

تعیین پارامترهای معادلات حالت BKW و HOM برای محصولات انفجار

کیومرث مظاهری*، همت اسداللهی**

بخش مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس

(دریافت مقاله: ۸۰/۶/۱۰ - دریافت نسخه نهایی: ۸۱/۵/۱۹)

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 Mbar) فرض گاز ایدئال برای محصولات فرض غیر معقولی است. از طرف دیگر به دلیل محدودیتهای تجربی تعیین مستقیم معادله حالت ممکن نیست. لذا بایستی به روش 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 به دست آمده با نتایج موجود در مراجع مقایسه شده و دقت کار مورد ارزیابی قرار گرفته است. به دلیل زمانبر بودن معادله BKW در کدهای رایانه ای معمولاً به جای معادله BKW از معادلات حالت HOM استفاده می شود. در این تحقیق ضرایب معادلات HOM نیز بدست آمده و با ضرایب ارائه شده در مراجع معتبر 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.

** - کارشناسی ارشد

* - استادیار

It is also shown that the curve fitting of the enthalpy of the products in standard states to a fourth 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	z_{ik}
تعداد مول جزء i ام	n_i	تعداد عنصر k ام ماده منفجره	b_k
فشار	P	علامت نقطه چینم ژروکت	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 i ام	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	covolume جزء i ام	k_i
چگالی اولیه ماده منفجره	ρ_0	covolume	κ
پارامترهای معادله حالت BKW	$\theta, \beta, \alpha, \kappa$	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 منطبق 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 بین 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 معقولی 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

$$P = \frac{\rho RT}{1 - bp} - a\rho^2 \quad (2)$$

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^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 غیرایده‌آل با دما و حجم گاز است. این معادله رفتار گازهای غیرایده‌آل 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 تابعی از دانسیته ماده باشد. او نشان داد که بر روی منحنی $b-v$ مقادیر 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 زیر نوشت:

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

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

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

معادلات حالت ویریا و ریگاس [۷و۵] 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 گلیسرین و جیوه از فرمول زیر 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.

کیستاکوسکی و ویلسون^۳ در سال ۱۹۴۱ از معادله زیر برای 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، دانسیته و دماست. معادله حالت گاز ایده‌آل فقط برای گازهای با فشار کم قابل قبول است. در فشار بالای گازهای حاصل از انفجار حجم ملکولهای تشکیل دهنده گاز در مقایسه با حجم کل گاز قابل مقایسه می‌شود. حجم ملکولها را با b نمایش می‌دهیم و در نتیجه $V-b$ اختلاف دو حجم است. در فشارهای بالا، اندازه فشار P به صورت معکوس با این اختلاف حجم متناسب است و این موضوع عامل اصلی انحراف رفتار گازها در فشارهای بالا از گاز ایده‌آل است.

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

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

یا به عبارت دیگر:

$$P = \frac{\rho nRT}{1 - b\rho} \quad (1)$$

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

واندروالس مرجع [۴] در سال ۱۸۷۳ برای بالا بردن دقت معادله حالت آبل، با اضافه کردن یک جمله برای نیروی جاذبه بین ملکولی به معادله آبل، معادله حالت زیر را ارائه داد:

جدول ۱- پارامترهای پیشنهادی معادله حالت BKW [۱]

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 [۱]

	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 ، κ 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]:

$$\ln(P_i) = A + B[\ln(v_g)] + C[\ln(v_g)]^2 + D[\ln(v_g)]^3 + E[\ln(v_g)]^4 \quad (۸)$$

$$\ln(I_i) = K + L[\ln P_i] + M[\ln P_i]^2 + N[\ln P_i]^3 + O[\ln P_i]^4 \quad (۹)$$

$$\ln(T_i) = Q + R[\ln(v_g)] + S[\ln(v_g)]^2 + T[\ln(v_g)]^3 + U[\ln(v_g)]^4 \quad (۱۰)$$

- در معادلات (۸) تا (۱۰) اندیس g مربوط به گاز و اندیس i مربوط به پروسه ایزونتروپیک 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

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

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 ماکدوگال و ایستین^۴ نسبت دادند. با اضافه کردن β به جمله دافعه خواهیم داشت:

