

تعیین پارامترهای معادلات حالت BKW و HOM برای محصولات انفجار

کیومرث مظاہری*، همت اسداللهی**

بخش مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

(دریافت مقاله: ۸۰/۷/۱۰ - در یافته نسخه نهایی: ۸۱/۰/۱۹)

چکیده- یکی از معادلات اساسی برای تحلیل انفجار، معادله حالت گازهای حاصل در شرایط غیرمتعارف حین انفجار است. به علت فشارهای بالای حین انفجار ($0.2 - 0.4 \text{ Mbar}$) فرض گاز ایدئال برای محصولات فرض غیر معقولی است. از طرف دیگر بدلیل محدودیتهای تجربی تعیین مستقیم معادله حالت ممکن نیست. لذا بایستی بهروش غیر مستقیم این معادله مشخص شود. یکی از معادلات پیشنهاد شده معادله BKW است که شامل چندین پارامتر است. در این مقاله با حل عددی همزمان معادلات بقا و حالت، سرعت پیشروی موج انفجار درون ماده منفجره محاسبه شده است. سپس با تغییر پارامترهای معادله حالت سعی می شود که مقادیر تئوری و تجربی سرعت موج به هم نزدیک شوند. در نهایت نتایج بدست آمده با نتایج موجود در مراجع مقایسه شده و دقیق کار مورد ارزیابی قرار گرفته است. به دلیل زمانبر بودن معادله BKW در کدهای رایانه ای معمولاً به جای معادله HOM از معادلات حالت HOM استفاده می شود. در این تحقیق ضرایب معادلات HOM نیز بدست آمده و با ضرایب ارائه شده در مراجع مقایسه شده است.

واژگان کلیدی: معادله حالت، شبیه سازی انفجار، دتونیشن، BKW، HOM.

Determination of the Parameters in HOM and BKW Equations Of State for Detonation Products

K. Mazaheri and H. Assadollahi

Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University

Abstract: One of the basic equations to analyze the detonation of high explosives is the equation of state of the detonation products. Due to the very high pressure of the product, the direct measurement of the thermodynamic variables such as pressure or temperature is not possible. In this research, the parameters of BKW and HOM equations of state of detonation products are determined via experimental measurement of the detonation velocity. Comparing the calculated parameters show good agreement with the published results for a vast range of explosives.

* - استادیار ** - کارشناسی ارشد

It is also shown that the curve fitting of the enthalpy of the products in standard states to a forth degree polynomial of temperature improves the results with respect to entropy fitting used by Mader.

Keywords: BKW, HOM, Equation of state, Detonation product, Explosion simulation.

فهرست علائم

تعداد مولهای فاز گاز	n_g	ماتریس فرمول محصولات	a_{ik}
تعداد مول جزء آنم	n_i	تعداد عنصر کام ماده منفجره	b_k
فشار	P	علامت نقطه چپمن-ژوگت	CJ
ثابت گازها	R	سرعت پیشروی موج درون ماده منفجره	D
انتروپی	S^0	انرژی داخلی	e
دما	T	انرژی داخلی محصولات گازی	E_j
زمان	t	انرژی آزاد هلمهولتز	F
سرعت	u	انتالپی	$H-H_0^0$
حجم مخصوص	v	انتالپی جزء آنم	h_i
حجم مخصوص گازهای حاصل از انفجار	v_g	گرمای تشکیل جزء i در صفر درجه کلوین	$(\Delta H_f^0)_i$
چگالی	ρ	جزء covolume	k_i
چگالی اولیه ماده منفجره	ρ_0	covolume	κ
BKW پارامترهای معادله حالت	$\theta, \beta, \alpha, \kappa$	تعداد عناصر مختلف ماده منفجره	m
		جرم مولکولی	M
		تعداد محصولات گازی انفجار	N

۱- مقدمه

چند پارامتر است به عنوان معادله حالت در نظر گرفته می شود. از طریق حل عددی این معادله به همراه معادلات بقا، پارامترها طوری تنظیم می شوند که نتایج حاصل از حل عددی و مقادیر اندازه گیری شده سرعت پیشروی موج بر هم مطابق شوند. در صورتی که حرکت موج به حالت دائم رسیده باشد سرعت پیشروی آن برای هر ماده منفجره در چگالی مشخص ثابت است برای اندازه گیری سرعت پیشروی موج کافی است زمان سیر موج پین دو نقطه مشخص از ماده منفجره اندازه گیری شده و سرعت متوسط را از تقسیم فاصله دو نقطه بر زمان تعیین کرد. در این تحقیق سعی شده است ابتدا پارامترهای معادله حالت BKW برای محصولات گازی انفجار مشخص شود. در

برای طراحی سیستمهایی که با مواد منفجره عمل می کنند لازم است اطلاعات دقیقی از نحوه ایجاد، پیشروی و گسترش موج انفجار در این مواد و مکانیسم عمل آنها در طی آزادسازی انرژی به دست آید. در تحلیل رفتار این سیستمها یکی از مسائل مهم مشخص نبودن معادله حالت گازهای حاصل از انفجار در شرایط غیر متعارف، حین انفجار خواهد بود. به علت فشارهای بسیار بالای حین انفجار فرض گاز ایدئال فرض غیر معقول است.

برای تعیین معادله حالت گازهای حاصل از انفجار از سرعت انفجار به عنوان پل ارتباطی بین نتایج تجربی و تئوری استفاده می شود. برای تعیین غیر مستقیم معادله حالت، شکلی که شامل

$$P = \frac{pRT}{1-bp^2} - ap^2 \quad (2)$$

در این معادله a معرف نیروهای جاذبه بین مولکولی است و بقیه پارامترها مانند قبل تعریف می‌شوند. در سال ۱۹۱۲ آقایان آتریچ^۱ و تافانل^۲ [۵] برای اولین بار از این معادله برای حل معادلات حاکم بر انفجار استفاده کردند. معادله حالت آبل ساده‌ترین معادله حالت تجربی برای ارتباط فشار گازهای غیرایدهال با دما و حجم گاز است. این معادله رفتار گازهای غیرایدهال را، فقط زمانی که حجم مخصوص در مقایسه با Covolume زیاد است، پیش‌بینی می‌کند. به همین خاطر محققان دیگر در ادامه سعی کردند بنا به نیاز خود این معادله را اصلاح کنند.

کوک [۲] در سال ۱۹۴۷ فرض کرد که مقدار b فقط تابع از دانسته ماده باشد. او نشان داد که بر روی منحنی $b-V$ مقدار b برای گازهای حاصل از انفجار اکثر مواد منفجره بدون توجه به نوع آنها بر روی یک منحنی قرار می‌گیرد که می‌توان آن را به صورت تقریبی ذیر نوشت:

$$b(p) = \exp(-0.4p)$$

بنابراین کوک معادله حالت آبل را به صورت ذیر ارائه کرد:

$$P = \frac{pnRT}{[1 - b(p)]} \quad (3)$$

معادلات حالت ویریال و ریگاس [۵ و ۷] نیز توسط بعضی محققان استفاده شده اند ولی برای تحلیل محصولات انفجار مورد استقبال زیادی قرار نگرفته اند.

در سال ۱۹۲۲ بکر برای محاسبه سرعتهای دتونیشن (انفجار) نیترو گلیسیرین و جیوه از فرمول ذیر استفاده کرد [۱]:

$$\frac{PV}{RT} = 1 + xe^x = F(x) \quad (4)$$

که $x = k/V$ است. بکر به این نتیجه رسید که سرعتهای انفجار محاسبه شده با این فرمول با یک دقت خوب، مرتبه سرعتهای تجربی را بیان می‌کنند.

کیستاکاوستکی و ویلسون^۳ در سال ۱۹۴۱ از معادله ذیر برای b استفاده کردند [۱]:

این معادله که از متداولترین معادلات حالت است، ضریب تراکم پذیری به صورت ترکیبی از چند پارامتر تعیین می‌شود. یکی دیگر از معادلات حالت که در کدهای انفجاری استفاده زیادی دارد معادله حالت HOM است. در این معادله برای گازهای حاصل از انفجار فشار و دما بر حسب تابع نمایی از حجم گازها، و انرژی داخلی بر حسب تابع نمایی از فشار مشخص می‌شوند. ضرایب این توابع را می‌توان با استفاده از معادله حالت BKW تعیین کرد.

