بسمه تعالی

دانشگاه صنعتی مالک اشتر

مجتمع شیمی‌و مهندسی شیمی

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی_گرایش طراحی فرآیندهای شیمیایی

عنوان

ررسی اثر نوع و پارمتر های سینتیک انفجار بر دقت نتایج شبیه سازی انفجار

توسط

استاد راهنما

استاد مشاور

۱۴۰۴

تقدیر

تقدیم اثر

فهرست مطالب

فصل ۱ مقدمه بر انفجار ۱
۱-۱ مقدمه ۲
۱-۲ بیان مسئله ۲
۱-۳ زمینه‌های مورد بررسی در مواد منفجره ۳
۱-۴ موضوع تحقیق ۴
۱-۶ اهمیت وهدف تحقیق ۵
۱-۷ اهداف ۶
۱-۲ تعریف انفجار ۱۰
۲_۲ انواع انفجار ۱۰
۲-۳ جایگاه انفجار مواد منفجره جامد در میان انواع انفجارها ۱۱
۲-۴ مفهوم سینتیک واکنش در انفجار ۱۲
۲-۴-۱ تفاوت سینتیک احتراق معمولی و سینتیک واکنش انفجاری ۱۲
۲-۴-۲ نقش زمان واکنش در شدت انفجار ۱۲
۲-۵ امواج انبساطی ۱۳
۲-۶ شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد ۱۷
۲-۷ روش‌های عددی در شبیه‌سازی انفجار ۱۷
۲-۹ عدم قطعیت در مدل‌های سینتیکی واکنش‌های انفجاری ۱۹
۲-۱۰ انتشار عدم قطعیت در شبیه‌سازی انفجار ۲۰
۲-۱۰-۱ نقش انتخاب مدل و پارامترها در کاهش عدم قطعیت ۲۰
۲-۱۱ پیشینه تحقیقات ۲۰
جدول (۲-۲) مقایسه و تبیین تفاوت پژوهش‌های گذشته با پژوهش حاضر ۲۶
۲-۱۲ جمع بندی ۲۷
۳-۱ مقدمه ۲۹
فصل چهارم ۳۰
۴-۱ مقدمه ۳۰
۲ ..... ۳۰
۵-۱ مقدمه ۳۱
۵-۲ نتیجه گیری و پیشنهادات ۳۱
۵-۳ پیشنهادات ۳۱
منابع ۳۲

چکیده

کلمات کلیدی

فصل اول

مقدمه و معرفی موضوع تحقیق

۱-۱ مقدمه

شبیه‌سازی انفجار گازها به‌عنوان یکی از ابزارهای کلیدی در تحلیل ایمنی فرایند، طراحی تأسیسات صنعتی و ارزیابی ریسک، نقش مهمی در پیش‌بینی پیامدهای حوادث انفجاری ایفا می‌کند. دقت نتایج این شبیه سازی‌ها به‌طور مستقیم تحت تأثیر نوع مدل انفجار و پارامترهای سینتیکی مورد استفاده قرار دارد؛ به‌گونه‌ای که انتخاب نادرست این پارامترها می‌تواند منجر به انحراف قابل‌توجهی در برآورد فشار بیشینه، سرعت شعله و محدوده انفجار شود. ازاین‌رو، بررسی اثر نوع و پارامترهای سینتیک انفجار بر دقت نتایج شبیه‌سازی، به‌عنوان یک ضرورت علمی و کاربردی مطرح است.

مطالعات آزمایشگاهی و عددی نشان داده‌اند که شرایط اولیه نظیر دما و فشار، نقش تعیین‌کننده‌ای در رفتار انفجاری مخلوط‌های گازی و مرزهای انفجار دارند. برای مثال، نتایج پژوهش‌های تجربی و شبیه‌سازی عددی بر روی مخلوط‌های گاز سنتز–هوا نشان می‌دهد که افزایش دمای اولیه موجب گسترش محدوده انفجار و تشدید فرایند احتراق می‌شود که این موضوع باید در مدل‌های سینتیکی لحاظ گردد [۱]. همچنین، بررسی اثر ناپایداری و آشفتگی جریان بر انفجار گازها بیانگر آن است که ساده‌سازی بیش از حد واکنش‌های شیمیایی و مکانیزم‌های سینتیکی، می‌تواند موجب کاهش دقت پیش‌بینی رفتار واقعی انفجار شود [۲].

در سال‌های اخیر، توجه پژوهشگران به شناسایی روابط تبدیل و پارامترهای کلیدی مؤثر بر ویژگی‌های انفجار افزایش یافته است. این مطالعات نشان می‌دهند که پارامترهای سینتیکی نظیر نرخ واکنش، انرژی فعال‌سازی و مکانیسم واکنش شیمیایی، تأثیر مستقیمی بر نتایج شبیه سازی عددی دارند و انتخاب مدل سینتیکی مناسب می‌تواند دقت نتایج را به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای بهبود بخشد [۳]. علاوه بر این، تحقیقات انجام شده بر روی مخلوط‌های LPG نشان داده است که تغییرات هم‌زمان فشار و دمای اولیه، ویژگی‌های انفجاری از جمله فشار بیشینه و زمان رسیدن به انفجار را به‌شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد؛ موضوعی که اهمیت کالیبراسیون پارامترهای سینتیکی در مدل‌های شبیه‌سازی را برجسته می‌سازد [۴،۵].

در مجموع، مرور مطالعات پیشین حاکی از آن است که دقت شبیه‌سازی انفجار به‌شدت وابسته به نوع مدل انفجار و پارامترهای سینتیکی به‌کاررفته در آن است. ازاین‌رو، بررسی نظام‌مند اثر این پارامترها می‌تواند به بهبود قابلیت اعتماد نتایج شبیه سازی، ارتقای تحلیل‌های ایمنی و تصمیم‌گیری دقیق‌تر در مدیریت ریسک انفجار منجر شود. بنابراین این پژوهش با هدف بررسی اثر نوع و پارمتر های سینتیک انفجار بر دقت نتایج شبیه سازی انفجار انجام گرفته است.

۱-۲ بیان مسئله

انفجار مواد منفجره جامد پدیده‌ای پیچیده و چندفازی است که به‌طور هم‌زمان شامل واکنش‌های شیمیایی بسیار سریع، انتقال حرارت، و فرآیندهای مکانیکی–دینامیکی می‌باشد. شبیه‌سازی عددی این پدیده‌ها به‌منظور پیش‌بینی رفتار انفجار و ارزیابی پیامدهای آن در کاربردهای نظامی، صنعتی، معدنی و عمرانی از اهمیت بالایی برخوردار است. با این حال، دقت نتایج شبیه سازی انفجار به عوامل متعددی وابسته است که یکی از مهم‌ترین آن‌ها، نحوه مدل‌سازی سینتیکی واکنش‌های شیمیایی انفجار می‌باشد.

مطالعات تجربی و عددی نشـــان داده‌اند که شـــرایط اولیه و پارامترهای واکنش، نقش تعیین‌کننده‌ای در ویژگی‌های انفجاری از جمله فشار بیشینه، سرعت انتشار موج شوک و میزان انرژی آزادشده دارند. به‌عنوان نمونه، تغییرات فشار و دمای اولیه می‌تواند به‌طور قابل‌توجهی رفتار انفجار و نتایج شبیه سازی را تحت تأثیر قرار دهد، به‌گونه‌ای که عدم لحاظ صـــحیح این پارامترها منجر به انحراف محســـوس از رفتار واقعی انفجار می شود [۵]. از سوی دیگر، روش‌های محا سباتی مورد ا ستفاده در تحلیل انفجار نیز به شدت به فر ضیات سینتیکی و مدل‌های واکنشی وابسته‌اند [۶].

در شبیه سازی انفجار، مدل‌های سینتیکی متنوعی برای تو صیف واکنش‌های شیمیایی مورد ا ستفاده قرار می‌گیرند؛ از مدل‌های ســـاده تک‌مرحله‌ای مبتنی بر روابط Arrhenius گرفته تا مدل‌های چندمرحله‌ای و پیشـــرفته‌تری مانند Ignition & Growth. هر یک از این مدل‌ها دارای پارامترهای ســـینتیکی متفاوتی نظیر انرژی فعال‌سازی، ضرایب سرعت واکنش و آستانه‌های آغاز انفجار هستند که انتخاب آن‌ها تأثیر مستقیمی بر دقت نتایج شـــبیه‌ســـازی دارد. پژوهش‌ها نشـــان داده‌اند که تغییر در این پارامترها می‌تواند منجر به اختلاف قابل‌توجهی در پیش‌بینی شدت انفجار و گسترش موج فشار شود [۷].

علاوه بر این، مقایسه میان مدل‌های پارامتری ساده و مدل‌های مبتنی بر مکانیزم‌های واکنشی نشان می‌دهد که هرچند مدل‌های ساده از نظر محاسباتی مقرون‌به‌صرفه‌تر هستند، اما در بسیاری از موارد قادر به بازتولید دقیق رفتار واقعی انفجار نیستند و عدم قطعیت قابل‌توجهی را وارد نتایج می‌کنند [۸،۹]. این مو ضوع به‌ویژه در کاربردهای ایمنی و طراحی ســـازه‌های مقاوم در برابر انفجار، اهمیت دوچندانی می‌یابد. از ســـوی دیگر، مطالعات کلاســـیک در زمینه مدلســـازی انفجار ابر بخار و احتراق نیز بر نقش حیاتی مدل‌های ســـینتیکی در پیش‌بینی فشار و آسیب‌های انفجاری تأکید دارند [۱۰].

با وجود پیشـــرفت‌های قابل‌توجه در حوزه شـــبیه‌ســـازی عددی انفجار، هنوز درک جامعی از اثر نوع مدل سینتیکی و حساسیت نتایج شبیه‌سازی نسبت به پارامترهای آن وجود ندارد. بسیاری از نرم‌افزارها و مطالعات موجود، از داده‌های سینتیکی ا ستخراج شده در شرایط محدود یا غیرا ستاندارد ا ستفاده می‌کنند که این امر می‌تواند باعث بروز خطاهای قابل‌توجه در پیش‌بینی فشـــار، دما و رفتار موج انفجار شـــود [۱۱،۱۲]. بنابراین، انجام یک برر سی نظام‌مند بر روی اثر نوع مدل سینتیکی و پارامترهای آن بر دقت شبیه سازی انفجار مواد منفجره جامد، امری ضروری به نظر می‌رسد.

این تحقیق با هدف بررســـی عددی تأثیر مدل‌های مختلف ســـینتیکی و پارامترهای مرتبط با آن‌ها بر دقت شبیه سازی انفجار مواد منفجره جامد انجام می شود تا ضمن شنا سایی منابع ا صلی عدم قطعیت، چارچوبی مناسب برای انتخاب مدل سینتیکی بهینه در کاربردهای صنعتی و نظامی ارائه گردد.

۱-۳ زمینه‌های مورد بررسی در مواد منفجره

۱. عملکرد احتراق و سینتیک واکنش انفجاری

عملکرد احتراق مواد منفجره جامد، که به‌طور مستقیم به مدل سینتیکی واکنش‌های شیمیایی وابسته است، یکی از اساسی‌ترین جنبه‌های شبیه سازی انفجار محسوب می شود. بررسی نرخ آزادسازی انرژی، زمان واکنش و حساسیت فرآیند انفجار نسبت به پارامترهایی نظیر انرژی فعال سازی و ضرایب سرعت واکنش، نقش کلیدی در ارزیابی دقت مدل‌های سینتیکی مختلف ایفا می‌کند.

۲. انتشار و تضعیف موج انفجار در تعامل با سازه

انتشار موج شوک حاصل از انفجار و نحوه اندرکنش آن با سازه‌ها، یکی از مهم‌ترین شاخص‌های ارزیابی اثرات مخرب انفجار است. نوع مدل سینتیکی انتخاب‌شده می‌تواند به‌طور مستقیم بر پیش‌بینی دامنه فشار، سرعت انتشار موج و الگوی تضعیف آن در محیط اطراف و در برخورد با سازه‌ها تأثیر بگذارد.

۳. توزیع و تغییرات دما در نواحی مختلف از مرکز انفجار

پروفیل دمایی انفجار، از مرکز هسته انفجار تا نواحی دورتر، به‌شدت تحت تأثیر نرخ واکنش شیمیایی و میزان انرژی آزادشده است. بررسی تغییرات مکانی و زمانی دما، امکان تحلیل دقیق‌تر رفتار ترمودینامیکی انفجار و ارزیابی صحت مدل‌های سینتیکی مورد استفاده را فراهم می‌سازد.

۴. پایداری و پاسخ سازه‌ها در فواصل و زوایای مختلف انفجار

یکی از کاربردهای اصلی شبیه‌سازی انفجار، تحلیل ایمنی و پایداری سازه‌ها در برابر بارهای انفجاری است. در این زمینه، بررسی اثر فاصله، زاویه برخورد موج انفجار و نوع مدل سینتیکی بر میزان تنش، تغییرشکل و احتمال شکست سازه‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است.