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

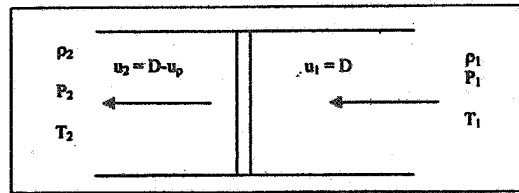
برای مطابقت نتایج تجربی و تئوری سرعت انفجار برای اکثر مواد منفجره مقادیر $\alpha=0.25$ و $\beta=0.3$ پیشنهاد شد. در معادله حالت (۵) وقتی دما به سمت صفر میل می‌کند فشار بی‌نهایت می‌شود. کوان و فیکت^۵ برای رفع این مشکل در محدوده حجمهای مورد استفاده جمله θ را به T در مخرج رابطه اضافه کردند. آنها همچنین 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 ۴۰۰ را در نظر گرفتند. آنها در نهایت فرمول زیر را ارائه دادند:

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

که x و κ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

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

نامبردهگان k را برابر ۱۱/۸۵ در نظر گرفتند. در فرمول بالا k_i ، Covolume هندسی محصولات گازی انفجار و x_i کسر مولی



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

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 مورد استفاده قرار گرفت. کد STRETCH BKW در سال ۱۹۶۱ برای رایانه IBM 7030 نوشته شد. در سال ۱۹۶۷، این کد به زبان فرترن ۴ نوشته شد. نسخه‌های 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 می‌توان به موارد زیر اشاره کرد [۱۳]:

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

یکی از این کدها، کدی است که مدر^۸ به زبان فرترن به نام BKW ارائه داده است. این کد یکی از مراجع استاندارد در محاسبات مربوط به انفجار است. نتایج کد نوشته شده در این تحقیق برای اطمینان از عملکرد صحیح با نتایج این کد مقایسه خواهند شد. در ایران تنها یک 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 کرده‌اند.

۲- معادلات رانکین - هوگونیوت

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 می‌کند. پشت این جبهه فعل و انفعالات شیمیایی شروع شده و با آزاد کردن انرژی، حرکت موج ضربه ای را پشتیبانی می‌کنند. به این موج، موج دتوئیشن می‌گوییم. فرق عمده 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 می‌توان دائم در نظر گرفت. اگر یک حجم معیار در اطراف موج در نظر بگیریم قوانین بقا به شکل زیر بیان می‌شوند، شکل (۱)

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad \text{بقای جرم:}$$

برای یک فرایند ایزونتروپیک، دما، انرژی داخلی، و حجم محصولات گازی به دست می‌آیند. در ادامه با مقادیر به دست آمده و استفاده از روش برازش بر منحنی^۷ ضرایب معادله حالت HOM، معادلات (۸) تا (۱۰) محاسبه می‌شوند.

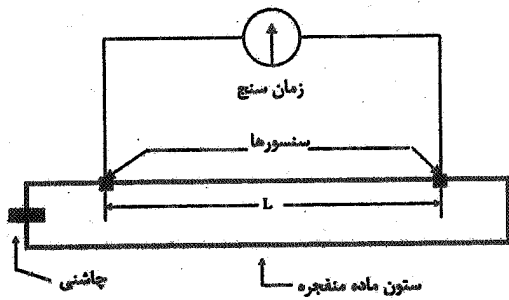
با استفاده از معادله حالت HOM برای محصولات گازی انفجار می‌توان رفتار انبساطی این مواد را بعد از انفجار مورد تجزیه و تحلیل قرار داد. مزیت‌های معادله حالت HOM بر BKW می‌توان به صورت زیر برشمرد:

- 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 می‌توان از روابط ترمودینامیکی استخراج کرد.

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

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

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



شکل ۲- شماتیک دستگاه اندازه گیری سرعت موج انفجار

تا حد امکان یکنواخت باشد. برای دستیابی به این مهم 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 سنسج وصل اند مطابق شکل (۲) در دو نقطه با فاصله مشخص روی ستون ماده منفجره قرار می گیرند. این دو سنسور با دریافت جبهه موج انفجار علائمی به دستگاه زمان سنسج ارسال کرده و دستگاه زمان سنسج، زمان سیر موج بین این دو نقطه را ثبت می کند. دقت 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 نمونه های 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

$$P_1 + \rho_1 u_1^2 = P_2 + \rho_2 u_2^2 \quad \text{بقای ممتوم:}$$

$$h_1 + \frac{1}{2} u_1^2 + q = h_2 + \frac{1}{2} u_2^2 \quad \text{بقای انرژی:}$$