در حالت کلی معادله حالت گازهای حاصل از انفجار تابع بسیار پیچیده‌ای از فشار، دانسته و دمایست. معادله حالت گاز آیدل فقط برای گازهای با فشار کم قابل قبول است. در فشار بالای گازهای حاصل از انفجار حجم مولکولهای تشکیل دهنده گاز در مقایسه با حجم کل گاز قابل مقایسه می‌شود. حجم مولکولها را با d نمایش می‌دهیم و در نتیجه $b = d/V$ اختلاف دو حجم است. در فشارهای بالا، اندازه فشار P به صورت معکوس با این اختلاف حجم مناسب است و این موضوع عامل اصلی انحراف رفتار گازها در فشارهای بالا از گاز آیدل است.

در چند دهه گذشته، معادلات حالت گوناگونی برای گازهای حاصل از انفجار پیشنهاد شده است. آبل [۵] با در نظر گرفتن حجمی که توسط مولکولهای گاز اشغال می‌شود معادله حالت ذیر را پیشنهاد کرد:

$$P(v-b) = nRT$$

یا به عبارت دیگر:

$$P = \frac{pnRT}{1-bp} \quad (1)$$

که در آن d مشخصه‌ای از حجم اشغال شده توسط مولکولهای گاز (Covolume) واحد وزن گاز است. $n=1/M$. عکس جرم مولکولی متوسط محصولات گازی انفجار، R ثابت گازها و p چگالی است.

واندروالس مرجع [۴] در سال ۱۸۷۳ برای بالابردن دقت معادله حالت آبل، با اضافه کردن یک جمله برای نیروی جاذبه بین مولکولی به معادله آبل، معادله حللت ذیر را ارائه داد:

جدول ۱- پارامترهای پیشنهادی معادله حالت BKW

پارامتر	α	β	κ	θ
RDX خانواده	0.5	0.16	10.90978	400
TNT خانواده	0.5	0.09585	12.685	400

جدول ۲- مقادیر Covolume

	H2O	H2	H	OH	O2	CO2	CO	NH3	CH4	NO	N2
Covolums	250	180	76	413	350	600	390	476	528	386	380

محصولات است در مطالعه پارامتری معادله BKW می‌توان پارامترهای α ، β و θ را طوری با هم تطبیق داد که نتایج تجربی و تئوری با هم سازگاری داشته باشند. مقادیر پارامترهای BKW و Covolume های متداول در جدولهای (۱) و (۲) آمده اند [۱].

پارامترهای خانواده RDX برای اکثر مواد منفجره کاربرد دارد و پارامترهای خانواده TNT برای مواد منفجره‌ای نظیر TNT که مقدار کربن جامد موجود در محصولات انفجارشان چشمگیر است به کار می‌رود.

در معادله حالت HOM فشار و دمای محصولات انفجار بر حسب حجم گازها، و انرژی داخلی بر حسب فشار محاسبه می‌شوند. این معادلات به شکل زیرند [۱] :

$$\begin{aligned} \ln(P_i) = & A + B[\ln(v_g)] + C[\ln(v_g)]^2 + \\ & D[\ln(v_g)]^3 + E[\ln(v_g)]^4 \end{aligned} \quad (۸)$$

$$\begin{aligned} \ln(I_i) = & K + L[\ln P_i] + M[\ln P_i]^2 + N[\ln P_i]^3 + \\ & O[\ln P_i]^4 \end{aligned} \quad (۹)$$

$$\begin{aligned} \ln(T_i) = & Q + R[\ln(v_g)] + S[\ln(v_g)]^2 + \\ & T[\ln(v_g)]^3 + U[\ln(v_g)]^4 \end{aligned} \quad (۱۰)$$

- در معادلات (۸) تا (۱۰) اندیس g مربوط به گاز و اندیس i مربوط به پروسه ایزوتروپیک است . برای محاسبه ضرایب معادله حالت HOM ابتدا با استفاده از معادله حالت BKW فشار، حجم گازها، دما ، انرژی، و انتروپی محصولات انفجار محاسبه می‌شود. سپس در فشارهایی حدود فشار انفجار با استفاده از معادله حالت BKW

$$x = \frac{\kappa}{VT^{1/3}} \quad (۵)$$

که κ Covolume بوده و می‌تواند به صورت یک تابع از ملکولهای تشکیل دهنده اجزای گازی محصولات، برای اکثر مواد منفجره تقریب زده شود. کیستاکاوسکی و ویلسون اضافه کردن β به جمله دافعه را به آقایان ماکلوگال و اپستین^۴ نسبت دادند. با اضافه کردن β به جمله دافعه خواهیم داشت:

$$\frac{PV}{RT} = 1 + xe^{\beta x}; \quad x = \frac{\kappa}{VT^\alpha} \quad (۶)$$

برای مطابقت نتایج تجربی و تئوری سرعت انفجار برای اکثر مواد منفجره مقادیر $\alpha=0.25$ و $\beta=0.3$ پیشنهاد شد. در معادله (۶) وقتی دما به سمت صفر میل می‌کند فشار بین نهایت می‌شود. کوان و فیکت^۵ برای رفع این مشکل در محدوده حجمها مورد استفاده جمله θ را به T در مخرج رابطه اضافه کردند. آنها همچنین برای تطابق مقادیر سرعت پیشروی موج تجربی و تئوری بر حسب چگالی، برای ترکیب B مقادیر $\alpha=5$ و $\beta=0.09$ را پیشنهاد کردند و برای θ مقدار 400 را در نظر گرفتند. آنها در نهایت فرمول زیر را ارائه دادند:

$$\frac{PV}{RT} = 1 + xe^{\beta x} = F(x) \quad (۷)$$

که x و κ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$x = \frac{\kappa}{V(T+\theta)^\alpha}; \quad \kappa = k \sum x_i k_i$$

نامبر دگان k را برابر $11/85$ در نظر گرفتند. در فرمول بالا، k_i هندسی محصولات گازی انفجار و x_i کسر مولی

حل کردند [۸]. کد BKW اولین کدی بود که برای مواد منفجره (دارای هر ترکیب) نوشته شد. این کد در سال ۱۹۵۶ برای رایانه IBM 704 نوشته شد و بعداً برای رایانه IBM 7090 در سال ۱۹۶۱ STRETCH BKW مورد استفاده قرار گرفت. کد BKW برای رایانه IBM 7030 نوشته شد. در سال ۱۹۷۷، این کد به زبان فرترن ۴ نوشته شد. نسخه های دیگر کد BKW در دهه ۱۹۶۰ و ۱۹۷۰ نوشته شدند [۱]. به طور کلی کدهای متعددی برای محاسبه خواص مواد منفجره موجود است از این کدها می توان به موارد زیر اشاره کرد [۱۲]:

STRETCH BKW, RUBY, LA MINEUR, ARPEGE, TIGER, FORTRAN, BKW, ...

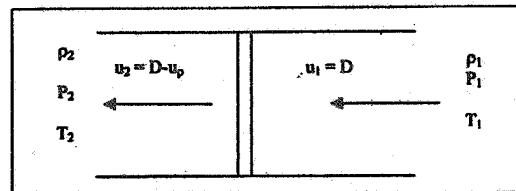
یکی از این کدها، کدی است که مدر^۱ به زبان فرترن به نام W ارائه داده است. این کد یکی از مراجع اسپاتنادرد در محاسبات مربوط به انفجار است نتایج کد نوشته شده در این تحقیق برای اطمینان از عملکرد صحیح با نتایج این کد مقایسه خواهد شد. در ایران تنها یُک تحقیق در این زمینه انجام شده است. این تحقیق توسط حسین پور صورت پذیرفته است [۱۸]. ایشان در تحقیق خود عمدتاً از معادلات موجود در مرجع [۱] استفاده کرده اند.

۲- معادلات رانکین - هو گونیوت

فرایند انفجار به طور کلی به این گونه است که یک موج ضربه ای در مخلوطهای انفجاری و یا ماده انفجاری ایجاد شده و پیشروی می کند. پشت این جبهه فعل و اتفعالت شیمیایی شروع شده و با آزاد کردن انرژی، حرکت موج ضربه ای را پشتیانی می کنند. به این موج، موج دتونیشن می گوییم. فرق عمدتی ای که بین انفجار مخلوطهای گازی قابل اشتعال و مواد منفجره^۹ وجود دارد در ساختمان شیمیایی مولکولهای این مواد است.

برای تحلیل حرکت این موج، با قرار دادن دستگاه مختصات بر روی جبهه موج، مسئله را می توان دائم در نظر گرفت. اگر یک حجم معیار در اطراف موج در نظر بگیریم قوانین بقای شکل زیر بیان می شوند، شکل (۱)

بقای جرم: $\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2$



شکل ۱- حرکت موج انفجار درون ماده منفجره از دید ناظر سوار بر موج

برای یک فرایند ایزونتریپیک، دما، انرژی داخلی، و جسم محصولات گازی به دست می آیند. در ادامه با مقداری به دست آمده و استفاده از روش برازش بر منحنی^۷ ضرایب معادله حالت HOM، معادلات (۸) تا (۱۰) محاسبه می شوند.