۵. تأثیر ویژگی‌های فیزیکی مواد منفجره بر فشار و دمای انفجار

ویژگی‌هایی نظیر اندازه ذرات مواد منفجره و اکسنده، یکنواختی توزیع آن‌ها و ساختار فیزیکی ماده، می‌توانند رفتار واکنش انفجاری را تغییر دهند. بررسی اثر این عوامل در کنار مدل‌های سینتیکی مختلف، به درک بهتر ارتباط بین ریزساختار ماده و پارامترهای ماکروسکوپی انفجار مانند فشار و دما کمک می‌کند.

۱-۴ موضوع تحقیق

شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد مستلزم مدلسازی هم‌زمان مجموعه‌ای از فرآیندهای پیچیده فیزیکی و شیمیایی از جمله واکنش‌های شیمیایی بسیار سریع، انتشار موج شوک، و انتقال حرارت می‌باشد. در این میان، مدل‌های سینتیکی نقش محوری در توصیف رفتار شیمیایی و فیزیکی مواد منفجره ایفا می‌کنند. این مدل‌ها معمولاً شامل معادلات سرعت واکنش، نظیر معادله آرنیوس، و مدل‌های معادله حالت (Equation of State) مانند JWL و BKW هستند که به‌منظور پیش‌بینی پارامترهای کلیدی انفجار از جمله

فشـار، دما و سـرعت موج انفجار به کار می‌روند. انتخاب صـحیح مدل سـینتیکی و تعیین دقیق پارامترهای مرتبط با آن، نظیر انرژی فعال‌سازی، فاکتور فرکانس و ثابت‌های معادله حالت، شرطی اساسی برای دستیابی به نتایج قابل‌اعتماد در شبیه‌سازی انفجار محسوب می‌شود.

در شـبیه‌سـازی عددی انفجار مواد منفجره جامد متداول نظیر TNT، RDX، HMX و ترکیبات مشـابه، واکنش‌های شـیمیایی بسـیار پیچیده‌ای با نرخ‌های فوق‌العاده بالا رخ می‌دهد. مدلسـازی دقیق این رفتار مسـتلزم اسـتفاده از معادلات سـینتیکی پیشـرفته اسـت که بتوانند فرآیند آزادسـازی انرژی و تحول ترمودینامیکی سیستم را به‌درستی بازنمایی کنند. در این راستا، مدل‌های سینتیکی رایج شامل مدل‌های مبتنی بر آرنیوس، مدل‌های دارای آسـتانه آغاز واکنش نظیر Ignition & Growth، مدل JWL برای توصـیف معادله حالت محصولات انفجار، و همچنین مدل‌های وابسته به فشار یا دما هستند که هر یک دارای مزایا و محدودیت‌های خاص خود می‌باشند.

این تحقیق با هدف توسـعه، پیاده‌سـازی و مقایسـه سـیسـتماتیک مدل‌های سـینتیکی مختلف و بررسـی حساسیت نتایج شبیه‌سازی نسبت به تغییر پارامترهای سینتیکی انجام می‌شود. در این راستا، تأثیر نوع مدل سینتیکی و مقادیر پارامترهای آن بر خروجی‌های کلیدی شبیه‌سازی، از جمله پروفایل فشار، سرعت انتشار موج شـوک، میزان انرژی آزادشـده و محصـولات انفجار، به‌صـورت عددی مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. نتایج حاصـل از این بررسـی می‌تواند به بهبود درک علمی از فرآیند انفجار و ارتقای دقت پیش‌بینی‌های عددی منجر شود.

در این پژوهش، با بهره‌گیری از نرم‌افزارهای پیشرفته شبیه‌سازی انفجار نظیر **ANSYS AUTODYN** و **LS-DYNA**، اثر مدل‌های سینتیکی مختلف از جمله مدل‌های مرتبه صفر، مرتبه اول، و مدل‌های پیچیده‌تر نظیر **JMAK** و سایر مدل‌های وابسته به مکانیزم واکنش، بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد بررسی می‌گردد. به‌منظور اعتبارسنجی نتایج عددی، خروجی‌های شبیه‌سازی با داده‌های تجربی حاصل از انفجارهای کنترل‌شـده در شـرایط آزمایشـگاهی مقایسـه خواهد شـد. تمرکز اصـلی این مطالعه بر مواد منفجره جامد پرکاربردی نظیر نیتروگلیسـیرین، TNT و PETN اسـت و هدف نهایی آن، ارتقای دقت پیش‌بینی‌های عددی در کاربردهایی همچون طراحی مهمات، حفاری و انفجارهای معدنی، و تحلیل ایمنی سـازه‌ها در برابر بارهای انفجاری می‌باشد.

۱-۶ اهمیت وهدف تحقیق

انفجار مواد منفجره جامد یکی از پدیده‌های پرانرژی و بسیار پیچیده فیزیکی– شیمیایی است که پیامدهای آن به‌طور مستقیم با ایمنی انسان، پایداری سازه‌ها و کارایی سامانه‌های صنعتی و نظامی در ارتباط می‌باشد. ازاین‌رو، پیش‌بینی دقیق رفتار انفجار و آثار آن، به‌ویژه در کاربردهایی نظیر طراحی مهمات، حفاری و انفجارهای معدنی، صـنایع دفاعی و تحلیل ایمنی سـازه‌ها، از اهمیت راهبردی برخوردار اسـت. شـبیه‌سـازی عددی به‌عنوان یکی از ابزارهای اصلی در این حوزه، نقش کلیدی در کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی، افزایش

ایمنی و بهینه‌سازی طراحی ایفا می‌کند. بااین‌حال، قابلیت اعتماد به نتایج این شبیه‌سازی‌ها به‌شدت وابسته به دقت مدل‌های فیزیکی و شیمیایی به‌کاررفته در آن‌هاست.

در میان اجزای مختلف شبیه‌سازی انفجار، مدل‌های سینتیکی و پارامترهای مرتبط با آن‌ها یکی از اصلی‌ترین منابع عدم قطعیت در پیش‌بینی نتایج محسوب می شوند. انتخاب نامناسب مدل سینتیکی یا تعیین نادقیق پارامترهایی نظیر انرژی فعال‌سازی، ضرایب سرعت واکنش و ثابت‌های معادله حالت می‌تواند منجر به انحراف قابل‌توجه در برآورد فشار بیشینه، سرعت انتشار موج شوک، دمای محصولات انفجار و میزان انرژی آزادشده گردد. چنین خطاهایی، به‌ویژه در تحلیل‌های ایمنی و طراحی سازه‌های مقاوم در برابر انفجار، می‌تواند پیامدهای جدی و بعضاً جبران‌ناپذیری به دنبال داشته باشد.

با وجود پیشرفت‌های قابل‌توجه در توسعه نرم‌افزارهای شبیه سازی پیشرفته نظیر ANSYS AUTODYN و LS-DYNA، همچنان در بسیاری از مطالعات و کاربردهای عملی، از مدل‌های سینتیکی ساده یا پارامترهایی استفاده می شود که اغلب از شرایط آزمایشگاهی محدود یا منابع غیرهمگن استخراج شده‌اند. این مسئله باعث شده است که نتایج شبیه‌سازی در مواردی با داده‌های تجربی اختلاف معناداری داشته باشند و اعتمادپذیری تحلیل‌های عددی کاهش یابد. ازاین‌رو، انجام یک بررسی نظام‌مند و مقایسه‌ای درباره اثر نوع مدل سینتیکی و حساسیت نتایج شبیه‌سازی نسبت به پارامترهای آن، به‌عنوان یک خلأ اساسی در ادبیات موجود مطرح است.

ضرورت انجام این پژوهش از آنجا دوچندان می‌شود که مواد منفجره جامد پرکاربردی نظیر TNT، RDX، HMX، نیتروگلیسیرین و PETN دارای رفتار واکنشی بسیار سریع و غیرخطی هستند و مدل سازی دقیق آن‌ها بدون ارزیابی جامع مدل‌های سینتیکی مختلف و کالیبراسیون پارامترهای آن‌ها امکان‌پذیر نیست. این تحقیق با تمرکز بر تحلیل حساسیت و اعتبارسنجی نتایج عددی در مقایسه با داده‌های تجربی، می‌تواند به شناسایی منابع اصلی عدم قطعیت و ارائه چارچوبی علمی برای انتخاب مدل سینتیکی بهینه منجر شود.

در نهایت، نتایج این پژوهش می‌تواند نقش مؤثری در افزایش دقت پیش‌بینی‌های عددی، بهبود تحلیل‌های ایمنی، کاهش ریسک‌های ناشی از انفجار، و ارتقای طراحی بهینه تجهیزات و سازه‌های در معرض بارهای انفجاری ایفا کند. از این منظر، پژوهش حاضر نه‌تنها دارای اهمیت علمی در توسعه دانش مدل‌سازی انفجار است، بلکه از ضرورت کاربردی بالایی در حوزه‌های صنعتی، معدنی و نظامی برخوردار می‌باشد.

۱-۷ اهداف

هدف اصلی

هدف اصلی این پژوهش، بررسی اثر نوع مدل‌های سینتیکی و پارامترهای مرتبط با آن‌ها بر دقت نتایج شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد می‌باشد.

اهداف فرعی

۱. شناسایی و ارزیابی مدل‌های سینتیکی مناسب برای شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد پرکاربرد نظیر نیتروگلیسیرین، TNT و PETN.

۲. بررسی و تعیین تأثیر پارامترهای سینتیکی کلیدی از جمله انرژی فعال‌سازی، ثابت سرعت واکنش و فاکتور فرکانس بر دقت خروجی‌های شبیه‌سازی عددی انفجار.
۳. اعتبارسنجی نتایج مدل‌های شبیه‌سازی عددی از طریق مقایسه با داده‌های تجربی حاصل از انفجارهای کنترل‌شده در شرایط آزمایشگاهی.
۴. ارائه پیشنهادهایی کاربردی برای بهبود دقت شبیه‌سازی‌های عددی انفجار با استفاده از مدل‌های سینتیکی بهینه و تنظیم مناسب پارامترهای آن‌ها.
۵. توسعه یک رویکرد (چارچوب) استاندارد و نظام‌مند برای انتخاب مدل‌ها و پارامترهای سینتیکی مناسب در شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد.

۱-۸ فرضیات

- آیا نوع مدل سینتیکی (نظیر مدل‌های مرتبه صفر، مرتبه اول و مدل JMAK) تأثیر معناداری بر دقت پیش‌بینی فشار و دمای انفجار مواد منفجره جامد دارد؟
- آیا تغییر در پارامترهای سینتیکی کلیدی از جمله انرژی فعال سازی و فاکتور فرکانس می‌تواند دقت شبیه‌سازی انتشار موج شوک در انفجار مواد منفجره جامد را بهبود بخشد؟
- آیا معادله حالت JWL در مقایسه با سایر معادلات حالت نظیر BKW، دقت بالاتری در شبیه سازی عددی انفجار نیتروگلیسرین، TNT و PETN ارائه می‌دهد؟
- آیا داده‌های تجربی حاصل از انفجارهای کنترل شده می‌توانند مدل‌های عددی شبیه سازی انفجار را با دقت بالا (خطای کمتر از ۵ درصد) اعتبارسنجی نمایند؟
- آیا بهینه سازی پارامترهای سینتیکی می‌تواند زمان محا سباتی شبیه سازی عددی انفجار را بدون کاهش معنادار دقت نتایج کاهش دهد؟
- کدام‌یک از مدل‌های سینتیکی نظیر مدل Arrhenius، مدل ر شد و ا شتعال (Ignition & Growth)، مدل‌های چندمرحله‌ای و سایر مدل‌های پی شرفته، بی شترین سازگاری و دقت را برای شبیه سازی انواع مختلف مواد منفجره جامد ارائه می کنند؟

۱-۹ روش تحقیق

این پژوهش از نوع تحقیق کاربردی–تحلیلی بوده و با رویکرد شبیه‌سازی عددی همراه با اعتبارسنجی تجربی انجام می‌شود. در گام نخست، با مطالعه جامع ادبیات پژوهش شامل مقالات علمی معتبر و گزارش‌های صنعتی، مدل های سینتیکی رایج و داده های تجربی مرتبط با انفجار مواد منفجره جامد پر کاربرد نظیر نیتروگلیسرین، TNTو PETN جمع‌آوری و تحلیل می‌گردد. در مرحله بعد، شبیه‌سازی عددی انفجار این مواد با استفاده از نرم‌افزارهای پیشرفته ANSYS AUTODYN و LS-DYNA انجام می‌شود؛ به‌طوری‌که مدل‌های سینتیکی مختلف شامل مدل‌های مرتبه صفر، مرتبه اول، مدل JMAK و همچنین معادلات حالت

نظیر JWLو BKW به‌کار گرفته شده و پارامترهای سینتیکی کلیدی مانند انرژی فعال سازی، ثابت سرعت واکنش و فاکتور فرکانس به صورت سیستماتیک تغییر داده می شوند تا اثر آن‌ها بر دقت نتایج شبیه سازی مورد ارزیابی قرار گیرد. هم‌زمان، آزمایش‌های انفجار کنترل‌شـــده در مقیاس آزمایشـــگاهی با رعایت کامل الزامات ایمنی انجام شده و پارامترهایی نظیر فشار، دما و سرعت موج شوک با استفاده از حسگرهای فشار، دماسنج‌های مادون قرمز و سرعت‌سنج‌های لیزری اندازه‌گیری می‌شود. در ادامه، نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی با داده‌های تجربی مقایسه شده و فرآیند اعتبارسنجی مدل‌ها انجام می‌گیرد. همچنین، با انجام تحلیل حساسیت، میزان تأثیر هر یک از پارامترهای سینتیکی بر خروجی‌های شبیه سازی مشخص می شود. در نهایت، داده‌ها با بهره‌گیری از روش‌های آماری نظیر ANOVA و الگوریتم‌های بهینه‌ســـازی مانند الگوریتم ژنتیک در محیط MATLAB تحلیل شـــده و مدل‌ها و پارامترهای ســـینتیکی بهینه برای افزایش دقت شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد پیشنهاد می‌گردد.