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

از ترکیب معادلات بقای جرم و بقای ممتوم معادله خط ریلی^۱ به صورت زیر به دست می آید:

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

$$y = \frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{v_2}{v_1}$$

از ترکیب معادلات بقای جرم، ممتوم و انرژی معادله رانکین-هوگونیوت^{۱۱} به دست می آید:

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

دتونیشن طبیعی در حالت دائم یک جواب بیشتر ندارد جواب پایدار جوابی است که از مماس کردن خط ریلی بر منحنی هوگونیوت به دست می آید (فرضیه چپمن - ژوگت^{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 اند 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 می شود. از آنجا که سرعت دتونیشن درون ماده منفجره شدیداً تابع چگالی است لذا چگالی ماده منفجره بایستی

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 می‌شود (معادلات ماکسول^{۱۳}):

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

اگر از رابطه بالا در دما و ترکیب ثابت انتگرال‌گیری کنیم انرژی داخلی سیستم در دما و حجم (T, V) بر حسب انرژی در دمای T و حجم مبنای V* به دست می‌آید:

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

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

زمانی که V* به سمت بی‌نهایت میل کند جمله E(T, V*) در معادله (12) را می‌توان به صورت جمع انرژیهای داخلی گونه‌ها^{۱۴} 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 نویسه اشاره به حالت مبنا دارد (برای گاز ایدئال در فشار P⁰ = 0 و دمای T). آن x_i کسری مولی جزء iام، H⁰ انتالپی تشکیل در صفر مطلق، و E⁰_T انرژی داخلی در فشار صفر و دمای T است حال با توجه به معادله حالت BKW می‌توان 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 (14) استفاده می‌شود در این معادله ثابت جهانی گازهاست. با شیوه ای مشابه توابع آنتروپی و انرژی آزاد گازهای حاصل از انفجار به صورت زیر به دست می‌آیند^{۱۵}:

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

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

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

$$\ln F(x) + \frac{k_i}{k} (F(x) - 1)$$

ملاحظه می‌شود در محاسبه خواص ترمودینامیکی محصولات انفجار (انرژی داخلی، انتروپی و پتانسیل شیمیایی) نیاز به محاسبه توابع ترمودینامیکی $\left[\left(F^0 - H_0^0 \right)_i \left(H - H_0^0 \right)_i \left(S_i^0 \right) \right]$ است به عبارت دیگر، این معادلات را می‌توان به شکل زیر نشان داد:

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

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

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

که E^Δ، S^Δ و μ^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 استانداردند که برای اکثر مواد از دمای صفر تا ۶۰۰۰ درجه کلین در جداول موجود است. میانمایی کردن این جداول پر زحمت است. بنابراین برای دقت بالا این مقادیر به صورت توابعی از دما برازش می‌شوند. روشهای مختلفی برای برازش این مقادیر پیشنهاد شده است.

در ترمودینامیک کلاسیک معمولاً Cp⁰ به صورت چند جمله‌ای درجه‌ای ۲ و یا ۴ از دمای T نوشته می‌شود. 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 برای S⁰ 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 (20) معادلات زیر را می‌توان استخراج کرد:

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

i=↓	j=	1	2	3	4
	محصول	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
	\rightarrow b _j	4	8	8	8

به دست آورد:

$$C_P^0 = \frac{\partial(H^0 - H_0^0)}{\partial T} = c_2 + 2c_3T + 3c_4T^2 + 4c_5T^3 \quad (25)$$

$$S^0 = \int \frac{C_P^0}{T} dT = c_6 + c_2 \ln T + 2c_3T + \frac{3}{2}c_4T^2 + \frac{4}{3}c_5T^3 \quad (26)$$

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

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

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

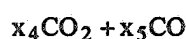
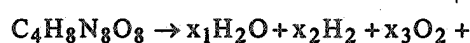
این ضرایب در پیوست الف جدول (الف-۲) آمده اند.

در تحقیق حاضر جوابهای به دست آمده از دو روش برازش بر اساس انتروپی و انتالپی با هم مورد مقایسه قرار خواهند گرفت.

۵- الگوریتم برنامه

در کد حاضر برای به دست آوردن ترکیب تعادل شیمیایی محصولات، از شکل اصلاح شده روشی که اولین بار وایت، جانسون^{۱۱} و دانتریک در سال ۱۹۵۸ ارائه کردند، استفاده می شود [۶]. در این روش برای به دست آوردن ترکیب تعادل شیمیایی محصولات از روش مینیم کردن انرژی آزاد در فشار و دمای ثابت، تحت شرط بقای عناصر شیمیایی استفاده می شود.

