A Code for Computing the Detonation Properties of Explosives," LA-3704 Report, 1967.
- [14]. Gordon, S., McBride, B. J., "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions," [ftp:// ftp. grc. nasa. gov/users/xxminna/CEA+Fortran/cea/](ftp://ftp.grc.nasa.gov/users/xxminna/CEA+Fortran/cea/)
- [15]. Cooper, P. W., "Explosives Engineering," Wiley-VCH, 1996.
- [۱۰]. سرمستی، سیروس؛ مظاهری، کیومرث تعیین پارامتر های تعادلی تراک (Detonation) چین-ژوگت برای مواد شدید الانفجار. مجله علمی پژوهشی مواد پراثرزی، سال چهارم، شماره ۲، ص ۸۰-۷۱، پاییز و زمستان ۱۳۸۸.
- [11]. Van Wylen, G. J., Sonntag, R. E., "Fundamentals of Classical Thermodynamics," John Wiley & Sons Inc, 3rd edition , 1986.
- [12]. White, W. B., Johnson, S.M., Dantzig, G.B., "Chemical Equilibrium in Complex Mixtures," J. Chem. Phys., 1958, Vol. 28, pp. 751-755.