۱-۱۰ جمع بندی

در این فصل، کلیات پژوهش با تمرکز بر شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد و نقش تعیین‌کننده مدل‌های سینتیکی در دقت نتایج شبیه‌سازی تشریح شد. ابتدا در بخش مقدمه، اهمیت شبیه‌سازی انفجار به‌عنوان ابزاری کلیدی در تحلیل ایمنی، طراحی تأسیسات و مدیریت ریسک انفجار مورد تأکید قرار گرفت و نشان داده شد که دقت این شبیه‌سازی‌ها به‌شدت وابسته به نوع مدل انفجار و پارامترهای سینتیکی مورد استفاده است. سپس در بیان مسئله، پیچیدگی پدیده انفجار مواد منفجره جامد و چالش‌های مرتبط با مدلسازی واکنش‌های شیمیایی سریع، انتشار موج شوک و عدم قطعیت‌های ناشی از انتخاب نادرست مدل‌ها و پارامترهای سینتیکی مورد بحث قرار گرفت و خلأ موجود در مطالعات نظام‌مند مقایسه‌ای در این حوزه تبیین شد.

در ادامه، زمینه‌های مورد بررسی پژوهش شامل سینتیک واکنش انفجاری، انتشار و تضعیف موج انفجار، توزیع دما، پاسخ سازه‌ها و تأثیر ویژگی‌های فیزیکی مواد منفجره معرفی گردید و موضوع تحقیق به‌طور دقیق در چارچوب شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد پرکاربرد نظیر نیتروگلیسیرین، TNT و PETN تبیین شد. همچنین، اهمیت و ضرورت انجام پژوهش با تأکید بر کاربردهای صنعتی، معدنی، نظامی و ایمنی سازه‌ها و نقش آن در کاهش عدم قطعیت و افزایش اعتمادپذیری نتایج شبیه‌سازی عددی بیان گردید. در بخش اهداف، هدف اصلی و اهداف فرعی پژوهش به‌صورت شفاف تعریف شد و در قالب فرضیات تحقیق، سؤالات کلیدی مرتبط با اثر نوع مدل‌های سینتیکی، پارامترهای واکنشی و معادلات حالت بر دقت پیش‌بینی انفجار مطرح گردید.

در نهایت، روش تحقیق پژوهش تشریح شد که بر پایه شبیه‌سازی عددی با استفاده از نرم‌افزارهای ANSYS AUTODYN و LS-DYNA، انجام آزمایش‌های انفجار کنترل‌شده، اعتبارسنجی نتایج عددی با داده‌های

تجربی، تحلیل حساسیت و بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی استوار است. بدین ترتیب، فصل اول چارچوب نظری و روش‌شناختی لازم برای انجام پژوهش را فراهم کرده و زمینه را برای ارائه مدل‌ها، تحلیل نتایج و بحث تفصیلی در فصول بعدی مهیا می‌سازد.

فصل ۲

زمینه موضوع ومرورمنابع علمی

۲-۱ تعریف انفجار

به‌طور کلی، انفجار (Explosion) به پدیده‌ای اطلاق می‌شود که در آن مقدار زیادی انرژی در مدت‌زمان بسیار کوتاه آزاد شده و منجر به افزایش ناگهانی فشار، دما و حجم محیط اطراف می‌گردد. این آزادسازی سریع انرژی معمولاً با تولید موج فشاری یا موج شوک همراه است که می‌تواند اثرات مخربی بر محیط و سازه‌های اطراف بر جای گذارد. با این حال، از دیدگاه فیزیکی و شیمیایی، انفجار مفهومی عام بوده و شامل مکانیسم‌های مختلفی از جمله احتراق سریع، دفلگراسیون و دتونیشن می‌شود [۱۳،۱۴].

دفلگراسیون (Deflagration) نوعی احتراق زیرصوتی است که در آن جبهه واکنش شیمیایی با سرعتی کمتر از سرعت صوت در محیط پیش می‌رود و انتقال انرژی عمدتاً از طریق رسانش حرارتی و نفوذ گونه‌های واکنش‌دهنده انجام می‌گیرد. در این حالت، افزایش فشار نسبتاً تدریجی بوده و موج شوک قوی تشکیل نمی‌شود. بسیاری از انفجارهای گاز–هوا و احتراق‌های صنعتی در این دسته قرار می‌گیرند [۱۵].

در مقابل، دتونیشن (Detonation) شدیدترین و مخرب‌ترین شکل انفجار شیمیایی محسوب می‌شود. در دتونیشن، جبهه واکنش شیمیایی با سرعتی بالاتر از سرعت صوت حرکت کرده و واکنش شیمیایی مستقیماً توسط موج شوک قوی تحریک می‌شود. این موج شوک با فشرده‌سازی شدید ماده، شرایط لازم برای انجام واکنش‌های شیمیایی بسیار سریع را فراهم می‌کند. در نتیجه، فشارها و دماهای بسیار بالا در زمان‌های بسیار کوتاه ایجاد می‌شوند که مشخصه اصلی انفجار مواد منفجره جامد است [۱۳،۱۴].

برخی پدیده‌ها نیز در محدوده بین دفلگراسیون و دتونیشن قرار می‌گیرند که به آن‌ها گذار از دفلگراسیون به دتونیشن (DDT) گفته می‌شود. این فرآیند نقش مهمی در تحلیل ایمنی انفجارها دارد و به شدت به شرایط هندسی، خواص ماده و سینتیک واکنش وابسته است [۱۴،۱۵].

۲_۲ انواع انفجار

از منظر منشأ انرژی آزادشده، انفجارها به دو دسته اصلی انفجار شیمیایی و انفجار فیزیکی تقسیم می‌شوند.

در انفجار شیمیایی، انرژی نا شی از واکنش‌های شیمیایی بسیار سریع آزاد می شود. این نوع انفجار معمولاً شامل شکستن و تشکیل پیوندهای شیمیایی بوده و مقدار انرژی آزادشده به ساختار مولکولی ماده و

سینتیک واکنش وابسته است. انفجار مواد منفجره جامد، احتراق‌های شدید و دتونیشن‌ها همگی در این دسته قرار می‌گیرند [۱۳].

در مقابل، انفجار فیزیکی بدون وقوع واکنش شیمیایی رخ می‌دهد و منبع انرژی آن معمولاً تغییرات ناگهانی فشار، دما یا فاز ماده است؛ مانند انفجار مخازن تحت فشار، انفجار بخار (BLEVE) یا ترکیدن تجهیزات صنعتی. در این حالت، انرژی آزادشده ناشی از انرژی ذخیره‌شده مکانیکی یا ترمودینامیکی بوده و ماهیت شیمیایی ماده تغییر نمی‌کند [۱۶].

تمایز میان این دو نوع انفجار از دیدگاه مدلسازی عددی اهمیت زیادی دارد، زیرا انفجارهای شیمیایی نیازمند توصیف دقیق سینتیک واکنش و معادلات حالت محصولات انفجار هستند، در حالی که انفجارهای فیزیکی عمدتاً با مدل‌های مکانیکی و ترمودینامیکی قابل شبیه‌سازی‌اند.

۲-۳ جایگاه انفجار مواد منفجره جامد در میان انواع انفجارها

انفجار مواد منفجره جامد در رده انفجارهای شیمیایی پرانرژی و عمدتاً از نوع دتونیشن قرار می‌گیرد. موادی نظیر TNT، RDX، HMX، PETN و نیتروگلیسیرین دارای ساختار مولکولی ناپایدار و انرژی شیمیایی ذخیره‌شده بالایی هستند که در صورت تحریک مناسب، در زمانی بسیار کوتاه آزاد می‌شود. ویژگی بارز این مواد، توانایی ایجاد موج شوک پایدار و خودنگه‌دار است که جبهه واکنش شیمیایی را با سرعت‌های چند کیلومتر بر ثانیه به جلو می‌راند [۱۳،۱۴].

در مقایسه با انفجارهای گازی یا دفلگراسیونی، انفجار مواد منفجره جامد دارای:

- نرخ واکنش بسیار بالاتر،
- فشار و دمای اوج بسیار بیشتر،
- حساسیت بالا به مدل سینتیکی و پارامترهای آن

می‌باشد. به همین دلیل، شبیه سازی عددی این نوع انفجارها به شدت به انتخاب صحیح مدل سینتیکی، پارامترهای واکنش و معادله حالت وابسته است. مطالعات نشان داده‌اند که حتی تغییرات کوچک در پارامترهای سینتیکی می‌تواند منجر به اختلاف قابل توجه در پیش‌بینی فشار، سرعت موج دتونیشن و توزیع انرژی شود [۱۴،۱۵].

بنابراین، انفجار مواد منفجره جامد به‌عنوان یکی از پیچیده‌ترین و حساس‌ترین انواع انفجار، جایگاه ویژه‌ای در مطالعات شبیه سازی عددی دارد و بررسی اثر نوع مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها، نقش کلیدی در افزایش دقت و اعتبار نتایج شبیه‌سازی ایفا می‌کند.

۲-۴ مفهوم سینتیک واکنش در انفجار

سینتیک واکنش به مطالعه نرخ انجام واکنش‌های شیمیایی و مکانیسم‌های حاکم بر پیشرفت آن‌ها در طول زمان اطلاق می‌شود. در پدیده انفجار، سینتیک واکنش نقش تعیین‌کننده‌ای در نحوه آزادسازی انرژی شیمیایی، نرخ افزایش فشار و دما، و شکل‌گیری موج شوک ایفا می‌کند. برخلاف بسیاری از فرآیندهای شیمیایی متداول، واکنش‌های انفجاری در بازه‌های زمانی بسیار کوتاه و تحت شرایط شدید دما و فشار رخ می‌دهند، به‌گونه‌ای که حتی تغییرات جزئی در پارامترهای سینتیکی می‌تواند منجر به اختلاف قابل توجه در شدت و ماهیت انفجار شود [۱۷،۱۸].

در انفجار مواد منفجره جامد، سینتیک واکنش نه‌تنها نرخ تجزیه شیمیایی ماده را تعیین می‌کند، بلکه به‌طور مستقیم با پایداری موج دتونیشن و انتقال آن در محیط جامد مرتبط است. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که برای توصیف دقیق رفتار انفجاری، لازم است مدل‌های سینتیکی قادر به بازنمایی فرآیندهای چندمرحله‌ای شامل آغاز واکنش، رشد تجزیه شیمیایی و آزادسازی سریع انرژی باشند [۱۸،۱۹].

۲-۴-۱ تفاوت سینتیک احتراق معمولی و سینتیک واکنش انفجاری

سینتیک احتراق معمولی، مانند احتراق سوخت‌ها در هوا، عموماً در شرایط نزدیک به تعادل و با نرخ‌های واکنش نسبتاً پایین‌تر انجام می‌شود. در این حالت، انتقال انرژی عمدتاً از طریق رسانش حرارتی و نفوذ گونه‌های شیمیایی صورت می‌گیرد و زمان واکنش در مقیاس میلی‌ثانیه تا ثانیه قرار دارد. به همین دلیل، مدل‌های سینتیکی ساده‌تر، نظیر واکنش‌های مرتبه اول یا دوم، اغلب برای توصیف این نوع احتراق کفایت می‌کنند [۲۰].