با استفاده از معادله حالت HOM برای محصولات گازی انفجار می توان رفتاز انساطی این مواد را بعد از انفجار مورد تجزیه و تحلیل قرار داد. ضرایب معادله حالت HOM بر

BKW می توان به صورت زیر برشمرد:

- در معادله حالت BKW هر بار بایستی ترکیب تعادل شیمیایی محصولات به دست آید تا بتوان دما، فشار و ... را به دست آورد اما در معادله حالت HOM نیاز به این کار نیست.

- معادله حالت HOM فرمول صریحی برای فشار، دما و انرژی داخلی داده و بقیه پارامترهای ترمودینامیکی را می توان از روابط ترمودینامیکی استخراج کرد.

- در معادله حالت BKW در هر بار محاسبه، نیاز به حدس اولیه برای مقداری ترمودینامیکی فشار و دماست و این روش نیاز به تکرارهای زیاد دارد.

مزیت معادله حالت KW بر HOM این است که اولاً مقداری ترکیب تعادل محصولات را مشخص می کند، و ثانیاً جوابهای دقیقتری برای مقداری ترمودینامیکی (دما، فشار و ...) ارائه می دهد.

کاربرد عمدت این معادلات در کدهای توسعه داده شده برای تحلیل انفجارناشی از مواد شدید انفجار است. برای اولین بار کوان و فیکت در سال ۱۹۵۴ معادلات حاکم بر انفجار را با استفاده از معادله حالت BKW وفرض تعادل شیمیایی برای محصولات انفجار، برای مواد منفجره دارای ترکیب CHNO،

بقای ممتومن:

بقای انرژی :

$$P_1 + \rho_1 u_1^2 = P_2 + \rho_2 u_2^2$$

$$h_1 + \frac{1}{2} u_1^2 + q = h_2 + \frac{1}{2} u_2^2$$

در این روابط P فشار، u سرعت، h انتالپی، و q انرژی حاصل از انفجار بر واحد جرم است. فرضیاتی که در نوشتمن این معادلات منظور شده است عبارت اند از: ۱- اجریان یک بعدی، ۲- جریان حالت دائم، ۳- صفر بودن نیروهای حجمی، ۴- چشم پوشی از اثرات نفوذ مولکولی، و ۵- فرض تعادل شیمیابی برای محصولات.

از ترکیب معادلات بقای جرم و بقای ممتومن معادله خط

ریلی^{۱۰} به صورت زیر بدست می‌آید:

$$y = \left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1} \right) - \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1} x = A - Bx, \quad x = \frac{P_2}{P_1}$$

$$y = \frac{\rho_1}{P_2} = \frac{v_2}{v_1}$$

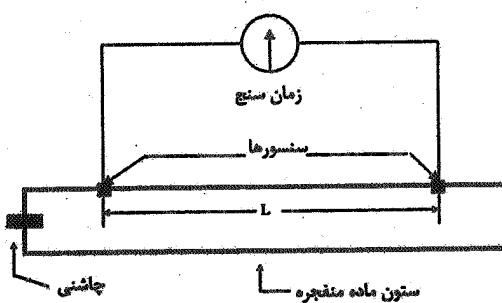
از ترکیب معادلات بقای جرم، ممتومن و انرژی معادله رانکیس- هوگونیوت^{۱۱} به دست می‌آید:

$$h_2 - (h_1 + q) = \frac{1}{2}(P_2 - P_1)(v_1 + v_2)$$

دتونیشن طبیعی در حالت دائم یک جواب بیشتر ندارد جواب پایدار جوابی است که از مماس کردن خط ریلی بر منحنی هوگونیوت به دست می‌آید (فرضیه چهمن-زروگت^{۱۲}). برای کامل کردن سیستم معادلات نیاز به معادله حالت محصولات انفجار است.

۳- اندازه گیری سرعت انفجار یا سرعت پیشروی موج انفجار درون ماده منفجره

مواد منفجره جامد نظیر RDX و HMX و... به صورت پودر در دسترس آند و در صنعت برای شکل دهی باید توسط پرس متراکم شوند. برای تعیین سرعت دتونیشن در هر کدام از این مواد در چگالیهای مختلف، ابتدا پودر ماده منفجره تا چگالی مورد نظر متراکم شده و سپس سرعت دتونیشن در آنها اندازه گیری می‌شود. از آنجا که سرعت دتونیشن درون ماده منفجره شدیداً تابع چگالی است لذا چگالی ماده منفجره بایستی



شکل ۲- شماتیک دستگاه اندازه گیری سرعت موج انفجار

تا حد امکان یکنواخت باشد. برای دستیابی به این مسهم بایستی مواد در چند مرحله فشرده شوند.

روشهای متعددی برای اندازه گیری سرعت دتونیشن درون ماده منفجره وجود دارد. روش مورد استفاده در این تحقیق به این صورت است که دو سنسور یونی که با سیم به دستگاه زمان سنج وصل اند مطابق شکل (۲) در دو نقطه با فاصله مشخص روی ستون ماده منفجره قرار می‌گیرند. این دو سنسور با دریافت جبهه موج انفجار علاوه بر دستگاه زمان سنج ارسال کرده و دستگاه زمان سنج، زمان سیر موج بین این دو نقطه را ثبت می‌کند. وقت این دستگاه یک دهم میکرو ثانیه است. برای رسیدن حرکت موج به حالت دائم اولین سنسور باید به اندازه کافی از ابتدای ستون ماده منفجره فاصله داشته باشد. این فاصله به نوع و قطر ماده منفجره بستگی دارد. برای تست عملکرد صحیح دستگاه، نتایج حاصله با نتایج دستگاه مشابه خارجی (در شرایط یکسان) مورد مقایسه قرار گرفت، که نتایج حدود یک دهم میکرو ثانیه با هم اختلاف داشتند.

برای اطمینان از تشکیل یک موج پایدار نمونه‌های ماده منفجره مورد استفاده با طول ۱۰ و قطر ۳ سانتی متر انتخاب شدند. برای هر آزمایش دو قرص در امتداد یکدیگر قرار داده شد و اندازه گیری زمان در قرص دوم صورت گرفت. در آزمایش‌های انجام شده فاصله دو سنسور ۷/۵ سانتی متر بود.

۴- توابع ترمودینامیکی محصولات انفجار (۱)

برای حل معادلات حاکم بر انفجار (معادلات بقا و معادله

$$\frac{S_g}{R} = \sum_i x_i \frac{(S^0)_i}{R} - \sum_i x_i \ln x_i - \ln \frac{P}{P^0} + \quad (15)$$

$$\ln F(x) - \frac{e^{\beta x} - 1}{\beta} + \frac{\alpha T}{T + \theta} (F(x) - 1)$$

$$\frac{\mu_i}{RT} = \frac{(F^0 - H_0^0)_i}{RT} + \frac{(H_0^0)_i}{RT} + \ln \frac{x_i P}{P^0} + \frac{e^{\beta x} - 1}{\beta} - \ln F(x) + \frac{k_i}{k} (F(x) - 1) \quad (16)$$

ملاحظه می شود در محاسبه خواص ترمودینامیکی محصولات انفجار (انرژی داخلی، انتروپی و پتانسیل شیمیایی) نیاز به محاسبه توابع ترمودینامیکی $\left[(F^0 - H_0^0)(H - H_0^0) \right]_{S_i^0}$ است به عبارت دیگر، این

معادلات را می توان به شکل زیر نشان داد:

$$E = \sum_i x_i \left[(H^0 - H_0^0)_i + (H_0^0)_i - RT \right] + E^\Delta \quad (17)$$

$$S = \sum_i x_i S_i^0 - \sum_i x_i R \ln \frac{x_i RT}{V} + S^\Delta \quad (18)$$

$$\mu_i = (F^0 - H_0^0)_i + (H_0^0)_i + RT \ln \frac{x_i RT}{V} + \mu_i^\Delta \quad (19)$$

که E^Δ و S^Δ به ترتیب انرژی داخلی، انتروپی و پتانسیل شیمیایی گاز غیر ایدئال اند. این پارامترها تابع معادله حالت محصولات انفجار (معادله BKW) هستند. سایر جملات مقادیر توابع ترمودینامیکی برای حالت استاندارد که برای اکثر مواد از دمای صفر تا ۱۰۰۰ درجه کلوین در جداول موجود است. میانیابی کردن این جداول پر زحمت است. بنابراین برای دقت بالا این مقادیر به صورت توابعی از دما برازش می شوند. روش‌های مختلفی برای برازش این مقادیر پیشنهاد شده است.