فرض کنیم فرمول ساده منفجره $C_4H_8N_8O_8$ و محصولات H_2O ، H_2 ، O_2 ، CO و CO_2 باشند. بنابراین واکنش به صورت زیر انجام می پذیرد:



که x_1 تا x_5 مقادیر مولی محصولات اند. قانون بقای عناصر را به صورت زیر می توان 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

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

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

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

معادلات بالا به وسیله مدریک 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 پائینتر از مقادیر تجربی دماست. به طور مثال دمای دتونیشن تجربی ترانیترومتان (TNM) در چگالی $1/16 \text{ gr/cm}^3$ برابر با $2800 \text{ }^\circ\text{K}$ است و مقدار محاسبه شده کد BKW برابر با 2341 درجه کلرین است.

در یک کد نظیر BKW برای محاسبه خواص دتونیشن مواد منفجره توابع ترمودینامیکی تا همگرا شدن برنامه (به روش تکرار) به طور مرتب استفاده می شوند. برای مثال برای حل ترکیب تعادل تعداد استفاده از توابع ترمودینامیکی حدود ۱۰ مرتبه، برای محاسبات نقطه CJ حدود صد مرتبه و برای محاسبات هوگونیوت و ایزونتروپ بیش از صد مرتبه است. بنابراین معادلات مناسبی از توابع ترمودینامیکی برای بهبود دقت مورد نیاز است. طبق پیشنهاد مرجع [۹] بهتر است از برآزش 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 می توان سایر پارامترهای مورد نیاز را از انتالپی

مثال $n=4$ و $m=5$ و مقادیر ماتریس فرمول^{۱۷} محصولات g_{ij} و b_j به صورت جدول (۳) تعریف می‌شوند.

برای مینیمم کردن انرژی آزاد محصولات تحت شرط ارضای بقای عناصر، از روش ضرایب لاگرانژ^{۱۸} استفاده می‌شود [۶]. ورودیهای این برنامه عبارت خواهند بود از: ۱- نام و فرمول محصولات، ۲- ماتریس فرمول محصولات، ۳- Covolume محصولات، ۴- ضرایب لازم برای برآزش درجه چهارم انتروپی یا انتالپی استاندارد بر حسب دما، ۵- ضرایب معادله حالت Cowan برای محصولات جامد، و ۶- پارامترهای معادله حالت $BKW, (\theta, \kappa, \beta, \alpha)$

روند کار برنامه را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

- 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 رنگین - هوگونیوت.
- ۵- استفاده از معادله خط ریلی و تعیین سرعت پیشروی موج درون ماده منفجره.
- ۷- مراحل (۱) تا (۵) برای سه فشار حدسی انجام می‌شود و سه سرعت به دست می‌آید.
- ۶- استفاده از شرط چپمن ژوگت. 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 می‌شود. با این فشار، مقادیر حدسی اولیه فشار اصلاح می‌شود. این کار تا زمانی صورت می‌گیرد که سرعت موج حاصله کمترین مقدار خود را اختیار کند.
- ۷- تعیین انتروپی کل محصولات انفجار.
- ۸- تعیین فشار، دما، انرژی داخلی، و حجم محصولات هنگام انبساط.
- ۹- تعیین ضرایب معادله حالت HOM با استفاده از روش

حداقل مربعات.

۱۰- ثبت نتایج در فایل‌های خروجی.

شکل (۳) فلوچارت الگوریتم را نشان می‌دهد.

۶- نتایج نرم‌افزار تهیه‌شده برای معادله حالت

BKW

همان‌طور 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 کربن جامد (گرافیت) بوده و ۱۱ گونه دیگر گازی هستند که در جدول (۲) Covolume مربوط به آنها آمده است.