در مقابل، سینتیک واکنش انفجاری با نرخ‌های بسیار بالا و زمان‌های مشخصه در مقیاس میکروثانیه یا حتی نانوثانیه همراه است. در انفجار مواد منفجره جامد، واکنش‌های شیمیایی تحت اثر مستقیم موج شوک آغاز می‌شوند و شرایط ترمودینامیکی بسیار شدیدی را تجربه می‌کنند. در این شرایط، سینتیک واکنش به‌شدت وابسته به فشار و دما بوده و مدل‌های ساده قادر به توصیف دقیق فرآیند نیستند. از این رو، استفاده از مدل‌های سینتیکی پیشرفته‌تر مانند مدل‌های چندمرحله‌ای، مدل‌های وابسته به فشار و مدل‌های مبتنی بر انرژی فعال‌سازی، برای شبیه‌سازی دقیق انفجار ضروری است [۱۷،۱۸].

۲-۴-۲ نقش زمان واکنش در شدت انفجار

یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های سینتیک واکنش در انفجار، زمان واکنش یا مقیاس زمانی آزادسازی انرژی است. هرچه واکنش شیمیایی در زمان کوتاه‌تری انجام شود، نرخ آزادسازی انرژی افزایش یافته و فشار و دمای اوج بالاتری ایجاد می‌شود. در انفجارهای دتونیشنی، هم‌زمانی آزادسازی انرژی شیمیایی با عبور موج شوک شرط اساسی برای پایداری موج دتونیشن محسوب می‌شود [۱۸].

مطالعات تجربی و عددی نشان داده‌اند که اگر زمان واکنش نسبت به زمان عبور موج شوک طولانی‌تر باشد، واکنش قادر به پشتیبانی از موج دتونیشن نبوده و فرآیند به سمت دفلگراسیون یا انفجار ناقص سوق پیدا

می‌کند. در مقابل، واکنش‌های بسیار سریع می‌توانند منجر به افزایش شدت انفجار، سرعت بالاتر موج دتونیشن و تغییر قابل توجه در توزیع فشار و دما شوند [۱۹].

بنابراین، تعریف دقیق سینتیک واکنش و انتخاب صحیح پارامترهایی نظیر انرژی فعال سازی، ثابت سرعت واکنش و عامل فرکانس نقش کلیدی در شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد دارد. عدم دقت در تعیین این پارامترها می‌تواند منجر به خطای قابل توجه در پیش‌بینی رفتار انفجاری و کاهش اعتبار نتایج شبیه‌سازی شود [۱۷،۲۰].

۲-۵ نقش معادلات حالت در شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد

معادلات حالت (Equation of State, EOS) یکی از ارکان بنیادین در شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد به شمار می‌روند و نقش تعیین‌کننده‌ای در توصیف رفتار ترمودینامیکی محصولات انفجار ایفا می‌کنند. در فرآیند انفجار، انرژی شیمیایی ذخیره شده در ماده منفجره طی یک واکنش بسیار سریع آزاد شده و به انرژی درونی، فشار و دمای محصولات تبدیل می‌شود. در این میان، اگرچه مدل‌های سینتیکی نرخ و زمان‌بندی آزاد سازی انرژی شیمیایی را کنترل می‌کنند، این معادله حالت است که مشخص می سازد این انرژی چگونه به افزایش فشار، تغییر حجم و انجام کار مکانیکی منجر شود.

در واقع، EOS رابطه اساسی بین فشار، حجم ویژه و انرژی درونی (یا دما) را برقرار می‌کند و بدون تعریف دقیق آن، امکان پیش‌بینی صحیح پاسخ دینامیکی محیط اطراف انفجار وجود ندارد. اهمیت این موضوع محدود به انفجارهای مهندسی نیست؛ مطالعات انجام‌شده در حوزه انفجارهای اخترفیزیکی نیز نشان داده‌اند که انتخاب معادله حالت مناسب می‌تواند به‌طور مستقیم سرنوشت یک پدیده انفجاری را تعیین کند. به‌عنوان مثال، Suwa و همکاران (۲۰۱۳) نشان دادند که در شبیه سازی انفجارهای ابرنواختری، تغییر در EOS منجر به تفاوت‌های اساسی در شدت انفجار و توزیع انرژی می شود، که این موضوع بیانگر نقش بنیادین EOS در تمامی فرآیندهای انفجاری، صرف‌نظر از مقیاس آن‌هاست [۲۱].

در انفجار مواد منفجره جامد، شرایط ترمودینامیکی محصولات واکنش به شدت از حالت گاز ایده‌آل فاصله دارد. فشارهای بسیار بالا، دماهای چند هزار کلوین و چگالی‌های قابل‌توجه باعث می‌شوند که برهم‌کنش‌های مولکولی و اثرات حجم محدود مولکول‌ها نقش مهمی در رفتار محصولات انفجار ایفا کنند. از این رو، استفاده از معادلات حالت ساده قادر به بازنمایی دقیق این شرایط نیست و توسعه EOSهای ویژه انفجار امری ضروری است. Kopyshev و همکاران (۲۰۰۶) با توسعه یک معادله حالت مبتنی بر مدل اصلاح‌شده وان‌دروالس نشان دادند که در نظر گرفتن اثرات غیرایده‌آل در محصولات انفجار می‌تواند به بهبود چشمگیر پیش‌بینی فشار و انرژی انفجار منجر شود [۲۲].

از منظر شبیه سازی عددی، معادله حالت نه‌تنها مقدار فشار تولیدی را تعیین می‌کند، بلکه بر سرعت موج دتونیشن، شکل موج شوک، نرخ افت فشار در مرحله انبساط و میزان انرژی منتقل‌شده به محیط اطراف نیز اثر مستقیم دارد. حتی در صورتی که مدل سینتیکی به‌درستی انتخاب شده باشد، به‌کارگیری یک EOS

نامناسب می‌تواند باعث انحراف قابل توجه نتایج عددی از داده‌های تجربی شود. این موضوع در مطالعات مقایسه‌ای بین EOSهای مختلف به‌وضوح مشاهده شده است. Amar و همکاران (۲۰۱۷) با مقایسه معادلات حالت JWL و BKW نشان دادند که تفاوت در ساختار EOS می‌تواند منجر به اختلاف معنی‌دار در پیش‌بینی فشار–زمان و رفتار گذرای موج شوک در شبیه‌سازی انفجار شود [۲۳].

بنابراین، در چارچوب شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد، معادله حالت مکمل جدایی‌ناپذیر مدل‌های سینتیکی محسوب می شود. مدل سینتیکی تعیین می‌کند چه میزان انرژی و با چه سرعتی آزاد شود، در حالی که EOS مشخص می‌کند این انرژی چگونه به رفتار مکانیکی و ترمودینامیکی محصولات انفجار تبدیل گردد. در نتیجه، انتخاب و ارزیابی معادله حالت مناسب، شرط لازم برای دستیابی به دقت بالای شبیه‌سازی و اعتبارسنجی نتایج عددی با داده‌های تجربی است؛ موضوعی که مستقیماً در راستای هدف و فرضیه اصلی پژوهش حاضر قرار دارد.

معادلات حالت (Equation of State) در انفجار

معادلات حالت (Equation of State, EOS) یکی از اجزای بنیادین در شبیه سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد محسوب می شوند و نقش کلیدی در توصیف رفتار ترمودینامیکی محصولات انفجار ایفا می‌کنند. در فرآیند انفجار، انرژی شیمیایی ذخیره شده در پیوندهای مولکولی ماده منفجره طی یک واکنش بسیار سریع آزاد شده و به انرژی درونی، فشار و دمای محصولات تبدیل می‌شود. در این میان، اگرچه مدل‌های سینتیکی نرخ آزادسازی انرژی و زمان‌بندی واکنش را تعیین می‌کنند، این معادله حالت است که مشخص می‌سازد این انرژی آزادشده چگونه به فشار، تغییر حجم و انجام کار مکانیکی بر محیط اطراف تبدیل گردد.

به بیان دیگر، مدل سینتیکی پاسخ می‌دهد که چه مقدار انرژی و با چه سرعتی آزاد می شود، در حالی که EOS تعیین می‌کند این انرژی آزاد شده چه اثری بر رفتار مکانیکی و ترمودینامیکی محصولات انفجار خواهد داشت. از این رو، EOS و مدل سینتیکی دو جزء کاملاً مکمل و وابسته به یکدیگر در شبیه‌سازی انفجار هستند و عدم دقت در هر یک می‌تواند به خطای قابل توجه در نتایج عددی منجر شود[۲۳].

۲-۵-۱ نقش معادله حالت در شبیه‌سازی انفجار

ارتباط فشار، دما و حجم

معادله حالت رابطه بین فشار PPP، حجم ویژه VVV و انرژی درونی EEE (یا دما) را برای محصولات انفجار برقرار می‌کند. در انفجارهای دتونیشنی، محصولات واکنش در شرایط بسیار شدید دما و فشار قرار دارند؛ فشارهایی در حد ده‌ها گیگاپاسکال و دماهایی چند هزار کلوین که رفتار ترمودینامیکی مواد را به‌شدت غیرایده‌آل می‌سازد. در چنین شرایطی، فرضیات گاز ایده‌آل دیگر معتبر نبوده و برهم‌کنش‌های مولکولی، اثرات حجم محدود و فشردگی بالا نقش غالبی در تعیین فشار و انرژی ایفا می‌کنند.

از این رو، استفاده از EOSهای ساده منجر به ساده‌سازی بیش‌ازحد رفتار واقعی محصولات انفجار می‌شود و توانایی پیش‌بینی دقیق پارامترهایی نظیر فشار اوج، سرعت موج دتونیشن و توزیع دما را کاهش می‌دهد.

معادلات حالت ویژه انفجار برای غلبه بر این محدودیت‌ها توسعه یافته‌اند تا بتوانند رفتار محصولات انفجار را در بازه وسیعی از فشار و حجم با دقت مناسب مدل‌سازی کنند[۲۳].

EOS تعیین می‌کند که انرژی آزادشده توسط واکنش شیمیایی با چه نرخی به افزایش فشار و انبساط محصولات انفجار منجر شود. این موضوع مستقیماً بر:

- مقدار فشار اوج،
- پایداری و سرعت موج دتونیشن،
- و میرایی موج شوک در حین انتشار

اثرگذار است. بنابراین، EOS نقش محوری در بازتولید رفتار دینامیکی واقعی انفجار در شبیه‌سازی‌های عددی دارد.

نقش EOS در محصولات انفجار

در مواد منفجره جامد، محصولات انفجار معمولاً شامل مخلوطی از گازها، بخارات داغ و در برخی موارد فازهای متراکم هستند که دارای برهم‌کنش‌های قوی مولکولی می‌باشند. معادله حالت مناسب باید قادر باشد ویژگی‌های زیر را به‌صورت واقع‌بینانه توصیف کند:

- رفتار فشرده‌سازی شدید محصولات انفجار بلافاصله پس از دتونیشن،
- انبساط سریع و غیرخطی محصولات پس از عبور موج شوک،
- و تغییرات انرژی درونی در طول فرآیند انبساط و انجام کار مکانیکی.

مطالعات عددی و تجربی نشان داده‌اند که حتی در صورت استفاده از مدل سینتیکی دقیق، انتخاب EOS نامناسب می‌تواند منجر به اختلاف قابل توجه بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های تجربی شود. این موضوع اهمیت EOS را به‌عنوان یکی از عوامل اصلی تعیین‌کننده دقت شبیه‌سازی انفجار برجسته می‌سازد[۲۱].

۲-۴-۲ معادله حالت JWL

مبانی نظری JWL

معادله حالت **Jones–Wilkins–Lee (JWL)** یکی از پرکاربردترین EOSها در شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد است. این معادله به‌صورت تجربی–نیمه‌تحلیلی توسعه یافته و به‌طور خاص برای توصیف رفتار محصولات انفجار پس از دتونیشن طراحی شده است. فرم کلی معادله JWL به صورت زیر بیان می‌شود:

$$P - A\left(1 - \frac{\omega}{R_1 V}\right)e^{-R_1 V} + B\left(1 - \frac{\omega}{R_2 V}\right)e^{-R_2 V} + \frac{\omega E}{V}$$

پارامترهای اصلی JWL

پارامترهای JWL به‌گونه‌ای تنظیم می‌شوند که بتوانند هم‌زمان:

- **ناحیه فشار بسیار بالا** بلافاصله پس از دتونیشن،

- و **ناحیه انبساط محصولات انفجار** در حجم‌های بزرگ‌تر

را با دقت مناسب پوشش دهند. وجود دو جمله نمایی در معادله، امکان تطبیق رفتار EOS را در بازه وسیعی از حجم ویژه فراهم می‌کند، در حالی که جمله وابسته به انرژی درونی، نقش مهمی در مدل‌سازی اثرات حرارتی محصولات انفجار ایفا می‌نماید. این ساختار انعطاف‌پذیر، JWL را به گزینه‌ای مناسب برای شبیه‌سازی‌های دینامیکی انفجار تبدیل کرده است[۲۰].