در ترمودینامیک کلاسیک معمولاً C_p^0 به صورت چند جمله‌ای درجه ۲ و یا ۴ از دمای T تنشته می شود. برای بهبود نتایج مدر پیشنهاد کرد که توابع ترمودینامیکی بر اساس انتروپی در شرایط استاندارد محاسبه شوند [۱]. مدر چند جمله‌ای درجه ۴ از دما پرای S^0 به شکل زیر پیشنهاد کرد:

$$S^0 = b_1 + b_2 T + b_3 T^2 + b_4 T^3 + b_5 T^4 \quad (20)$$

از معادله (۲۰) معادلات زیر را می توان استخراج کرد:

$$H^0 - H_0^0 = \int T ds = \frac{1}{2} b_2 T^2 + \frac{2}{3} b_3 T^3 + \frac{3}{4} b_4 T^4 + \frac{4}{5} b_5 T^5 + b_6 \quad (21)$$

حالت)، نیاز به محاسبه انرژی داخلی، انتروپی و انرژی آزاد محصولات انفجار با استفاده از روابط ترمودینامیکی است. ارتباط انرژی داخلی با حجم با معادله زیر بیان می شود (معادلات ماکسول^۳):

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \quad (11)$$

اگر از رابطه بالا در دما و ترکیب ثابت انتگرال گیری کنیم انرژی داخلی سیستم در دما و حجم (T, V) بر حسب انرژی در دمای T و حجم مبنای V^* به دست می آید:

$$E(T, V) = E(T, V^*) + \int_{V^*}^V [T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P] dV \quad (12)$$

در معادلات بالا P ، V و E به ترتیب فشار، دما، حجم مخصوص و انرژی داخلی اند. حالت مبنای استاندارد حالتی است که فشار به سمت صفر میل می کند. زمانی که P به سمت صفر میل می کند V به سمت بی‌نهایت میل می کند و رفتار گاز رفتار گاز ایدئال است.

زمانی که V^* به سمت بی‌نهایت میل کند جمله $(E(T, V^*))$ در معادله (۱۲) را می توان به صورت جمع انرژیهای داخلی گونه‌ها^۴ نوشت:

$$E_g(T, \infty) = \sum_i x_i (E_T^0)_i = \sum_i x_i (E_T^0 - H_0^0)_i + \sum_i x_i (H_0^0)_i \quad (13)$$

بالا نویس^۵ اشاره به حالت مبنای دارد (برای گاز ایدئال در فشار P^0 و دمای T). آن x_i کسری مولی جزء نام، H_0^0 انتالپی تشکیل در صفر مطلق، و E_T^0 انرژی داخلی در فشار صفر و دمای T است حال با توجه به معادله حالت BKW می توان نشان داد:

$$\frac{E_g(T, V)}{RT} = \sum_i x_i \frac{(E^0 - H_0^0)_i}{RT} + \sum_i x_i \frac{(H_0^0)_i}{RT} + \frac{\alpha T}{T + \theta} (F(x) - 1) \quad (14)$$

برای محاسبه انرژی داخلی محصولات گازی انفجار از معادله (۱۴) استفاده می شود در این معادله R ثابت جهانی گازهاست. با شیوه ای مشابه توابع آنتروپی و انرژی آزاد گازهای حاصل از انفجار به صورت زیر به دست می آیند^۶:

به دست آورد:

$$C_p^0 = \frac{\partial(H^0 - H_0^0)}{\partial T} = c_2 + 2c_3T + 3c_4T^2 + 4c_5T^3 \quad (26)$$

$$S^0 = \int \frac{C_p^0}{T} dT = c_6 + c_2 \ln T + 2c_3T + \frac{3}{2}c_4T^2 + \frac{4}{3}c_5T^3 \quad (27)$$

$$-(F^0 - H_0^0) = S^0T - (H^0 - H_0^0) \quad (27)$$

$$-c_1 + c_6T + c_2T(\ln T - 1) + c_3T^2 + \frac{1}{2}c_4T^3 + \frac{1}{3}c_5T^4$$

که c_1 تا c_5 ضرایب چند جمله‌ای و c_6 ثابت انتگرال است.

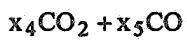
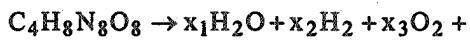
این ضرایب در پیوست الف جدول (الف-۲) آمده‌اند.

در تحقیق حاضر جوابهای به دست آمده از دور روش برآش بس اساس انتربی و انتالپی با هم مورد مقایسه قرارخواهد گرفت.

۵- الگوریتم پر فامه

در کد حاضر برای به دست آوردن ترکیب تعادل شیمیایی محصولات، از شکل اصلاح شده روشی که اولین بار وايت، جانسون^{۱۶} و دانتزیک در سال ۱۹۵۸ ارائه کردند، استفاده می‌شود^[۶]. در این روش برای به دست آوردن ترکیب تعادل شیمیایی محصولات از روش مینیمم کردن انحراف آزاد در فشار و دمای ثابت، تحت شرط بقای عناصر شیمیایی استفاده می‌شود.

فرض کنیم فرمول مساده منفجره $C_4H_8N_8O_8$ محصولات O_2 ، H_2 ، H_2O ، O_2 و CO باشند. بنابراین واکنش به صورت زیر انجام می‌پذیرد:



که x_1 تا x_5 مقادیر مولی محصولات اند. قانون بقای عناصر را به صورت زیر می‌توان بیان کرد:

$$\sum_{i=1}^n a_{ij}x_i = b_j \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (28)$$

که در این رابطه m تعداد عناصر مختلف موجود در ماده منفجره، a_{ij} تعداد اتمهای عنصر j ام در محصول i ام، b_j تعداد عنصر j ام در ماده منفجره، و n تعداد محصولات است. در این

جدول ۳- ضرایب ماقریس فرمول محصولات

i ↓	j= محصول	1	2	3	4
	C	H	N	O	
1	H ₂ O	0	2	0	1
2	H ₂	0	2	0	0
3	O ₂	0	0	0	2
4	CO ₂	1	0	0	2
5	CO	1	0	0	1
	\sum	4	8	8	8

$$F = H - TS \Rightarrow -(F^0 - H_0^0) = S^0T - (H^0 - H_0^0) = b_6 - b_1T - \frac{1}{2}b_2T^2 - \frac{1}{3}b_3T^3 - \frac{1}{4}b_4T^4 - \frac{1}{5}b_5T^5 \quad (22)$$

$$C_p^0 = \frac{\partial(H^0 - H_0^0)}{\partial T} = b_2T + 2b_3T^2 + 3b_4T^3 + 4b_5T^4 \quad (23)$$

که b_1 تا b_5 ضرایب چند جمله‌ای و b_6 ثابت انتگرال است. مقادیر b_1 تا b_5 در پیوست الف جدول (الف-۱) آمده است.

معادلات بالا به وسیله مدل‌یک زیر برنامه به نام TDF که یک قسمت از کد معروف BKW است، استفاده شده است^[۱] اما دمای دتونیشن محاسبه شده با این کد پائیتر از مقادیر تجربی دماس است. به طور مثال دسای دتونیشن تجربی ترانیترومتان (TNM) در چگالی $1/14 \text{ gr/cm}^3$ برابر با 2800°K است و مقدار محاسبه شده کد BKW برابر با 2341°K است.

در یک کد نظری BKW برای محاسبه خواص دتونیشن مواد منفجره توابع ترمودینامیکی تا همگرا شدن برنامه (به روش تکرار) به طور مرتب استفاده می‌شوند. برای مثال برای حل ترکیب تعادل تعداد استفاده از توابع ترمودینامیکی حدود ۱۰ مرتبه، برای محاسبات نقطه CJ حدود صد مرتبه و برای محاسبات هوگوئیوت و ایزوونتروپ بیش از صد مرتبه است. بنابراین معادلات مناسبی از توابع ترمودینامیکی برای بهبود دقت مورد نیاز است. طبق پیشنهاد مرجع [۶] بهتر است از برآذش درجه ۴ انتالپی از دما به صورت زیر استفاده کرد.

$$H^0 - H_0^0 = c_1 + c_2T + c_3T^2 + c_4T^3 + c_5T^4 \quad (24)$$

حال می‌توان سایر پارامترهای مورد نیاز را از انتالپی

حدائق مربعت.

۱۰- ثبت نتایج در فایل های خروجی.

شکل (۳) فلوچارت الگوریتم را نشان می دهد.