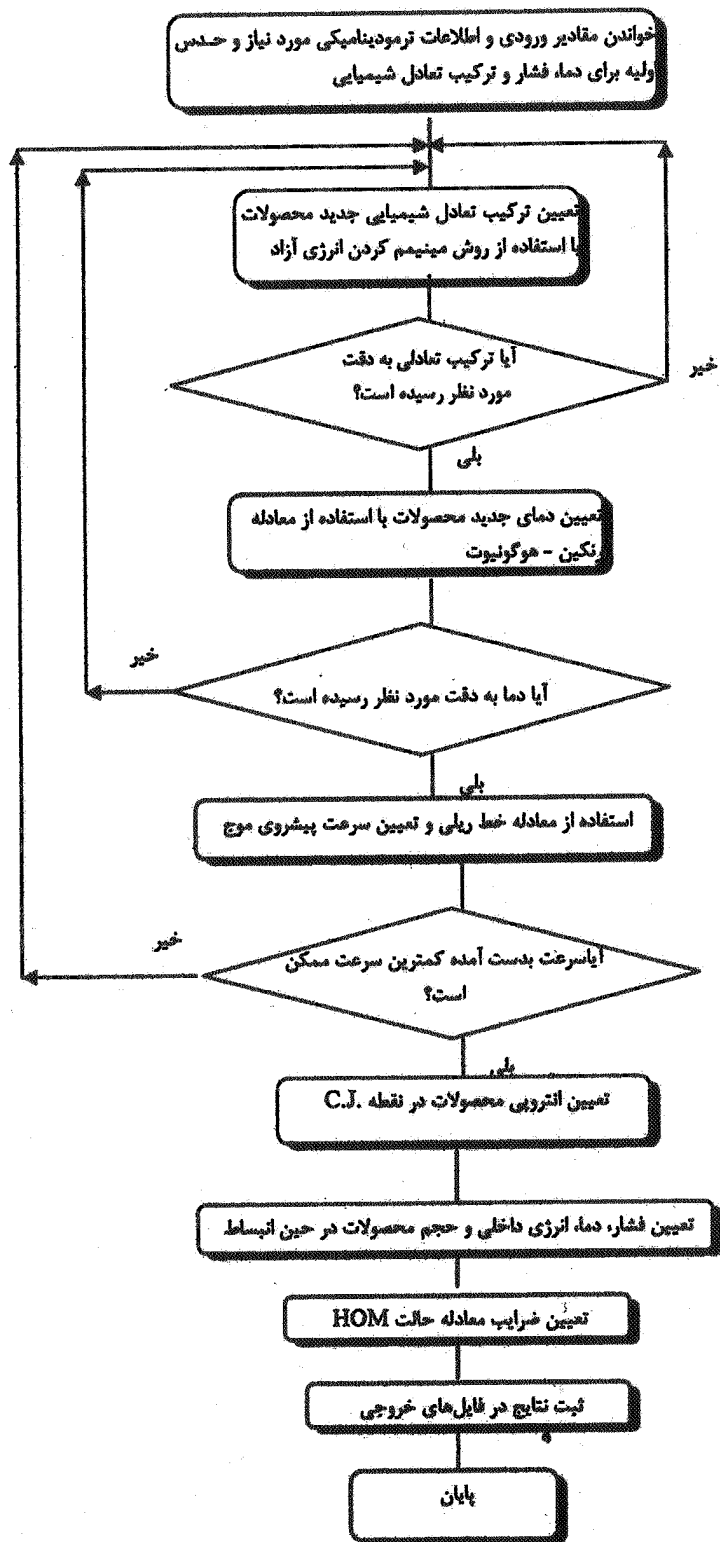
نتایج اجرای نرم‌افزار ایجادشده با پارامترهای موجود در مرجع [۱]، برای دو چگالی از RDX و یک چگالی از HMX در جدول (۴) آمده است. نتایج همچنین با نتایج مرجع [۱۸] که تنها کار انجام‌شده در این زمینه در ایران است، مقایسه شده است.

ملاحظه می‌شود که مقادیر محاسبه‌شده با نرم‌افزار فعلی کاملاً در محدوده نتایج مرجع [۱] و نتایج تجربی هستند. این موضوع مؤید صحت عملکرد نرم‌افزار است. همچنین مشاهده می‌شود که دقت نرم‌افزار حاضر از دقت نرم‌افزار ارائه‌شده در مرجع [۱۸] بیشتر است. از طرف دیگر مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از برآزش انتروپی و انتالپی به هم نزدیک است. دما و سرعت انفجار حاصل از برآزش انتالپی کمتر از مقادیر متناظر حاصل از برآزش انتروپی است.

۷- نتایج نرم‌افزار تهیه‌شده برای معادله حالت

HOM

برای اطمینان از صحت ضرایبی که توسط نرم‌افزار حاضر برای معادله حالت HOM پیش‌بینی می‌شود، نتایج به دست آمده برای RDX در چگالی 1.8 gr/cc بر اساس برآزش انتروپی مورد مقایسه قرار می‌گیرند. در تعیین ضرایب معادله



شکل ۳- نمودار جریان برنامه

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

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

منفجره، می توان 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 یک دهم 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.