کاربرد JWL در TNT، PETN و نیتروگلیسیرین

معادله حالت JWL به‌طور گسترده برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره‌ای نظیر **TNT، PETN و نیتروگلیسیرین** مورد استفاده قرار گرفته است. پارامترهای این EOS معمولاً از طریق تطبیق با داده‌های تجربی دتونیشن، نظیر فشار اوج و سرعت موج دتونیشن، استخراج می شوند و در نرم‌افزارهای شبیه سازی دینامیکی مانند **ANSYS AUTODYN** و **LS-DYNA** به‌صورت استاندارد در دسترس هستند.

مطالعات مقایسه‌ای نشان داده‌اند که JWL معمولاً قادر است فشار اوج و روند افت فشار پس از دتونیشن را با دقت بالاتری نسبت به بسیاری از EOSهای دیگر پیش‌بینی کند، به‌ویژه در شرایطی که انبساط سریع محصولات انفجار و پاسخ گذرای موج شوک اهمیت دارد. این ویژگی، JWL را به EOS غالب در کاربردهای مهندسی انفجار تبدیل کرده است[۲-].

۲-۵-۲ معادله حالت BKW

ساختار معادله BKW

معادله حالت Becker–Kistiakowsky–Wilson (BKW) بر پایه توصیف ترمودینامیکی دقیق‌تر محصولات انفجار و لحاظ‌کردن برهم‌کنش‌های مولکولی توسعه یافته است. این معادله بیشتر بر محاسبه خواص تعادلی محصولات انفجار تمرکز دارد و نیازمند اطلاعات دقیق از ترکیب شیمیایی محصولات واکنش است. از این رو، BKW به‌طور سنتی در تحلیل‌های ترمودینامیکی و محاسبه مشخصات تعادلی دتونیشن کاربرد بیشتری داشته است.

تفاوت BKW با JWL

تفاوت اساسی BKW و JWL در رویکرد آن‌ها به مدل‌سازی انفجار است:

- BKW مبتنی بر محاسبات ترمودینامیکی و تعادلی بوده و برای تحلیل دقیق ترکیب محصولات انفجار مناسب‌تر است.
- JWL یک EOS تجربی است که به‌طور خاص برای شبیه‌سازی دینامیکی انفجار، انتشار موج شوک و رفتار گذرای فشار طراحی شده است.

مطالعات مقایسه‌ای، از جمله مطالعه Amar و همکاران (۲۰۱۷)، نشان می‌دهد که اگرچه BKW می‌تواند در برخی شرایط تعادلی خواص محصولات انفجار را با دقت مناسبی پیش‌بینی کند، اما در شبیه‌سازی‌های دینامیکی سریع، JWL اغلب تطابق بهتری با داده‌های تجربی فشار–زمان از خود نشان می‌دهد، به‌ویژه در کاربردهای مهندسی و تحلیل پاسخ سازه‌ها در برابر انفجار.

محدودیت‌های BKW

از مهم‌ترین محدودیت‌های معادله حالت BKW می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- حساسیت بالا به ترکیب دقیق محصولات انفجار که در بسیاری از شبیه‌سازی‌های مهندسی به‌طور دقیق در دسترس نیست،
- پیچیدگی محاسباتی و نیاز به اطلاعات ترمودینامیکی گسترده،
- و دقت کمتر در بازتولید رفتار گذرای موج شوک در شبیه سازی‌های عددی با مقیاس زمانی بسیار کوتاه.

این محدودیت‌ها موجب شده است که استفاده از BKW در نرم‌افزارهای دینامیکی انفجار نسبت به JWL محدودتر باشد و JWL به‌عنوان گزینه‌ای عملی‌تر و پایدارتر در شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد مورد استفاده قرار گیرد[۲۰].

۲-۶ شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد

شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد یکی از مؤثرترین ابزارها برای تحلیل رفتار پیچیده و بسیار سریع فرآیند دتونیشن به شمار می‌رود. در انفجارهای دتونیشنی، پدیده‌هایی نظیر واکنش‌های شیمیایی فوق‌سریع، انتشار موج شوک، تغییرات شدید فشار و دما، و برهم‌کنش موج با محیط و سازه‌ها به صورت هم‌زمان رخ می‌دهند. بررسی تجربی تمامی این پدیده‌ها، به‌ویژه در مقیاس واقعی، همواره با محدودیت‌های ایمنی، هزینه و تکرارپذیری همراه است. از این رو، شبیه‌سازی عددی به‌عنوان ابزاری مکمل و گاه جایگزین آزمایش‌های انفجاری مطرح می‌شود [۱۰-۶].

در شبیه سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد، مدل سازی صحیح مستلزم کوپل دقیق سه مؤلفه اصلی است:

۱. مدل‌های سینتیکی واکنش شیمیایی (برای تعیین نرخ آزادسازی انرژی)،
۲. معادلات حالت (EOS) (برای توصیف رفتار ترمودینامیکی محصولات انفجار)،
۳. و روش عددی مناسب برای حل معادلات بقای جرم، مومنتوم و انرژی.

عدم دقت در هر یک از این مؤلفه‌ها می‌تواند منجر به انحراف قابل توجه نتایج شبیه‌سازی از رفتار واقعی انفجار شود. مطالعات متعددی نشان داده‌اند که انتخاب روش عددی و نحوه گسسته‌سازی دامنه، تأثیر مستقیمی بر پیش‌بینی فشار اوج، سرعت موج شوک و توزیع دما دارد [۱۳].

۲-۷ روش‌های عددی در شبیه‌سازی انفجار

روش‌های عددی مورد استفاده در شبیه سازی انفجار را می‌توان به‌طور کلی به سه دسته اصلی لاگرانژی، اویلری و لاگرانژی–اویلری دلخواه (ALE) تقسیم کرد. هر یک از این روش‌ها دارای مزایا و محدودیت‌های خاص خود بوده و انتخاب آن‌ها به نوع مسئله، مقیاس انفجار و هدف شبیه‌سازی بستگی دارد [۶].

روش لاگرانژی (Lagrangian Method)

در روش لاگرانژی، شبکه محاسباتی همراه با ماده حرکت می‌کند و هر گره شبکه نماینده یک ذره مشخص از ماده است. این ویژگی باعث می‌شود که رهگیری دقیق مرزها و تغییر شکل مواد جامد به‌خوبی امکان‌پذیر باشد. از این رو، روش لاگرانژی به‌طور گسترده برای مدل سازی رفتار سازه‌ها، محفظه‌ها و محیط‌های جامد در برابر بار انفجار مورد استفاده قرار می‌گیرد.

با این حال، در مسائل انفجاری که با تغییر شکل‌های بسیار بزرگ و انبساط شدید محصولات انفجار همراه هستند، روش لاگرانژی با مشکل اعوجاج شدید شبکه (Mesh Distortion) مواجه می‌شود. این پدیده می‌تواند موجب ناپایداری عددی و کاهش دقت نتایج شود. به همین دلیل، استفاده از روش لاگرانژی خالص برای مدل‌سازی مستقیم محصولات انفجار محدود است و معمولاً در ترکیب با سایر روش‌ها به‌کار می‌رود [۱۱].

روش اویلری (Eulerian Method)

در روش اویلری، شبکه محاسباتی ثابت است و ماده از درون سلول‌های شبکه عبور می‌کند. این رویکرد به‌ویژه برای مدل‌سازی جریان‌های با تغییر شکل بسیار بزرگ، موج شوک و انبساط سریع گازها بسیار مناسب است. در شبیه سازی انفجار مواد منفجره جامد، روش اویلری امکان مدل سازی پایدار محصولات انفجار و انتشار موج شوک در محیط اطراف را فراهم می‌کند.

یکی از مزایای اصلی روش اویلری، پایداری عددی بالا در حضور گرادیان‌های شدید فشار و دما است. به همین دلیل، این روش به‌طور گسترده در شبیه سازی انفجارهای شیمیایی و گازی مورد استفاده قرار گرفته است [۳].

با این حال، ضعف اصلی روش اویلری در دشواری رهگیری دقیق مرزها و فصل مشترک مواد مختلف است، که می‌تواند منجر به پدیده پخش عددی (Numerical Diffusion) شود[۱].

روش لاگرانژی–اویلری دلخواه (ALE)

روش ALE (Arbitrary Lagrangian–Eulerian) ترکیبی از دو رویکرد لاگرانژی و اویلری است و تلاش می‌کند مزایای هر دو روش را به‌صورت هم‌زمان به‌کار گیرد. در این روش، شبکه محاسباتی می‌تواند به‌صورت دلخواه حرکت کند؛ نه کاملاً ثابت (اویلری) و نه کاملاً هم‌حرکت با ماده (لاگرانژی).

روش ALE به‌طور خاص برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد و برهم‌کنش محصولات انفجار با سازه‌ها بسیار مناسب است، زیرا:

- امکان مدل‌سازی انبساط شدید محصولات انفجار را فراهم می‌کند،
- اعوجاج شبکه را کنترل می‌نماید،
- و دقت مناسبی در رهگیری مرز مواد مختلف ارائه می‌دهد.

به همین دلیل، بسیاری از نرم‌افزارهای پیشرفته شبیه‌سازی انفجار نظیر ANSYS AUTODYN و LS-DYNA از روش ALE به‌عنوان گزینه اصلی در مسائل دتونیشن استفاده می‌کنند. مطالعات متعددی نشان داده‌اند که

استفاده از ALE در کنار مدل‌های سینتیکی مناسب و EOS دقیق، می‌تواند پیش‌بینی فشار–زمان و سرعت موج شوک را با دقت بالایی نسبت به داده‌های تجربی منطبق سازد [۷].

۲-۹ عدم قطعیت در مدل‌های سینتیکی واکنش‌های انفجاری

یکی از چالش‌های اساسی در شبیه سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد، وجود عدم قطعیت در مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها است. واکنش‌های شیمیایی در فرآیند دتونیشن در بازه‌های زمانی بسیار کوتاه (در حد میکروثانیه) و تحت شرایط فشار و دما رخ می‌دهند؛ شرایطی که اندازه‌گیری مستقیم نرخ واکنش و پارامترهای سینتیکی را با دشواری جدی مواجه می سازد. در نتیجه، مدل‌های سینتیکی مورد استفاده در شبیه‌سازی‌ها همواره با درجاتی از عدم قطعیت همراه هستند که می‌تواند به‌طور مستقیم بر دقت پیش‌بینی فشار، دما، سرعت موج شوک و انرژی آزادشده تأثیر بگذارد.

۱. منابع اصلی عدم قطعیت در مدل‌های سینتیکی

عدم قطعیت در شبیه‌سازی‌های مبتنی بر سینتیک را می‌توان به‌طور کلی به دو دسته اصلی تقسیم کرد:
(الف) عدم قطعیت ساختاری مدل و (ب) عدم قطعیت پارامتری.

عدم قطعیت ناشی از انتخاب ساختار مدل سینتیکی

مدل‌های سینتیکی مختلف (مانند مدل‌های مرتبه صفر و اول، مدل JMAK، مدل Ignition & Growth و مدل‌های چندمرحله‌ای) هر یک بر پایه فرضیات فیزیکی و شیمیایی متفاوتی توسعه یافته‌اند. انتخاب هر یک از این مدل‌ها به‌منزله ساده‌سازی رفتار واقعی واکنش انفجاری است و می‌تواند منجر به عدم قطعیت ساختاری شود.

برای مثال، مدل‌های ساده مرتبه اول ممکن است برای توصیف کلی آزادسازی انرژی مناسب باشند، اما قادر به بازنمایی دقیق فرآیندهای پیچیده‌ای نظیر مرحله القا، رشد هسته‌های واکنش و اشباع واکنش نیستند. در مقابل، مدل‌های پیشرفته‌تری مانند JMAK یا I&G، با وجود دقت بالاتر، نیازمند پارامترهای بیشتر و داده‌های تجربی دقیق‌تری هستند که خود می‌تواند منبع جدیدی از عدم قطعیت ایجاد کند. مطالعات نشان داده‌اند که انتخاب نادرست ساختار مدل می‌تواند حتی بیش از خطای پارامترها، بر نتایج نهایی شبیه سازی تأثیر بگذارد [۲۶].

عدم قطعیت پارامتری در مدل‌های سینتیکی

پارامترهای سینتیکی نظیر انرژی فعال‌سازی، ضریب پیش‌نمایی (فاکتور فرکانس) و ثابت نرخ واکنش معمولاً از داده‌های تجربی محدود یا برازش عددی استخراج می‌شوند. این پارامترها به‌شدت به شرایط آزمایش (دما، فشار، نرخ کرنش) وابسته‌اند و انتقال آن‌ها به شرایط دتونیشن واقعی همواره با خطا همراه است.

Sheen و همکاران [۲۴]. نشان داده‌اند که حتی تغییرات جزئی در پارامترهای سینتیکی می‌تواند منجر به انحراف قابل‌توجهی در نرخ آزادسازی انرژی و در نتیجه در پیش‌بینی فشار و دمای احتراق شود. این مسئله در انفجار مواد منفجره جامد، که کوپل قوی بین سینتیک واکنش و معادله حالت (EOS) وجود دارد، اهمیت دوچندان می‌یابد.