۶- نتایج نرم افزار تهیه شده برای معادله حالت

BKW

همان طور که گفته شد مطابق جدول (۱)، دو دسته پارامتر برای معادله حالت BKW پیشنهاد شده است [۱]، پارامترهای خانواده RDX و خانواده TNT. در کد توسعه داده شده امکان وجود ۱۲ گونه شیمیایی به صورت محصولات انفجار دو نظر گرفته شده است. یکی از این محصولات کرین جامد (گرافیت) بوده و ۱۱ گونه دیگر گازی هستند که در جدول (۲) Covolume

روند کار برنامه را می توان به صورت زیر خلاصه کرد:

مثال $n=4$ و $m=5$ و مقادیر ماتریس فرمول^۷ محصولات z_{ij}^{jk} و b_j^k به صورت جدول (۳) تعریف می شوند.

برای مینیمم کردن انرژی آزاد محصولات تحت شرط ارضای بقای عناصر، از روش ضرایب لاگرانژ^۸ استفاده می شود [۱]. ورودیهای این برنامه عبارت خواهند بود از ۱- نام و فرمول محصولات، ۲- ماتریس فرمول محصولات، ۳- Covolume محصولات، ۴- ضرایب لازم برای برآذش درجه چهارم انتروپی یا انتالپی استاندارد بر حسب دما، ۵- ضرایب معادله حالت Cowan برای محصولات جامد، و ۶- پارامترهای معادله حالت $(\alpha, \beta, \kappa, \theta)$.

نتایج اجرای نرم افزار ایجاد شده با پارامترهای موجود در مرجع [۱]، برای دو چگالی از RDX و یک چگالی از HMX در جدول (۴) آمده است. نتایج همچنین با نتایج مرجع [۱۸] که تنها کار انجام شده در این زمینه در ایران است، مقایسه شده است.

ملحوظه می شود که مقادیر محاسبه شده با نرم افزار فعلی کاملاً در محدوده نتایج مرجع [۱] و نتایج تجربی هستند. این موضوع مؤید صحبت عملکرد نرم افزار است. همچنین مشاهده می شود که دقیق نرم افزار حاضر از دقیق نرم افزار ارائه شده در مرجع [۱۸] بیشتر است. از طرف دیگر مشاهده می شود که نتایج حاصل از برآذش انتروپی و انتالپی به هم نزدیک است. دما و سرعت انفجار حاصل از برآذش انتالپی کمتر از مقادیر متناظر حاصل از برآذش انتروپی است.

۷- نتایج نرم افزار تهیه شده برای معادله حالت

HOM

برای اطمینان از صحبت ضرایبی که توسط نرم افزار حاضر برای معادله حالت HOM پیش‌بینی می شود، نتایج به دست آمده برای RDX در چگالی ۱.۸gr/cc بر اساس برآذش انتروپی مورد مقایسه قرار می گیرند. در تعیین ضرایب معادله

۱- حدس مقایر اولیه برای فشار، دما و ترکیب تعادل شیمیایی محصولات.

۲- تعیین ترکیب شیمیایی دقیق محصولات، برای فشار و دمای حدسی با مینیمم کردن انرژی آزاد.

۳- تعیین انرژی داخلی محصولات.

۴- تصحیح دمای محصولات با استفاده از معادله رنکین - هوگو نیوت.

۵- استفاده از معادله خط ریلی و تعیین سرعت پیشروی موج درون ماده منفجره.

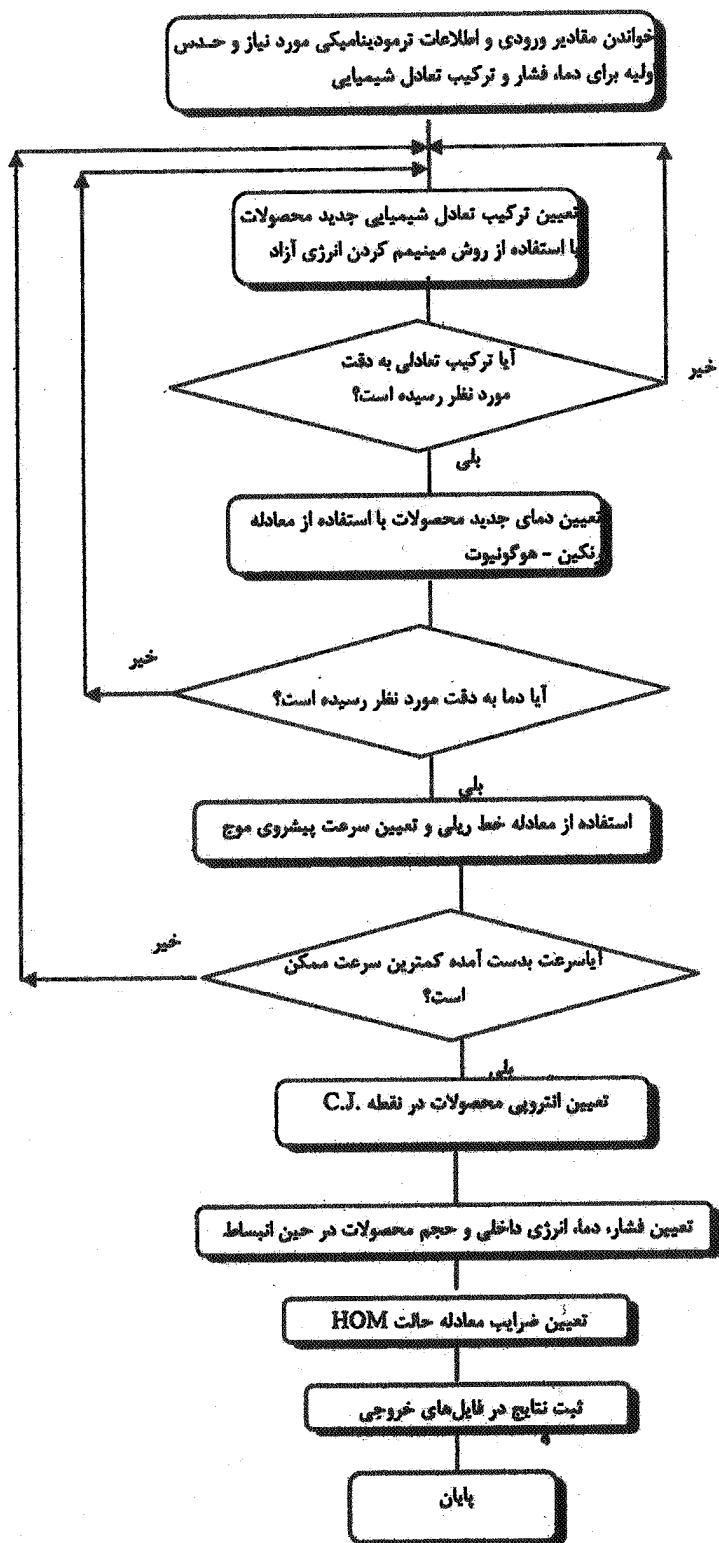
۶- مراحل (۱) تا (۵) برای سه فشار حدسی انجام می شود و سه سرعت به دست می آید.

۷- استفاده از شرط چمن زوگت. اعمال این شرط معادل مینیمم کردن سرعت پیشروی موج است. برای این کار با سه سرعت و فشار حاصله از مراحل قبل و با استفاده از تکنیک مینیمم کردن تابع درجه دوم، فشار مینیمم تعیین می شود. با این فشار، مقادیر حدسی اولیه فشار اصلاح می شود. این کار تا زمانی صورت می گیرد که سرعت موج حاصله کمترین مقدار خود را اختیار کند.

۸- تعیین انتروپی کل محصولات انفجار.

۹- تعیین فشار، دما، انرژی داخلی، و حجم محصولات هنگام انبساط.

۱۰- تعیین ضرایب معادله حالت HOM با استفاده از روش



شکل ۳- نمودار جریانی برنامه

جدول ۴- مقایسه نتایج نرم افزار حاضر با نتایج مراجع [۱] و [۱۸]

	γ	P(Mbar)	T(K)	D(m/s)	$\rho(g/cm^3)$	نوع ماده
[۱] نتایج تجربی	2.98	.347	—	8754	1.8	RDX
کار حاضر(برازش انتالپی)	2.98	.347	2575	8763	1.8	RDX
کار حاضر(برازش انتروپی)	2.98	.348	2591	8769	1.8	RDX
(برازش انتروپی) [۱] مرجع	2.98	.347	2587	8754	1.8	RDX
[۱۸] مرجع	3.03	.350	2774	8847	1.8	RDX
[۱] نتایج تجربی	—	—	—	5981	1.0	RDX
کار حاضر(برازش انتالپی)	2.43	.108	3558	6083	1.0	RDX
کار حاضر(برازش انتروپی)	2.48	.108	3603	6139	1.0	RDX
(برازش انتروپی) [۱] مرجع	2.48	.108	3600	6128	1.0	RDX
[۱۸] مرجع	2.38	.112	3824	6143	1.0	RDX
[۱] نتایج تجربی	3.00	.393	—	9100	1.9	HMX
کار حاضر(برازش انتالپی)	3.04	.395	2345	9168	1.9	HMX
کار حاضر(برازش انتروپی)	3.04	.396	2367	9175	1.9	HMX
(برازش انتروپی) [۱] مرجع	3.03	.395	2364	9159	1.9	HMX
[۱۸] مرجع	3.11	.397	2539	9274	1.9	HMX

منفجره، می‌توان پارامترها و ضرایب معادلات حالت BKW و HOM را برای مواد منفجره مورد نظر تعیین کرد.