حالت 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 برازش کردن نتایج با معادله حالت HOM، ضرایب معادله تعیین می شود.

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 می شود 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
نرم افزار حاضر	-3.4887	-2.5525	0.25746	0.014127	-0.0110123
مرجع [۱]	-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
نرم افزار حاضر	-1.6360	0.47294	0.052016	-0.0032475	0.00005525
مرجع [۱]	-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
نرم افزار حاضر	7.4154	-0.493447	0.039683	0.030509	-0.010949
مرجع [۱]	7.4144	-0.491668	0.040004	0.029307	-0.010670

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

$$D = a + bp_0 \quad (29)$$

که D سرعت انفجار بر حسب $cm/\mu s$ و ρ_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

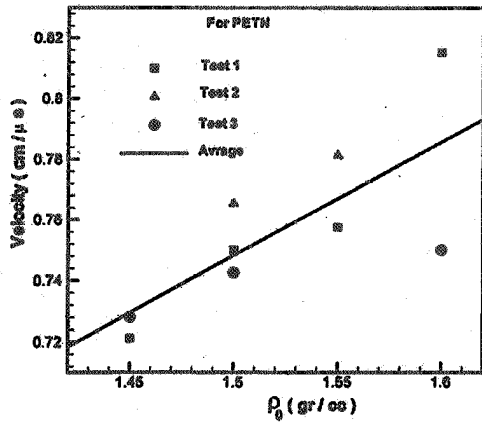
مواد مورد آزمایش

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 K تنها نقاط ابتدایی و انتهایی نمودار $D-\rho_0$ را تغییر می دهد و تغییر چندانی در شیب آن ایجاد نمی کند. از طرف دیگر آنها نشان دادند که با تغییر β در یک چگالی خاص می توان شیب منحنی $D-\rho_0$ را تغییر داد، شکل (۱۱). در این شکل مقدار

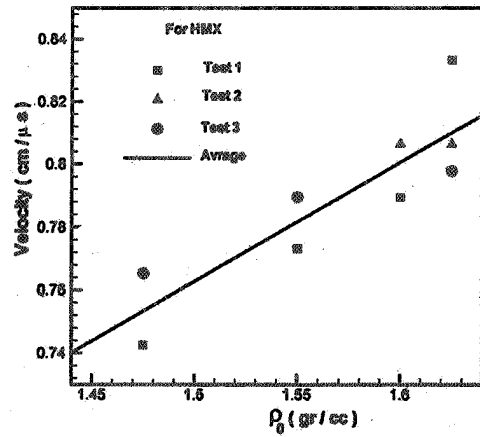
در شکل های (۴) تا (۶) ملاحظه می شود که رابطه سرعت انفجار با چگالی اولیه ماده منفجره، خطی است. معمولاً برای استفاده از نتایج تجربی، از میانگین نتایج سرعت در هر چگالی استفاده می شود. نسبت به مقادیر میانگین بیشترین درصد انحراف نتایج تجربی حاصل نسبت به مقدار میانگین برای HMX ۲/۵۶ درصد، برای PETN ۴/۲ درصد،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

۹- مقایسه نتایج تجربی سرعت با نتایج تئوری

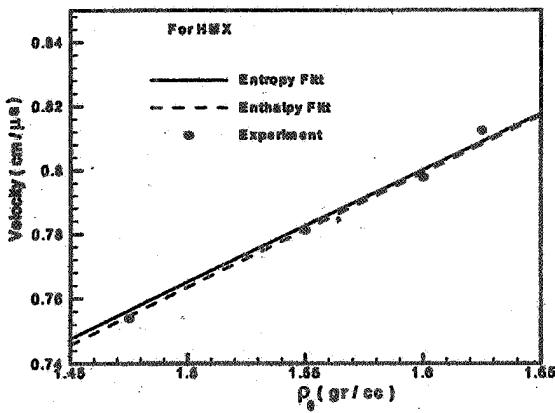
در شکل های (۷) تا (۹) نتایج تئوری و تجربی مقادیر متوسط سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه ماده منفجره با هم مقایسه شده است. ملاحظه می شود که برای مواد مورد آزمایش، نتایج تجربی به نتایج تئوری حاصل از برآزش انتالی نزدیکتر است. همان طور که نمودارهای ارائه شده نشان می دهند ارتباط