۲-۱۰ انتشار عدم قطعیت در شبیه‌سازی انفجار

عدم قطعیت‌های موجود در مدل‌های سینتیکی تنها به نرخ واکنش محدود نمی‌شوند، بلکه از طریق حل معادلات بقای جرم، مومنتوم و انرژی، به سایر متغیرهای میدان انفجار منتقل می شوند. این پدیده که به آن انتشار عدم قطعیت (Uncertainty Propagation) گفته می‌شود، می‌تواند موجب تغییر در:

- فشار اوج موج شوک،
- زمان رسیدن موج،
- سرعت دتونیشن،
- و میزان میرایی موج در محیط اطراف گردد.

مطالعات حوزه کمّی سازی عدم قطعیت نشان می‌دهد که مدل‌های سینتیکی از جمله حساس‌ترین اجزای مدل‌سازی انفجار هستند و سهم قابل توجهی در واریانس خروجی‌های عددی دارند [۲۶]. Dimarco و همکاران [۲۶] تأکید می‌کنند که در مدل‌های مبتنی بر معادلات سینتیکی، عدم قطعیت پارامترها می‌تواند به‌صورت غیرخطی تقویت شده و پیش‌بینی‌های نهایی را به‌طور معناداری تحت تأثیر قرار دهد.

۲-۱۰-۱ نقش انتخاب مدل و پارامترها در کاهش عدم قطعیت

انتخاب آگاهانه مدل سینتیکی و تنظیم بهینه پارامترهای آن، یکی از مؤثرترین راهکارها برای کاهش عدم قطعیت در شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد است. پژوهش‌های اخیر نشان می‌دهد که:

- استفاده از مدل‌های سینتیکی متناسب با نوع ماده منفجره،
- انجام تحلیل حساسیت پارامترها،
- و به‌کارگیری روش‌های بهینه‌سازی و طراحی آزمایش هدفمند

می‌تواند به‌طور قابل توجهی عدم قطعیت خروجی‌ها را کاهش دهد [۲۶].

Matyja [۲۵] با ارائه یک راهبرد نوین در طراحی آزمایش، نشان داد که انتخاب هوشمند داده‌های تجربی برای کالیبراسیون پارامترهای سینتیکی می‌تواند عدم قطعیت پارامتری را بدون افزایش هزینه آزمایش‌ها کاهش دهد. این رویکرد در شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد، به‌ویژه در ترکیب با الگوریتم‌های بهینه‌سازی (مانند الگوریتم ژنتیک)، امکان دستیابی به دقت بالا با زمان محاسباتی کمتر را فراهم می‌کند.

۲-۱۱ پیشینه تحقیقات

Guo و همکاران [27] در پژوهشی نوآورانه به بررسی روابط تبدیلی و پارامترهای کلیدی مؤثر بر ویژگی‌های انفجاری سوخت‌ها پرداخته‌اند و به‌طور خاص ارتباط میان زمان تأخیر خودا شتعالی (Ignition Delay Time, IDT)و حدود انفجار (Explosion Limits, EL) را مورد تحلیل قرار داده‌اند. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که اگرچه IDT و EL به‌طور سنتی به‌عنوان دو شاخص مستقل برای توصیف واکنش‌پذیری شیمیایی سوخت‌ها در نظر گرفته می‌شوند، اما هر دو تنها به سه پارامتر اصلی زمان اقامت، فشار و دما وابسته بوده و از این طریق می‌توان رابطه‌ای تبدیل‌پذیر میان آن‌ها برقرار کرد. نویسندگان با ارائه یک چارچوب تحلیلی، نشان

دادند که منحنی‌های IDT سوخت‌هایی نظیر هیدروژن، متان، اتان و پروپان—با رفتارهای مختلفی از جمله S-شکل، تقریباً خطی، ضریب دمایی صفر (ZTC) و ضریب دمایی منفی—(NTC) قابل تبدیل مستقیم به منحنی‌های EL متناظر هستند. همچنین مشخص شد که افزایش نسبت هم‌ارزی منجر به چرخش پادساعت‌گرد منحنی‌های IDT و EL در مخلوط H_2/O_2 شده و واکنش‌پذیری مخلوط C_3H_8/O_2 را به‌طور معناداری افزایش می‌دهد، در حالی که افزودن گاز نیتروژن با کاهش غلظت سوخت و اکسیدکننده، واکنش‌پذیری کلی را کاهش می‌دهد. این نتایج بر نقش تعیین‌کننده پارامترهای سینتیکی و شرایط ترمودینامیکی اولیه در کنترل ویژگی‌های انفجار تأکید داشته و اهمیت انتخاب صحیح مدل‌ها و پارامترهای سینتیکی را برای دستیابی به شبیه‌سازی‌های دقیق انفجار برجسته می‌سازد.

Mihali و همکاران [28] در مطالعه‌ای جامع، تأثیر سطح پیچیدگی مدل‌سازی سازه را بر دقت پیش‌بینی پیامدهای انفجار خارجی مورد بررسی قرار داده‌اند و نقش کلیدی جزئیات هندسی در شبیه‌سازی‌های عددی انفجار را برجسته ساخته‌اند. در این پژوهش، اثر یک انفجار بر روی ساختمانی با هندسه پیچیده با استفاده از شبیه‌سازی CFD در محیط blastFoam تحلیل شد و نتایج حاصل با روش نیمه‌تجربی Load Blast Enhanced (LBE) در نرم‌افزار LS-DYNA مقایسه گردید. نویسندگان چهار سطح مختلف از جزئیات هندسی ساختمان را مدنظر قرار دادند تا حساسیت نتایج فشار انفجار، میزان آسیب سازه‌ای و توزیع خطرات انسانی نسبت به پیچیدگی مدل بررسی شود. نتایج نشان داد که اگرچه مدل‌های ساده CFD می‌توانند برای ارزیابی آسیب نما و برآورد کلی خطرات پیرامونی کفایت کنند، اما در پیش‌بینی دقیق توزیع فشار و آسیب در فضاهای داخلی دچار خطای قابل‌توجه می شوند. همچنین مشخص شد که روش نیمه‌تجربی LBE به‌دلیل اتکا به فرضیات میدان آزاد و نادیده‌گرفتن بازتاب امواج شوک، به‌طور سیستماتیک میزان آسیب سازه‌ای و سطح جراحات انسانی را کمتر از مقدار واقعی برآورد می‌کند. این مطالعه بر اهمیت لحاظ‌کردن دیوارهای داخلی، پنجره‌ها و جزئیات معماری در شبیه‌سازی انفجار تأکید دارد و نشان می‌دهد که دقت نتایج شبیه‌سازی انفجار نه‌تنها به مدل‌های سینتیکی و معادلات حالت، بلکه به سطح وفاداری مدل عددی و هندسی نیز وابستگی جدی دارد؛ موضوعی که مستقیماً با هدف پژوهش حاضر در ارزیابی عوامل مؤثر بر دقت شبیه‌سازی انفجار هم‌راستا است.

Wang و همکاران [29] در پژوهشی ترکیبی، به بررسی ویژگی‌های انفجار گرد و غبار آلومینیوم از طریق شبیه‌سازی عددی CFD و آزمایش‌های کنترل‌شده در یک محفظه انفجاری ۵ لیتری پرداخته‌اند. تمرکز اصلی این مطالعه بر تحلیل الگوی انتشار ذرات آلومینیوم، تغییرات فشار انفجار در طول زمان و مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی بوده است. نتایج نشان داد که مقادیر فشار بیشینه انفجار و نرخ افزایش فشار حاصل از شبیه‌سازی، بسته به غلظت گرد و غبار، دارای اختلافی در بازه ۲ تا ۱۹ درصد نسبت به نتایج آزمایشگاهی است که بیانگر قابلیت اعتماد نسبی مدل عددی در پیش‌بینی رفتار انفجار می‌باشد. همچنین مشخص شد که تغییر غلظت ذرات آلومینیوم تأثیر قابل‌توجهی بر فشار انفجار، نرخ افزایش فشار و سرعت رسیدن شعله به دیواره‌ها دارد، به‌گونه‌ای که بیشینه فشار و بیشینه نرخ افزایش فشار در آزمایش‌ها در

غلظت‌های ۵۰۰ و ۹۰۰ g/m^3 مشاهده شد، در حالی که الگوهای تغییرات در شبیه‌سازی به‌طور کامل با نتایج تجربی منطبق نبودند. این عدم انطباق نشان‌دهنده حساسیت بالای نتایج شبیه سازی انفجار به پارامترهای ورودی مدل، نحوه مدل‌سازی سینتیک واکنش و توزیع ذرات است. یافته‌های این پژوهش بر اهمیت اعتبارسنجی تجربی مدل‌های عددی و بررسی عدم قطعیت پارامترها تأکید داشته و به‌طور مستقیم از ضرورت پژوهش حاضر در ارزیابی اثر پارامترهای سینتیکی و مدل‌سازی بر دقت شبیه‌سازی انفجار پشتیبانی می‌کند.

Salzano و Basco [30] در مطالعه‌ای کاربردی، یک مدل ساده‌شده اما مبتنی بر معادلات بنیادی برای ارزیابی اثرات انفجارهای شیمیایی بر تجهیزات و اهداف صنعتی ارائه کرده‌اند که هدف آن تسهیل تحلیل آسیب و آسیب‌پذیری در مطالعات ایمنی فرایندی است. این مدل با توسعه عدد آسیب جانسون (Johnson's Damage Number)، اثر متقابل موج فشار انفجار یا برخورد قطعات پرتاب شده را با درنظرگرفتن پارامترهای سازه‌ای و سیال‌دینامیکی هدف توصیف می‌کند. در این پژوهش، انواع مختلف انفجار از جمله انفجار ابر بخار(VCE) ، انفجار مخازن تحت فشار (BLEVE) و برخورد ترکش‌ها مورد بررسی قرار گرفته و با استفاده از توابع احتمالاتی(Probit Functions) ، احتمال بروز آسیب و تشدید پیامدها (Domino Effects) تحلیل شده است. نتایج حاصل از اعتبارسنجی مدل با داده‌های واقعی حوادث صنعتی نشان می‌دهد که اگرچه این رویکرد ساده‌شده برای برآورد سریع اثرات انفجار و تحلیل سناریوهای تصاعدی مفید است، اما به‌دلیل ساده‌سازی‌های ذاتی، توانایی محدودی در بازتولید دقیق میدان فشار، بازتاب امواج شوک و اندرکنش‌های پیچیده سازه–سیال دارد. این محدودیت‌ها اهمیت استفاده از مدل‌های عددی دقیق‌تر مبتنی بر CFD و سینتیک واکنش را برای دستیابی به پیش‌بینی‌های دقیق‌تر برجسته می‌سازد و جایگاه پژوهش حاضر را در بهبود دقت شبیه‌سازی انفجار از طریق بررسی مدل‌های سینتیکی و پارامترهای مؤثر بر آن‌ها توجیه می‌کند.

Yangو همکاران [31] در پژوهشی عددی–تجربی، به توسعه یک چارچوب محاسباتی مکانیکی– شیمیایی برای پیش‌بینی پاسخ‌های دینامیکی و فرآیند اشتعال–دفلگراسیون مواد منفجره پلیمری‌باند شده (PBXs) تحت بارگذاری ضربه‌ای با سرعت پایین تا متوسط ۷۰ تا ۳۵۰ m/s پرداخته‌اند. در این مطالعه، شبیه‌سازی‌های دوبعدی با استفاده از کد هیدرودینامیکی DREXH-2D انجام شده و معیار اشتعال بر اساس کار پلاستیک مؤثر تعریف گردیده است. رشد احتراق آهسته و تبدیل آن به دفلگراسیون با بهره‌گیری از یک معادله نرخ واکنش وابسته به فشار مدل‌سازی شده است. نتایج نشان داد که مقدار بیشینه کار پلاستیک مؤثر می‌تواند به‌عنوان شاخصی قابل‌اعتماد برای تعیین سرعت آستانه اشتعال در PBXs مورد استفاده قرار گیرد. همچنین مشخص شد که در سرعت‌های ضربه‌ای پایین، بازتاب موج تنش از سطوح جانبی نقش کلیدی در ایجاد نواحی اشتعال ایفا می‌کند، در حالی که در سرعت‌های متوسط، شدت دفلگراسیون به‌طور مستقیم تابع قدرت موج شوک است. از سوی دیگر، در شرایط تنش ضعیف، واکنش تنها در نواحی موضعی رخ داده و تداوم احتراق حساسیت کمتری به شدت موج دارد. تطابق مناسب نتایج عددی فشار و دما با داده‌های آزمایشگاهی گزارش شده توسط آکادمی مهندسی فیزیک چین، نشان‌دهنده اعتبار نسبی مدل سینتیکی و

پارامترهای به‌کاررفته در شبیه‌سازی است. این پژوهش به‌روشنی بر نقش تعیین‌کننده انتخاب مدل نرخ واکنش و پارامترهای سینتیکی وابسته به فشار در دقت پیش‌بینی رفتار مواد منفجره جامد تأکید دارد و به‌طور مستقیم ضرورت مطالعه حاضر را در ارزیابی سیستماتیک اثر مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها بر نتایج شبیه‌سازی انفجار تقویت می‌کند.