۸- نتایج تجربی سرعت پیشروی موج انفجار درون

ماده منفجره

در کار تجربی این تحقیق سرعت موج انفجار درون ماده منفجره با استفاده از یک زمان سنج الکتریکی با دقت یکدهم میکروثانیه، اندازه گیری شده است. برای هر ماده منفجره، آزمایش در چهار چگالی انجام گرفته است و آزمایش مورد نظر در هر چگالی سه بار تکرار شده است. نتایج به دست آمده از آزمایشهای انجام شده در شکل‌های (۴) تا (۶) آمده است.

حال HOM، همان طور که گفته شد، نیاز است که در یک فرایند انتروپی ثابت (ایزنتروپیک) فشار محصولات را کم کرده و در هر فشار مقادیر دما، حجم، و انرژی داخلی محصولات را تعیین کرد. در ادامه از طریق برآذش کردن نتایج با معادله حالت HOM، ضرایب معادله تعیین می‌شود.

در جدولهای (۵) تا (۷) ضرایب معادلات حالت HOM معادلات (۸) تا (۱۰) که توسط نرم افزار حاضر به دست آمده با نتایج مرجع [۱] مقایسه شده است. ملاحظه می‌شود ضرایب معادلات حالت HOM به دست آمده توسط برنامه، در محدوده جوابهای مرجع [۱] هستند.

نتایج ارائه شده نشان دهنده عملکرد صحیح برنامه است. حال با استفاده از نتایج تجربی سرعت پیشروی موج درون ماده

جدول ۵- ضرایب معادله (۸) برای RDX در چگالی اولیه ۱/۸gr/cc

	A	B	C	D	E
نرم‌افزار حاضر	-3.4887	-2.5525	0.25746	0.014127	-0.0110123
[۱] مرجع	-3.4923	-2.5519	0.25778	0.013439	-0.0108918

جدول ۶- ضرایب معادله (۹) برای RDX در چگالی اولیه ۱/۸gr/cc

	K	L	M	N	O
نرم‌افزار حاضر	-1.6360	0.47294	0.052016	-0.0032475	0.00005525
[۱] مرجع	-1.6025	0.52323	0.06760	-0.0043215	0.00001099

جدول ۷- ضرایب معادله (۱۰) برای RDX در چگالی اولیه ۱/۸gr/cc

	Q	R	S	T	U
نرم‌افزار حاضر	7.4154	-0.493447	0.039683	0.030509	-0.010949
[۱] مرجع	7.4144	-0.491668	0.040004	0.029307	-0.010670

سرعت با چگالی خطی است. این ارتباط را معمولاً با فرمول زیر بیان می‌کنند:

$$D = a + bp_0 \quad (۲۹)$$

که D سرعت انفجار بر حسب $cm/\mu s$ و p_0 چگالی اولیه ماده منفجره بر حسب gr/cc است مقادیر ضرایب a و b برای مواد مورد آزمایش در جدول (۸) آمده است.

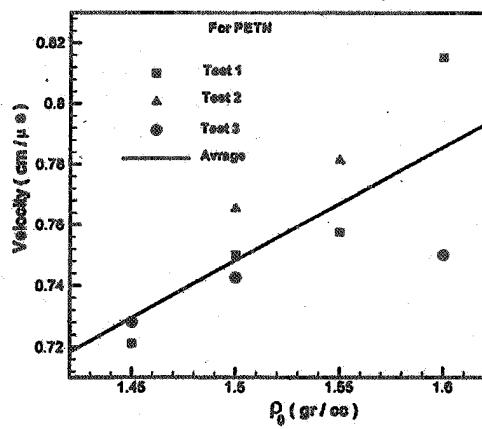
۱۰- تعیین پارامترهای معادله حالت BKW برای مواد مورد آزمایش

کاربرد اصلی کد تهیه شده در تعیین پارامترهای معادله حالت BKW، برای یک ماده منفجره جدید است. کوان و فیکت [۸] نشان دادند که در یک (α, β) مشخص مطابق شکل (۱۰) تغییر κ تنها نقاط ابتدایی و انتهایی نمودار $D-p_0$ را تغییر می‌دهد و تغییر چندانی در شبیب آن ایجاد نمی‌کند. از طرف دیگر آنها نشان دادند که با تغییر β در یک چگالی خاص می‌توان شبیب منحنی $D-p_0$ را تغییر داد، شکل (۱۱). در این شکل مقدار

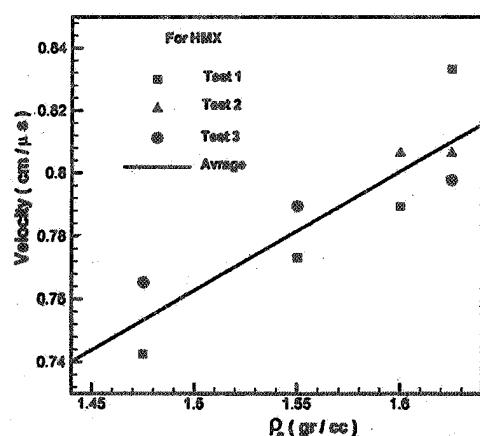
در شکل‌های (۴) تا (۶) ملاحظه می‌شود که رابطه سرعت انفجار با چگالی اولیه ماده منفجره خطی است. معمولاً برای استفاده از نتایج تجربی، از میانگین نتایج سرعت در هر چگالی استفاده می‌شود. نسبت به مقادیر میانگین بیشترین درصد انحراف نتایج تجربی حاصل نسبت به مقدار میانگین برای HMX ۲/۵۶ درصد، برای PETN ۴/۴ درصد، و برای RDX ۲/۱۳ درصد است. بیشترین انحراف مربوط به چگالی‌های بیشتر است و این به دلیل آن است که در چگالی‌های بالا مسئله غیریکنواختی چگالی محسوس‌تر است.

۹- مقایسه نتایج تجربی سرعت با نتایج تئوری

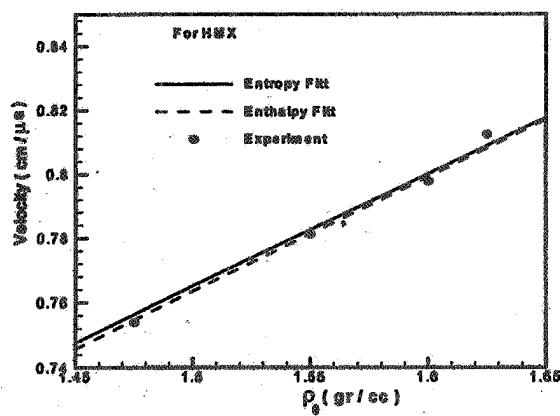
در شکل‌های (۷) تا (۹) نتایج تئوری و تجربی مقادیر متوسط سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه ماده منفجره با هم مقایسه شده است. ملاحظه می‌شود که برای مواد مورد آزمایش، نتایج تجربی به نتایج تئوری حاصل از برآشش انتالپی نزدیک‌تر است. همان طور که نمودارهای ارائه شده نشان می‌دهند ارتباط



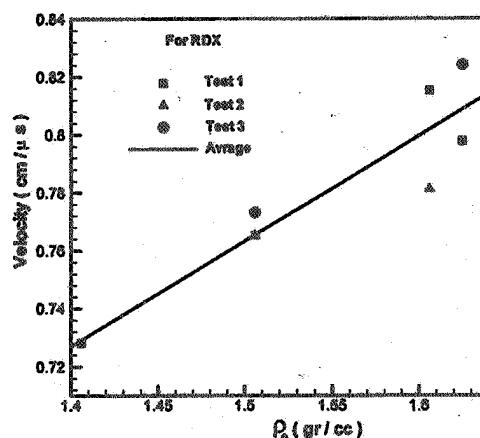
شکل ۵- نتایج تجربی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای PETN