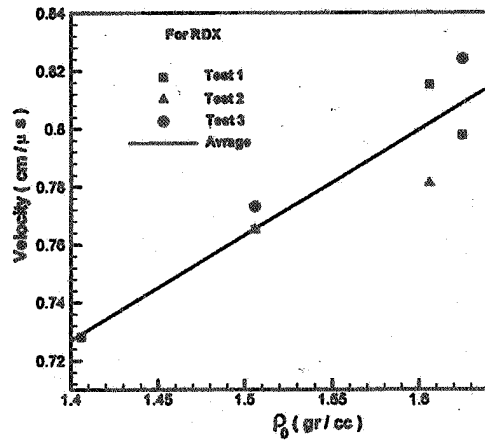
شکل ۵- نتایج تجربی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای PETN



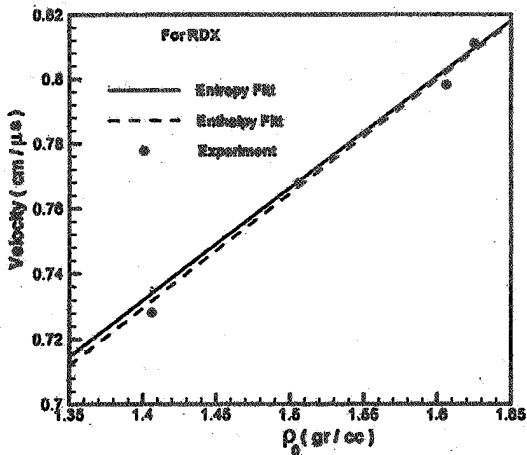
شکل ۶- نتایج تجربی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای HMX



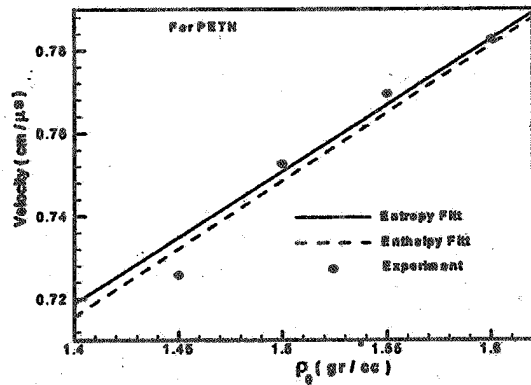
شکل ۷- منحنی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای HMX



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



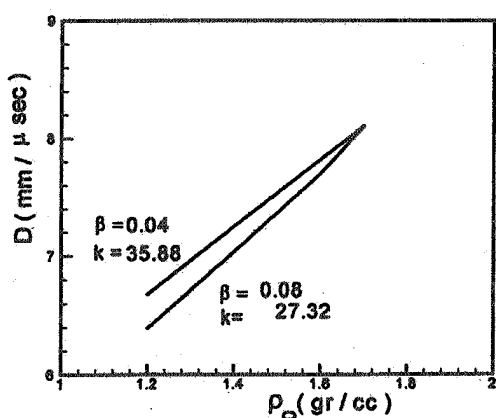
شکل ۹- منحنی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای RDX



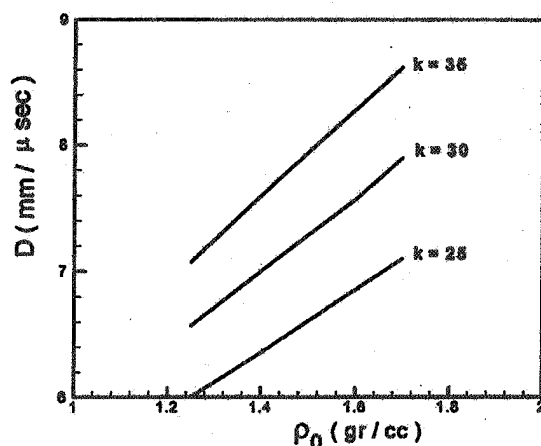
شکل ۸- منحنی سرعت انفجار بر حسب چگالی اولیه
برای PETN

جدول ۸- عرض از مبدا 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 انتالپی)	0.2277649	0.256954	0.2374187
b (برازش انتالپی)	0.35722666	0.3277202	0.35152084