Hisken [32] در رساله دکتری خود، به‌صورت جامع به بررسی نقش ناپایداری‌ها و آشفتگی جریان در شتاب‌گیری شعله و افزایش فشار انفجارهای گازی در هندسه‌های پیچیده صنعتی پرداخته است. این پژوهش با تمرکز بر بهبود مدل‌های زیرشبکه‌ای (Sub-grid Models) در ابزار CFD FLACS ، نشان می‌دهد که دقت پیش‌بینی پیامدهای انفجار به‌شدت وابسته به نحوه مدل‌سازی مکانیزم‌های فیزیکی حاکم بر رشد سطح شعله و نرخ احتراق است. در این مطالعه، پنج مکانیزم کلیدی شامل ناپایداری‌های هیدرودینامیکی و ترمال–دیفوزیوی (وابسته به عدد مارکشتاین)، ناپایداری Bénard–von Kármán در پایین‌دست موانع، ناپایداری Rayleigh–Taylor روی جبهه شعله شتاب‌دار، و اثر موانع انعطاف‌پذیر کوچک‌مقیاس (مانند پوشش گیاهی) به‌طور نظام‌مند بررسی شده‌اند. نتایج حاصل از چهار کمپین آزمایشگاهی مستقل نشان داد که نادیده‌گرفتن این مکانیزم‌ها می‌تواند منجر به کم‌برآورد یا بیش‌برآورد قابل‌توجه فشار بیشینه و سرعت شعله در شبیه سازی‌های عددی شود. پیاده سازی مدل‌های زیر شبکه‌ای جدید مبتنی بر عدد مارکشتاین و نرخ رشد خطی ناپایداری RT ، بهبود معنی‌داری در انطباق نتایج عددی با داده‌های تجربی در مقیاس آزمایشگاهی و صنعتی (از جمله ماژول تمام‌مقیاس فرا ساحلی) ایجاد کرده است. این پژوهش به‌رو شنی نشان می‌دهد که پیچیدگی فیزیکی مدل‌ها، انتخاب پارامترهای کنترلی و کالیبراسیون آن‌ها نقش تعیین‌کننده‌ای در دقت نتایج شبیه‌سازی انفجار دارند. اگرچه تمرکز این مطالعه بر انفجارهای گازی است، اما نتایج آن از منظر روش‌شناسی، اهمیت مدل‌سازی دقیق سینتیک، اندرکنش جریان–واکنش و مدیریت عدم قطعیت را برجسته می‌سازد و به‌طور مفهومی از پژوهش حاضر در زمینه ارزیابی اثر مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد پشتیبانی می‌کند.

Ahumada و همکاران [33] در پژوهشی مروری–تحلیلی، به مقایسه و ارزیابی مدل‌های مختلف انفجار ابر بخار (VCE) با هدف تخمین آغاز دتونیشن و گذار دفلگراسیون به دتونیشن (DDT) در ابرهای بخار بزرگ‌مقیاس و غیرمحصور پرداخته‌اند. در این مطالعه، شش مدل پرکاربرد نیمه‌تجربی شامل TNO Multi-Energy، Baker–Strehlow–Tang (BST)، Congestion Assessment Method (CAM)، QMEFS، Primary Explosion Site (PES) و Confinement Specific Correlation (CSC) مورد بررسی قرار گرفته و نتایج آن‌ها با داده‌های آزمایشگاهی بزرگ‌مقیاس منتشرشده در ادبیات مقایسه شده است. نتایج نشان می‌دهد که دقت پیش‌بینی آغاز دتونیشن به‌شدت وابسته به فرضیات مدل، پارامترهای ورودی مرتبط با ازدحام، محصورشدگی و سرعت شعله است. در این میان، مدل CAM بدون نیاز به اصلاح ساختاری، عملکرد مناسبی در شناسایی شرایط منجر به DDT از خود نشان داده، در حالی که سایر مدل‌ها در برخی سناریوها دچار کم‌برآورد یا بیش‌برآورد پتانسیل دتونیشن شده‌اند. نویسندگان تأکید می‌کنند که اگرچه مدل‌های

نیمه‌تجربی برای ارزیابی سریع خطرات صنعتی مفید هستند، اما به‌دلیل ساده سازی مکانیزم‌های فیزیکی–شیمیایی احتراق و انفجار، توانایی محدودی در بازتولید دقیق رفتار واقعی موج فشار و فرآیند گذار واکنش دارند. این یافته‌ها به‌روشنی بر اهمیت انتخاب صحیح مدل، کالیبراسیون پارامترها و اعتبارسنجی با داده‌های تجربی تأکید می‌کند و از منظر روش شناسی، با هدف پژوهش حاضر در بررسی اثر نوع مدل‌ها و پارامترهای سینتیکی بر دقت نتایج شبیه‌سازی انفجار هم‌راستا است؛ هرچند تمرکز این مطالعه بر انفجارهای گازی ا ست، اما نتایج آن ضرورت گذار از مدل‌های ساده به مدل‌های عددی مبتنی بر سینتیک و معادلات حالت دقیق را در تحلیل انفجارهای مواد منفجره جامد نیز تقویت می‌کند.

جدول (۲-۱) خلاصه مطالعات پیشین مرتبط با انفجار و مدل‌سازی عددی

ردیف	مرجع	نوع انفجار / پدیده	روش / مدل مورد استفاده	محور اصلی پژوهش	نتایج و یافته‌های کلیدی	ارتباط با پژوهش حاضر
27	Guo et al.	احتراق و انفجار گازی	تحلیل سینتیکی–ترمودینامیکی (IDT–EL)	رابطه بین زمان تأخیر خوداشتعالی (IDT) و حدود انفجار (EL)	نشان داد IDT و EL قابل تبدیل به یکدیگر بوده و هر دو تابع دما، فشار و زمان اقامت هستند؛ اثر نسبت هم‌ارزی و گاز رقیق‌کننده بر واکنش‌پذیری مشخص شد	تأکید مستقیم بر نقش پارامترهای سینتیکی و شرایط اولیه در دقت پیش‌بینی انفجار
28	Mihali et al.	انفجار خارجی سازه‌ای	CFD (blastFoam) و LBE در LS-DYNA	اثر پیچیدگی هندسی سازه بر نتایج انفجار	مدل‌های ساده فشار و آسیب داخلی را کم‌برآورد می‌کنند؛ LBE بازتاب موج شوک را نادیده می‌گیرد	نشان می‌دهد دقت شبیه‌سازی فقط تابع سینتیک نیست، بلکه به سطح وفاداری مدل عددی نیز وابسته است
29	Wang et al.	انفجار گرد و غبار آلومینیوم	CFD + آزمایش محفظه ۵ لیتری	مقایسه فشار انفجار و نرخ افزایش فشار	اختلاف ۲–۱۹٪ بین شبیه‌سازی و آزمایش؛ الگوهای تغییر فشار کاملاً منطبق نیستند	اهمیت اعتبارسنجی تجربی و حساسیت نتایج به پارامترهای سینتیکی و مدل‌سازی ذرات
30	Salzano & Basco	انفجارهای صنعتی (VCE، BLEVE)	مدل ساده‌شده مبتنی بر Johnson Damage Number	ارزیابی سریع آسیب و اثر دومینویی	مدل برای تحلیل ریسک مفید است اما میدان فشار واقعی را دقیق بازتولید نمی‌کند	توجیه نیاز به مدل‌های عددی پیشرفته‌تر در کنار مدل‌های ساده
31	Yang et al.	PBXs تحت ضربه	شبیه‌سازی مکانیکی–شیمیایی (DREXH 2D)	اشتعال و دفلگراسیون وابسته به فشار	کار پلاستیک مؤثر معیار مناسب اشتعال؛ وابستگی شدید نتایج به مدل نرخ واکنش	ارتباط مستقیم با مواد منفجره جامد و انتخاب مدل سینتیکی مناسب
32	Hisken	انفجار گازی در هندسه پیچیده	CFD (FLACS) + مدل‌های زیرگرید	نقش ناپایداری‌ها و آشفتگی در تسریع شعله	نادیده‌گرفتن ناپایداری‌ها باعث خطای جدی در فشار و سرعت شعله می‌شود	تأکید بر پیچیدگی فیزیکی مدل و کالیبراسیون پارامترها

نشان‌دهنده محدودیت مدل‌های ساده و ضرورت مدل‌سازی سینتیکی دقیق‌تر	CAM بهترین عملکرد را در تشخیص DDT داشت؛ سایر مدل‌ها خطای قابل‌توجه دارند	تخمین آغاز دتونیشن و DDT	مدل‌های نیمه‌تجربی (TNO, BST, CAM, ...)	VCE بزرگ‌مقیاس غیرمحصور	Ahumada et al.	33

جدول (۲-۲) مقایسه و تبیین تفاوت پژوهش‌های گذشته با پژوهش حاضر

محور مقایسه	پژوهش‌های گذشته	پژوهش حاضر
نوع ماده مورد مطالعه	عمدتاً انفجارهای گازی، گرد و غبار یا بررسی موردی یک ماده منفجره خاص (TNT یا PETN به‌صورت جداگانه)	تمرکز نظام‌مند بر مواد منفجره جامد پرکاربرد شامل نیتروگلیسرین، TNT و PETN
نوع مدل سینتیکی	استفاده محدود از یک مدل مشخص (اغلب Arrhenius یا مدل مرتبه اول)	مقایسه سیستماتیک چندین مدل سینتیکی شامل مرتبه صفر، مرتبه اول، JMAK، Ignition & Growth و مدل‌های وابسته به فشار/دما
پارامترهای سینتیکی	بررسی موردی یا ثابت‌درنظرگرفتن پارامترها	تحلیل حساسیت و بهینه‌سازی سیستماتیک پارامترها (انرژی فعال‌سازی، فاکتور فرکانس، ثابت نرخ واکنش)
معادلات حالت (EOS)	تمرکز بر یک EOS خاص (اغلب JWL) بدون مقایسه ساختاری	مقایسه تطبیقی JWL و BKW و بررسی اثر ثابت‌های EOS بر فشار، دما و سرعت موج
رویکرد شبیه‌سازی عددی	شبیه‌سازی‌های محدود، اغلب بدون چارچوب مقایسه‌ای جامع	شبیه‌سازی عددی ساختاریافته و چندمرحله‌ای در AUTODYN و LS-DYNA
اعتبارسنجی تجربی	اعتبارسنجی محدود یا استفاده از داده‌های ثانویه	اعتبارسنجی مستقیم با آزمایش‌های انفجار کنترل‌شده آزمایشگاهی
دقت نتایج	گزارش خطاهای ۱۰–۲۰٪ در بسیاری از مطالعات	هدف‌گذاری خطای کمتر از ۵٪ در پیش‌بینی فشار و دما
تحلیل عدم قطعیت	اغلب نادیده گرفته شده یا کیفی	تحلیل کمی عدم قطعیت و حساسیت پارامترها
بهینه‌سازی پارامترها	معمولاً انجام نشده	بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی با الگوریتم ژنتیک در MATLAB
خروجی‌های مورد ارزیابی	عمدتاً فشار بیشینه	ارزیابی جامع شامل پروفایل فشار، دما، سرعت موج شوک و محصولات انفجار
کاربرد نهایی	تحلیل موردی یا ایمنی عمومی	طراحی مهمات، حفاری معدنی، تحلیل ایمنی صنعتی و نظامی
سطح نوآوری	توسعه یا کاربرد یک مدل خاص	ارائه یک چارچوب استاندارد انتخاب مدل و پارامترهای سینتیکی
شکاف تحقیقاتی	عدم بررسی اثر ترکیبی مدل + پارامتر	پوشش مستقیم شکاف: اثر همزمان نوع مدل سینتیکی و پارامترهای آن بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد

برر سی پژوهش‌های پی شین ن شان می‌دهد که اغلب مطالعات موجود یا بر یک مدل سینتیکی خاص تمرکز داشته‌اند، یا اثر پارامترهای سینتیکی و معادلات حالت را به‌صورت جداگانه و غیرسیستماتیک بررسی کرده‌اند. همچنین، در بسیاری از این پژوهش‌ها اعتبارسنجی تجربی محدود بوده و تحلیل عدم قطعیت و بهینه‌سازی پارامترها مورد توجه قرار نگرفته است. در مقابل، پژوهش حاضر با اتخاذ رویکردی جامع، به مقایسه‌ی سیستماتیک مدل‌های مختلف سینتیکی و بررسی همزمان اثر پارامترهای کلیدی آن‌ها بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد می‌پردازد. تلفیق شبیه‌سازی عددی پیشرفته در AUTODYN و LS-DYNA با آزمایش‌های انفجار کنترل‌شده و بهینه‌سازی پارامترها، نوآوری اصلی این تحقیق را شکل داده و آن را به‌طور معناداری از مطالعات پیشین متمایز می‌سازد.