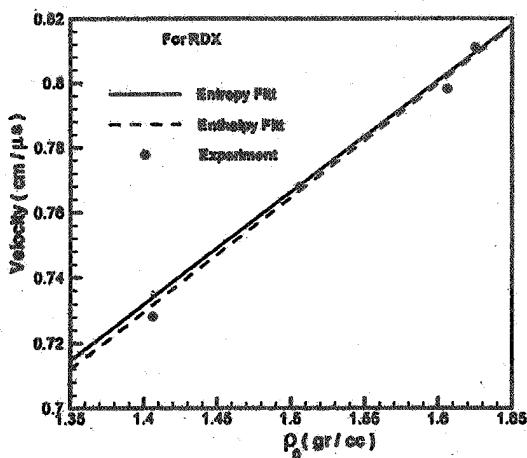
شکل ۶- نتایج تجربی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای HMX



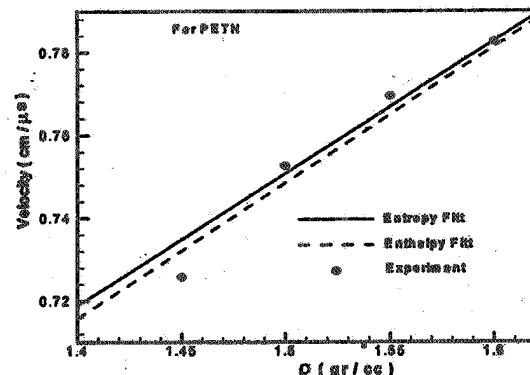
شکل ۷- منحنی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای HMX



شکل ۸- نتایج تجربی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای RDX



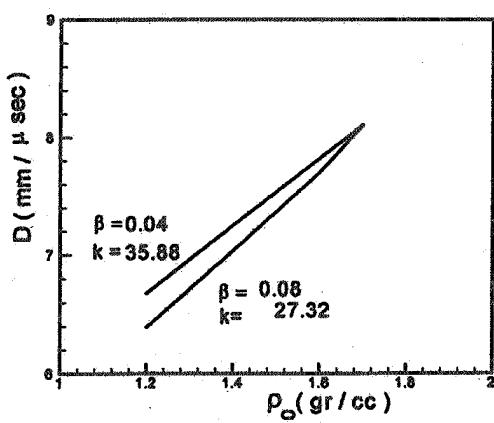
شکل ۹- منحنی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای RDX



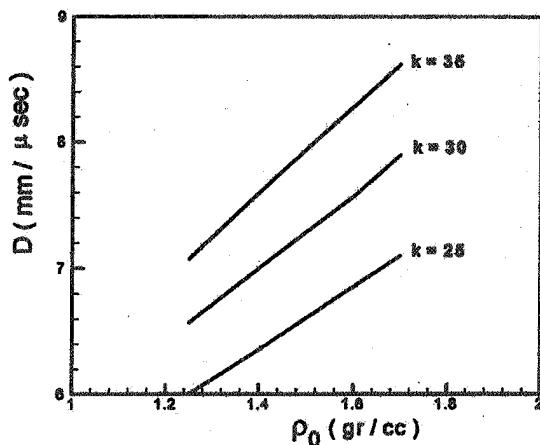
شکل ۱۰- منحنی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای PETN

جدول ۸- عرض از مبدأ و شیب رابطه خطی سرعت بر حسب چگالی اولیه

	HMX	PETN	RDX
a) (تجربی)	0.1945748	0.1868169	0.2178450
b) (تجربی)	0.37879883	0.3742951	0.36366091
a) (برازش انتروپی)	0.2383428	0.271668	0.2492058
b) (برازش انتروپی)	0.35123015	0.3194212	0.3447912
a) (برازش انثالپی)	0.2277649	0.256954	0.2374187
b) (برازش انثالپی)	0.35722666	0.3277202	0.35152084



شکل ۱۱- تأثیر β بر روی منحنی D - ρ_0



شکل ۱۰- تأثیر K بر روی منحنی D - ρ_0

این منحنی به موازات خود جا به جا خواهد شد، شکل (۱۰). در نتیجه با تکرار اجرای برنامه می‌توان مقادیر K ، β را طوری تنظیم کرد که مقدار سرعت پیش‌بینی شده توسط حل عددی و مقدار تئوری آن در دو چگالی مختلف برای ماده منفجره خاص، به نزدیکترین حالت ممکن برسند. برای این منظور مقدار K طوری تنظیم می‌شود که در یک چگالی خاص مقدار عددی و تجربی سرعت بر هم منطبق شوند. سپس با همان ضرایب در چگالی دوم، سرعت محاسبه می‌شود. در صورت اختلاف، با تصحیح مقدار β این دو سرعت بر هم منطبق می‌شود. با تغییر β ممکن است مقدار سرعت در چگالی اول تغییر نموده باشد، در این صورت مجدداً در چگالی اول مقدار

K برای تطابق سرعت تجربی و تئوری تغییر می‌کند. با توجه به شکل‌های (۱۰) و (۱۱) می‌توان نتیجه گرفت که β و K را می‌توان طوری تنظیم کرد که سرعت پیش‌بینی شده توسط حل عددی و مقدار تجربی سرعت در دو چگالی مختلف برای یک ماده منفجره خاص، به نزدیکترین حالت ممکن برسد. مطابق شکل (۱۲) تغییر α موجب تغییر فشار می‌شود. در این شکل β و K به گونه‌ای تغییر یافته‌اند که نتایج تجربی D - ρ_0 حاصل شود [۸].

بنابراین با تغییر مقدار β و ثابت بودن دیگر پارامترها، شیب منحنی سرعت بر حسب چگالی تغییر می‌کند، شکل (۱۱). در صورتی که با ثابت بودن بقیه پارامترها مقدار K تغییر داده شود

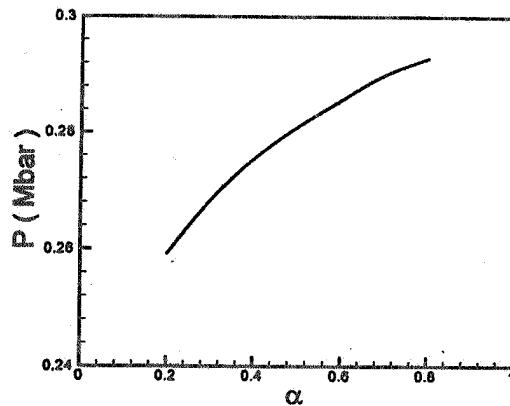
همچنین دیده شد که برای محاسبات دقیق‌تر باید از روش
برازش انتالپی استفاده شود.

کد تهیه شده می‌تواند به عنوان ابزاری مناسب برای مقایسه
بین مواد منفجره مختلف در چگالیهای متفاوت مورد استفاده
واقع شود. کاربردهای متعددی برای این کد قابل تصور است
که ذیلاً به برخی اشاره می‌شود:
استفاده در تغییر طراحی و جایگزینی ماده منفجره اصلی
سرجنگی.

استفاده در انفجارات سطح زمین و زیر آب برای تخمین
فشارهای ایجاد شده و پیش‌بینی قدرت تخریب امواج ایجاد
شده.

تعیین پارامترهای معادلات حالت HOM و BKW برای
ماده منفجره جدید و تخمین میزان انرژی و فشار ناشی از
انفجار آن.

این نرم‌افزار می‌تواند به عنوان یکی از ابزارهای اساسی در
ایجاد و توسعه یک آزمایشگاه انفجاری در کشور مورد استفاده
قرار گیرد. در این رابطه باید به این نکته توجه داشت که
سرعت انفجار به چگالی بسیار حساس است و این بدین معنی
است که مواد منفجره مورد استفاده در تست‌های مربوطه
می‌باشد چگالی یکنواخت داشته باشند و این امر مستلزم
فسردن مرحله‌ای مواد است. در تحقیق حاضر به دلیل نبود
امکانات، فشردن مواد در یک مرحله صورت گرفت. برای بهبود
و اطمینان از نتایج حاصل باید آزمایش‌ها را با موادی که در
چند مرحله فشرده شده اند تکرار کرد..



شکل ۱۲- تاثیر α بر روی فشار دتونیشن

ک تصویح شده و این عمل تا تطابق کامل سرعتها در دو
چگالی ادامه می‌یابد.

۱۱- نتیجه گیری

در شبیه‌سازی‌های مربوط به انفجار مواد شدیدانفجار داشتن
ضرایب در چگالیهای مختلف از اهمیت به سزایی برخوردار
است. حتی در مراجعی مانند مرجع [۱] این ضرایب برای
چگالیهای محدودی از برخی مواد منفجره داده شده است که
بسیاری از کاربردهای عملی را پوشش نمی‌دهد. خوب‌بختانه با
توجه به نتایج کار حاضر ضرایب معادله حالت HOM برای
تمام مواد شدیدانفجار در ایران قابل استخراج است.