شکل ۱۱- تاثیر β بر روی منحنی $D-\rho_0$



شکل ۱۰- تاثیر k بر روی منحنی $D-\rho_0$

این منحنی به موازات خود جا به جا خواهد شد، شکل (۱۰). در نتیجه با تکرار اجرای برنامه می توان مقادیر β , k را طوری تنظیم کرد که مقدار سرعت پیش بینی 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 می شود. در صورت اختلاف، با تصحیح مقدار β این دو سرعت بر هم منطبق می شود. 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 می کند. با توجه به شکلهای (۱۰) و (۱۱) می توان نتیجه گرفت که β و k را می توان طوری تنظیم کرد که سرعت پیش بینی 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 می شود. در این شکل β و k به گونه ای تغییر یافته اند که نتایج تجربی $D-\rho_0$ حاصل شود [۸].

بنابراین با تغییر مقدار β و ثابت بودن دیگر پارامترها، شیب منحنی سرعت بر حسب چگالی تغییر می کند، 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.

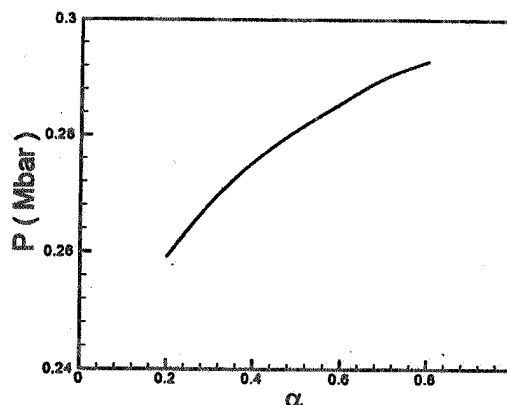
کد تهیه شده می‌تواند به عنوان ابزاری مناسب برای مقایسه بین مواد منفجره مختلف در چگالیهای متفاوت مورد استفاده واقع شود. کاربردهای متعددی برای این کد قابل تصور است که ذیلاً به برخی اشاره می‌شود:

- 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 BKW و HOM 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 می‌بایست چگالی یکنواخت داشته باشند و این امر مستلزم فشردن 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

K تصحیح شده و این عمل تا تطابق کامل سرعتها در دو چگالی ادامه می‌یابد.

۱۱- نتیجه گیری

در شبیه‌سازیهای مربوط به انفجار مواد شدیدالانفجار 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. خوشبختانه با توجه به نتایج کار حاضر ضرایب معادله حالت HOM برای تمام مواد شدیدالانفجار 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 BKW و HOM را تعیین کرد. مقایسه نتایج حاصل با نتایج تجربی سرعت و نتایج موجود در مرجع [۱] نشان داد که کد تهیه شده دقت 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-Jougiot Detonation
13. Mavell Equations
14. Species
۱۵. خواص محصولات جامد (عمدتاً کرین) حاصل از انفجار نیز به روش مشابه به دست می‌آیند که به علت کمبود جا از توضیح آن خودداری شده

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

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

- 1- Mader, C. L. *Numerical Modeling of Explosive and Propellants*, CRC Press LLC, 1998.
 - 2- Cook, M A, *The Science of High Explosive*, New York, 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 - Caldirola, P., "On the Equation Of State for Gases at Extremely High Pressure," *The Journal of Chemical Physics*, 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 Velocites of C-H-N-O Explosive," *The Journal of Chemical Physics*, Vol.48, No.8, PP.3685-3692, April 1968.
 - 15 - Fried, L E. and Clark, P. Souers, "BKWC: 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., Kurrle, and J.E., "Equation of State of Detonation Products," URCL.
- ۱۸- حسین پور س. و فرشچی م. اندازه گیری سرعت موج انفجار و تعیین پارامترهای معادله حالت BKW، اولین همایش علمی و تخصصی سر جنگی های خرج گود، خرداد ۱۳۷۶.
- ۱۹- استوار، ر.، آتش کاری در معادن، جلد اول، چاپ دوم، انتشارات جهاد دانشگاهی دانشگاه امیر کبیر، ۱۳۷۵.
- ۲۰- پارسا فرغ، ترمودینامیک آماری، مرکز نشر دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۷۶.
- ۲۱- اسدالهی ه.، تعیین پارامترهای معادله حالت BKW و HOM 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 اتروپی با این ضرایب انتالی بی حساب 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 انتالی بی با این ضرایب انتالی بی حساب 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