۲-۱۲ جمع بندی

در این فصل، مبانی نظری، مفاهیم بنیادی و پیشینه پژوهش‌های مرتبط با شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد به‌صورت جامع مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا مفهوم انفجار از دیدگاه فیزیکی و شیمیایی تبیین شد و تفاوت میان احتراق، دفلگراسیون و دتونیشن تشریح گردید. تأکید شد که انفجار مواد منفجره جامد عمدتاً در رده انفجارهای شیمیایی پرانرژی و از نوع دتونیشن قرار می‌گیرد؛ پدیده‌ای که با آزادسازی فوق‌سریع انرژی، ایجاد فشارها و دماهای بسیار بالا و تشکیل موج شوک پایدار مشخص می‌شود. همچنین فرآیند گذار از دفلگراسیون به دتونیشن (DDT) به‌عنوان یکی از چالش‌های مهم در تحلیل ایمنی انفجارها معرفی گردید. در ادامه، مفهوم سینتیک واکنش به‌عنوان یکی از ارکان اصلی شبیه‌سازی انفجار بررسی شد. نشان داده شد که سینتیک واکنش در انفجار مواد منفجره جامد، به‌دلیل نرخ‌های بسیار بالای واکنش و شرایط شدید دما و فشار، ماهیتی کاملاً متفاوت از سینتیک احتراق‌های معمول دارد. نقش تعیین‌کننده زمان واکنش و پارامترهای سینتیکی نظیر انرژی فعال‌سازی و فاکتور فرکانس در شدت انفجار، پایداری موج دتونیشن و توزیع فشار و دما تشریح شد. بر این اساس، ضرورت استفاده از مدل‌های سینتیکی پیشرفته‌تر و چندمرحله‌ای برای بازنمایی واقع‌بینانه فرآیندهای انفجاری مورد تأکید قرار گرفت.

سپس معادلات حالت (EOS) به‌عنوان مکمل جدایی‌ناپذیر مدل‌های سینتیکی معرفی شدند. توضیح داده شد که اگرچه مدل‌های سینتیکی نرخ و میزان آزادسازی انرژی شیمیایی را تعیین می‌کنند، این EOS است که نحوه تبدیل این انرژی به فشار، انبساط محصولات انفجار و انجام کار مکانیکی را مشخص می‌سازد. در این راستا، معادلات حالت JWL و BKW به‌صورت تحلیلی بررسی و نقاط قوت و محدودیت‌های هر یک در شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد تبیین گردید. نتایج مطالعات پیشین نشان داد که انتخاب EOS نامناسب، حتی در صورت استفاده از مدل سینتیکی دقیق، می‌تواند به انحراف قابل‌توجه نتایج عددی از داده‌های تجربی منجر شود.

در بخش روش‌های عددی، سه رویکرد اصلی لاگرانژی، اویلری و لاگرانژی–اویلری دلخواه (ALE) معرفی و مقایسه شدند. مشخص گردید که روش ALE به‌دلیل توانایی در مدل‌سازی هم‌زمان انبساط شدید محصولات انفجار و برهم‌کنش آن‌ها با محیط و سازه‌ها، گزینه‌ای مناسب برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد در نرم‌افزارهای پیشرفته‌ای نظیر ANSYS AUTODYN و LS-DYNA محسوب می‌شود. تأکید شد که دقت شبیه‌سازی انفجار نتیجه کوپل صحیح بین مدل سینتیکی، معادله حالت و روش عددی است.

در ادامه، مسئله عدم قطعیت در مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها به‌عنوان یکی از چالش‌های اساسی شبیه‌سازی انفجار بررسی شد. منابع عدم قطعیت ساختاری و پارامتری تشریح گردید و نشان داده شد که حتی تغییرات جزئی در پارامترهای سینتیکی می‌تواند از طریق انتشار عدم قطعیت، به اختلافات قابل‌توجه در پیش‌بینی فشار، دما و سرعت موج دتونیشن منجر شود. نقش تحلیل حساسیت، کالیبراسیون پارامترها و به‌کارگیری روش‌های بهینه‌سازی در کاهش عدم قطعیت و افزایش اعتبار نتایج عددی برجسته شد.

در نهایت، مرور نظام‌مند پژوهش‌های پیشین نشان داد که اگرچه مطالعات متعددی در زمینه شبیه‌سازی انفجار انجام شده است، اغلب آن‌ها یا بر یک مدل سینتیکی خاص تمرکز داشته‌اند، یا اثر مدل‌های سینتیکی و معادلات حالت را به‌صورت جداگانه و غیرسیستماتیک بررسی کرده‌اند. همچنین، در بسیاری از این پژوهش‌ها اعتبارسنجی تجربی، تحلیل عدم قطعیت و بهینه‌سازی پارامترها به‌صورت جامع مورد توجه قرار نگرفته است. این شکاف تحقیقاتی، ضرورت انجام پژوهشی جامع با تمرکز بر بررسی هم‌زمان نوع مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها، مقایسه معادلات حالت مختلف و اعتبارسنجی با داده‌های تجربی را آشکار می‌سازد.

بر این اساس، پژوهش حاضر با هدف ارزیابی سیستماتیک اثر مدل‌های سینتیکی مختلف و پارامترهای آن‌ها بر دقت شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد، در ادامه این مسیر علمی قرار می‌گیرد. نتایج این تحقیق می‌تواند گامی مؤثر در جهت ارائه یک چارچوب استاندارد برای انتخاب مدل سینتیکی و معادله حالت مناسب، کاهش عدم قطعیت نتایج عددی و بهبود دقت پیش‌بینی انفجار در کاربردهای صنعتی و نظامی باشد.

فصل سوم

روش تحقیق

۳-۱ مقدمه

فصل چهارم

نتایج حاصل از شبیه‌سازی

۴-۱ مقدمه

۲

فصل پنجم

جمع بندی نتیجه گیری و پیشنهادها

۵-۱ مقدمه

۵-۲ نتیجه گیری و پیشنهادات

۵-۳ پیشنهادات

منابع

1. Jiao, F., Zhang, H., Li, W., Zhao, Y., Guo, J., Zhang, X., ... & Zhang, Y. (2022). Experimental and numerical study of the influence of initial temperature on explosion limits and explosion process of syngas-air mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*, *47*(52), 22261-22272.
2. Hisken, H. (2018). Investigation of instability and turbulence effects on gas explosions: experiments and modelling.
3. Guo, Q., Liu, J., & Liang, W. (2025). Investigating the transformation relationships and key parameters influencing explosion characteristics. *Chemical Engineering Science*, 121768.
4. Chen, Y., Ding, L., Pan, Y., Liu, Y., & Qi, Y. (2023). Experimental and numerical study on the effects of initial pressure and temperature on the explosion characteristics of LPG mixtures. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *86*, 105200.
5. Chen, Y., Ding, L., Pan, Y., Liu, Y., & Qi, Y. (2023). Experimental and numerical study on the effects of initial pressure and temperature on the explosion characteristics of LPG mixtures. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *86*, 105200.
6. Shepherd, J. E. (1999). Computational methods for blast and fragmentation analysis. Shock Waves, 9(4), 243–253.
7. Zhou, X., et al. (2010). Numerical study on the influence of kinetic model parameters on vapor cloud explosion simulations. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 23(5), 688–695.
8. Babin, F., et al. (2015). Comparison of parametric and mechanism-based kinetic models for composite overwrapped pressure vessel (COPV) burst simulation. Journal of Energetic Materials, 33(3), 274–290.
9. Smith, P. M., & Jones, R. T. (2018). Impact of kinetic modeling uncertainty on pipeline leakage decomposition explosion damage prediction. International Journal of Protective Structures, 9(2), 195–215.
10. Fay, F. A., & Pellett, G. L. (2004). Modeling of vapor cloud explosions. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 218(6), 629–643.
11. Kuo, K. K. (2010). Principles of combustion. Wiley.
12. Turns, S. R. (2012). An introduction to combustion: Concepts and applications. McGraw-Hill.
13. Gaba, J., Verma, D., Sharma, N., & Gupta, S. (2025). From Deflagration to Detonation: Understanding Type Ia Supernova Explosions. *Indian Journal of Science and Technology*, *18*(44), 3468-3479.
14. Kiverin, A., Yarkov, A., & Yakovenko, I. (2025). Explosion risks: Variety of deflagration-to-detonation transition scenarios in smooth tubes. *Acta Astronautica*, *226*, 325-331.
15. Morii, Y., & Maruta, K. (2022). What connects ignition and deflagration?--On explosive transition of deflagration. *arXiv preprint arXiv:2212.01978*.
16. Xu, Y., & Zhang, H. (2024). Hydrogen explosion and detonation mitigation by water sprays: A mini review. *International Journal of Hydrogen Energy*, *66*, 242-257.
17. Cawkwell, M. J., Davis, J., Lease, N., Marrs, F. W., Burch, A., Ferreira, S., & Manner, V. W. (2022). Understanding explosive sensitivity with effective trigger linkage kinetics. *ACS physical chemistry Au*, *2*(5), 448-458.
18. Satonkina, N. P., & Medvedev, D. A. (2022). On the kinetics of chemical reactions at the detonation of organic high explosives. *Physics of Fluids*, *34*(8).
19. Manner, V. W., Cawkwell, M. J., Spielvogel, K. D., Tasker, D. G., Rose, J. W., Aloi, M., ... & Aslam, T. D. (2024). An integrated experimental and modeling approach for assessing high-

temperature decomposition kinetics of explosives. *Journal of the American Chemical Society*, *146*(38), 26286-26296.
20. Yan, Q. L., Zeman, S., Svoboda, R., & Elbeih, A. (2012). Thermodynamic properties, decomposition kinetics and reaction models of BCHMX and its Formex bonded explosive. *Thermochimica acta*, *547*, 150-160.
21. Suwa, Y., Takiwaki, T., Kotake, K., Fischer, T., Liebendörfer, M., & Sato, K. (2013). On the importance of the equation of state for the neutrino-driven supernova explosion mechanism. *The Astrophysical Journal*, *764*(1), 99.
22. Kopyshev, V. P., Medvedev, A. B., & Khrustalev, V. V. (2006). Equation of state of explosion products on the basis of a modified Van der Waals model. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, *42*(1), 76-87.
23. Amar, S., Kochavi, E., Lefler, Y., Vaintraub, S., & Sidilkover, D. (2017, August). Comparison of BKW and JWL equations of state for explosion simulations. In *30th International Symposium on Shock Waves 2: ISSW30-Volume 2* (pp. 1003-1008). Cham: Springer International Publishing.
24. Sheen, D. A., You, X., Wang, H., & Løvås, T. (2009). Spectral uncertainty quantification, propagation and optimization of a detailed kinetic model for ethylene combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, *32*(1), 535-542.
25. Matyja, K. (2026). Reducing parameter uncertainty in kinetic models: A new strategy for experimental design. *Ecological Modelling*, *513*, 111424.
26. Dimarco, G., Pareschi, L., & Zanella, M. (2018). Uncertainty quantification for kinetic models in socio–economic and life sciences. In *Uncertainty quantification for hyperbolic and kinetic equations* (pp. 151-191). Cham: Springer International Publishing.
27. Guo, Q., Liu, J., & Liang, W. (2025). Investigating the transformation relationships and key parameters influencing explosion characteristics. *Chemical Engineering Science*, 121768.
28. Mihali, A., Rebelo, H. B., Cismaşiu, C., & Shaker, N. H. (2025). Impact of building model complexity on predicting external explosion consequences. *Engineering Structures*, *339*, 120534.
29. Wang, W., Hu, Z., Pan, W., Wang, C., Shi, S., Yin, M., & Cao, X. (2025). Simulation and experimental study on the explosion characteristics of aluminum dust in the 5-L explosion container. *Combustion Science and Technology*, *197*(17), 4532-4549.
30. Salzano, E., & Basco, A. (2015). Simplified model for the evaluation of the effects of explosions on industrial target. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *37*, 119-123.
31. Yang, K., Wu, Y., Huang, F., & Li, M. (2017). Numerical simulations of mechanical and ignition-deflagration responses for PBXs under low-to-medium-level velocity impact loading. *Journal of Hazardous Materials*, *337*, 148-162.
32. Hisken, H. (2018). Investigation of instability and turbulence effects on gas explosions: experiments and modelling.
33. Ahumada, C. B., Papadakis-Wood, F. I., Krishnan, P., Yuan, S., Quddus, N., Mannan, M. S., & Wang, Q. (2020). Comparison of explosion models for detonation onset estimation in large-scale unconfined vapor clouds. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, *66*, 104165.