با استفاده از کد تهیه شده و نتایج تجربی سرعت پیش‌روی
موج درون ماده منفجره می‌توان برای هر ماده منفجره،
پارامترهای معادلات حالت HOM و BKW را تعیین کرد.
مقایسه نتایج حاصل با نتایج تجربی سرعت و نتایج موجود در
مرجع [۱] نشان داد که کد تهیه شده دقیق بسیار بالایی دارد

واژه‌نامه

1. Autriche
2. Taffahel
3. Kistiakowsky and Wilson
4. Macdougall and Epstein
5. Cowan and Fickett
6. Composition B
7. Curve fitting
8. Mader
9. High explosives

10. Rayleigh line
11. Rankine-Hugoni ot Equation
12. Chapman-Jouguot Detonation
13. Mavell Equations
14. Species
15. خواص محصولات جامد (عدم تأثیر)
کردن) حاصل از انفجار نیز به روش
مشابه به دست می‌آیند که به علت
کمبود جا از ترضیح آن خودداری شده

است. خوانندگان علاقه مند می‌توانند
به مرجع [۲۱] مراجعه کنند.

16. White, Johnson, and Dantzig
17. Formula Matrix
18. Lagrange Multipliers

مراجع

- 1- Mader, C. L. *Numerical Modeling of Explosive and Propellants*, CRC Press LLC, 1998.
- 2- Cook, M A, *The Science of High Explosive*, NewYork, 1971.
- 3 - Kuo, K, *Principle of Combustion*, John Wiley and Sons Inc., USA, 1986.
- 4 - Cegel ,Y. A. and Michael A.Boles, *Thermodynamics An Engineering Approach*, Third Edition, McGraw-Hill Company, Inc, 1998.
- 5 - *Principles of Explosive Behavior*, AMCP 706-180, April 1972.
- 6 -White, W.B. Johnson S.M. and Datzig, G.B. "Chemical Equilibrium in Complex Mixtures," *The Journal of Chemical Physics*, Vol.28, PP751-755, 1958.
- 7 - Pitsinis, R, F., and Tsimogianni, N. P.T "The Gibbs Energy Minimization Approach in the Estimation of Detonation...", *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, Vol.19, PP76-81, 1994.
- 8 -Cowan R.D. and Fickett, "Calculation of the Detonation Properties of Solid Explosive with the Kistiakowsky - Wilson Equation of State," *The Journal of Chemical Physics*, Vol.24, No.5, PP.932--939, 1955.
- 9 - Xiong, Wu , "A Study on Thermodynamic Function of Detonation Product," *Propellants, Explosive, Pyrotechnics*, Vol.10, PP.47-52, 1985.
- 10 - Zeleznik F. J., Gordom, S., "Calculation of Complex Chemical Equilibria," Applied Thermodynamics Symposium, Vol.60, PP.27-57, June 1968.
- 11 - Frank J.Zeleznik, Sanford Gordom, "Calculation of Detonation Properties and Effect of Independent Parameters on Gaseous Detonation," *ARS Journal*, PP.606-615, April 1962.
- 12 - Caldriola, P. , "On the Equation Of State for Gases at Extremely High Pressure," *The Journal of Chemical Physivs*, Vol.14, NO.12, PP.738-741, December 1946.
- 13 - Suceska, M. , "Calculation of the Detonation Properties of C-H-N-O Explosives," *Propellants, Explosive, Pyrotechnics*, Vol.16, PP.197-202, 1991.
- 14 - Kamlet, M. J. and Harol Hurwits, "Chemistry of Detonation IV.Evaluation of A Simple Predictional Method for Detonation Velocities of C-H-N-O Explosive," *The Journal of Chemical Physivs*, Vol.48, No.8, PP.3685-3692, April 1968.
- 15 - Fried , L E. and Clark, P. Souers, "BKW: An Empirical BKW Parametrization Based on Cylinder Test Data," *Propellants, Explosive, Pyrotechnics*, Vol.27, PP.215-223, 1996.
- 16 - Tang, P.K. , "PBX 9502 Products Equatin of State," *Propellants, Explosive, Pyrotechnics*, Vol.22, PP.45-50, 1997.
- 17 - Hornig, H.C., Lee, E.L., Finger. M., Kurrie. and J.E., "Equation of State of Detonation Products," URCL.
- ۱۸- حسین پور س، و فرشچی م، اندازه‌گیری سرعت موج انفجار و تعیین پارامترهای معادله حالت BKW، اولین همایش علمی و تخصصی سر جنگی های خروج گود، خرداد ۱۳۷۶
- ۱۹- استوار، ر، آتش کاری در معادن، جلد اول، چاپ دوم، انتشارات جهاد دانشگاهی دانشگاه امیر کبیر، ۱۳۷۵
- ۲۰- پارسافرغ، ترمودینامیک آماری، مرکز نشر دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۷۶
- ۲۱- اسدالهی ه، تعیین پارامترهای معادله حالت HOM و BKW برای محصولات انفجار، پایان نامه کارشناسی ارشد، بخش مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران، ۱۳۷۹

جدول الف-۱- ضرایب b_1 - b_6 برای برازش انتروپی با این ضرایب انتالپی بر حسب cal/mole محاسبه می شود.

H2O	4.258842E+01 0.0	1.480805E-02 1.342828E+03	-2.639181E-06	1.920453E-10
H2	2.970347E+01 0.0	1.143829E-02 1.175896E+03	-2.201222E-06	1.677761E-10
O2	4.703090E+01 0.0	1.287147E-02 1.035376E+03	-2.500217E-06	1.901570E-10
H	2.639110E+01 0.0	8.121372E-02 7.946316E+02	-1.690740E-06	1.316823E-10
OH	4.241792E+01 0.0	1.156847E-02 1.183518E+03	-2.226659E-06	1.689155E-10
CO2	4.748112E+01 0.0	1.954463E-02 7.462809E+02	-3.721296E-06	2.770300E-10
CO	4.533082E+01 0.0	1.238161E-02 1.121588E+03	-2.416403E-06	1.828181E-10
NH3	4.201816E+01 0.0	1.911662E-02 1.206961E+03	-3.164330E-06	2.197801E-10
NO	4.841498E+01 0.0	1.269386E-02 1.209250E+03	-2.494600E-06	1.893213E-10
N2	4.392340E+01 0.0	1.222501E-02 1.139161E+03	-2.379005E-06	1.798322E-10
CH4	3.875686E+01 0.0	2.364013E-02 1.042428E+03	-3.707957E-06	2.470714E-10
C(s)	-2.461519E-01 0.0	7.179855E-03 -2.582044E+02	-1.297550E-06	9.349995E-11

جدول الف-۲- ضرایب c_1 - c_6 برای برازش انتالپی با این ضرایب انتالپی بر حسب cal/mole محاسبه می شود.

H2O	4.1311354E+02 2.1677287E-11	6.0383109E+00 9.4858732E+00	2.4415447E-03	-3.5459645E-07
H2	5.3527226E+02 6.3688675E-12	5.6180328E+00 -7.7239315E+00	9.2211275E-04	-1.1007510E-07
O2	-5.7898118E+02 -1.0748879E-12	7.7239315E+00 4.1281655E+00	3.5794743E-04	-7.6485467E-09
H	-3.4571783E+02 -2.4866094E-15	4.9682223E+00 -9.1453570E-01	-7.4380480E-08	2.4145620E-11
OH	5.1777834E+02 8.4420419E-12	5.7209876E+00 1.1180035E+01	9.9872246E-04	-1.4231742E-07
CO2	-2.1632358E+03 1.4519287E-11	1.1200350E+01 -1.5456934E+01	1.3487526E-03	-2.21185730E-07
CO	-3.3874529E+02 7.5655933E-12	6.9782799E+00 6.5630786E+00	7.0542741E-04	-1.1608950E-07
NH3	-8.6408845E+02 3.9654469E-11	7.5038980E+00 -2.5416420E-01	4.0029554E-03	-6.3409737E-07
NO	-3.4901050E+02 6.37192267E-12	7.3377076E+00 7.62006658E+00	5.9381687E-04	-9.7208734E-08
N2	-2.2410000E+02 8.1613551E-12	6.7545532E+00 6.4704630E+00	7.7020298E-04	-1.2614462E-07
CH4	-2.5568789E+03 5.8364344E-11	9.0038964E+00 -1.3506122E+01	5.8534029E-03	-9.1635112E-07
C(s)	-1.4630800E+03 1.3629814E-11	3.6586122E+00 -2.1248095E+01	1.0431682E-03	-1.8718490E-07