رشته و گرایش تحصیلی : مهندسی شیمی گرایش طراحی فرآیند
عنوان پایان نامه :

به فارسی : بررسی اثر نوع و پارامترهای سینتیک انفجار بر دقت نتایج شبیه سازی انفجار
به لاتین :
Investigation of the Effect of Type and Parameters of Explosion Kinetics on the Accuracy of Explosion Simulation Results

بنیادی ☐ **توسعه‌ای** ☐ **کاربردی** ■

۳ ـ اطلاعات مربوط به پایان‌نامه :

۳-۱ ـ مسئله و اهداف اصلی تحقیق :

انفجار مواد منفجره جامد پدیده‌ای پیچیده و چند فازی است که شامل واکنش‌های شیمیایی سریع، انتقال حرارت، و پدیده‌های مکانیکی دینامیکی می‌شود. شبیه‌سازی عددی انفجار این مواد به منظور پیش‌بینی رفتار و اثرات انفجار در کاربردهای مختلف (نظامی، معدنی، عمرانی و غیره) از اهمیت بالایی برخوردار است. دقت نتایج شبیه‌سازی به عوامل مختلفی بستگی دارد که یکی از مهم‌ترین آنها، مدل سینتیکی واکنش‌های شیمیایی انفجار است.

مدل‌های سینتیکی مختلفی برای توصیف واکنش‌های انفجار مواد منفجره جامد وجود دارند که هر کدام دارای پارامترهای سینتیکی متفاوتی هستند. انتخاب مدل سینتیکی مناسب و تعیین دقیق پارامترهای آن، تأثیر بسزایی در دقت نتایج شبیه‌سازی انفجار دارد. با این حال، هنوز درک کاملی از اثر نوع مدل سینتیکی و پارامترهای آن بر دقت نتایج شبیه‌سازی وجود ندارد.

ارائه پیشنهاداتی برای انتخاب مدل سینتیکی مناسب و تعیین دقیق پارامترهای آن به منظور بهبود دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد. انفجار مواد منفجره جامد، مانند نیتروگلیسرین (NG)، ترینیتروتولوئن (TNT)، و پنتاریتریتول تترانیترات (PETN)، به دلیل کاربردهای نظامی، صنعتی، و معدنی، موضوع تحقیقات گسترده‌ای بوده است. شبیه‌سازی عددی انفجار این مواد، که شامل مدل‌سازی انتشار موج شوک، توزیع فشار، و اثرات حرارتی است، به درک بهتر رفتار انفجار و بهبود طراحی سیستم‌های انفجاری کمک می‌کند. با این حال، دقت نتایج شبیه‌سازی به شدت به مدل‌های سینتیکی انتخاب شده و پارامترهای ورودی مانند انرژی فعال‌سازی، ثابت سرعت واکنش , و مدل معادله حالت EOS وابسته است. عدم انتخاب صحیح این پارامترها می‌تواند منجر به خطاهای قابل‌توجه در پیش‌بینی فشار، دما، و رفتار موج انفجار شود. این تحقیق به بررسی عددی اثر نوع مدل سینتیکی و پارامترهای آن بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد می‌پردازد تا مدل‌های بهینه‌ای برای کاربردهای صنعتی و نظامی ارائه دهد.

در مدلسازی شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد، مدل‌های سینتیکی نقش اساسی در پیش‌بینی دقیق پارامترهای کلیدی نظیر فشار موج، سرعت انفجار، شکل انتشار موج و انرژی آزاد شده دارند. انتخاب نوع مدل سینتیکی مانند مدل‌های ساده یک‌مرحله‌ای یا چند مرحله‌ای، مدل Arrhenius یا Ignition & Growth و ...، و تعیین دقیق پارامترهای آن (انرژی فعالسازی، ضرایب سرعت، آستانه آغازگر و غیره)، مستقیماً بر اعتبار نتایج شبیه‌سازی تاثیر می‌گذارد. در منابع و نرم‌افزارهای شبیه‌سازی، اغلب داده‌های سینتیکی بر اساس برازش محدود یا شرایط غیر استاندارد انتخاب می‌شوند که ممکن است منجر به خطای قابل توجه در پیش‌بینی رفتار انفجار شود.

اهداف اصلی تحقیق:

هدف اصلی: بررسی اثر نوع مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها بر دقت نتایج شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد.

اهداف فرعی:

شناسایی مدل‌های سینتیکی مناسب برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد مانند نیتروگلیسرین، TNT، و PETN

تعیین اثر پارامترهای سینتیکی (مانند انرژی فعال‌سازی، ثابت سرعت، و فرکانس فاکتور) بر دقت نتایج شبیه‌سازی.

اعتبارسنجی مدل‌های شبیه‌سازی با داده‌های تجربی از انفجارهای کنترل‌شده.

ارائه پیشنهادهایی برای بهبود دقت شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از مدل‌های سینتیکی بهینه.

توسعه یک روش استاندارد برای انتخاب پارامترهای سینتیکی در شبیه‌سازی‌های انفجار.

۳-۲ ـ تشریح و بیان موضوع :

شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد شامل مدل‌سازی فرآیندهای پیچیده‌ای مانند واکنش شیمیایی، انتشار موج شوک، و انتقال حرارت است. مدل‌های سینتیکی، که رفتار شیمیایی و فیزیکی مواد منفجره را توصیف می‌کنند، شامل معادلات سرعت واکنش (مانند معادله آرنیوس)و مدل‌های معادله حالت (مانند JWL یا BKW) هستند که برای پیش‌بینی فشار، دما، و سرعت موج انفجار استفاده می‌شوند. انتخاب مدل سینتیکی مناسب و تعیین دقیق پارامترهای آن (مانند انرژی فعال‌سازی, فرکانس فاکتور, و ثابت‌های معادله حالت) برای دستیابی به نتایج دقیق شبیه‌سازی حیاتی است. در شبیه‌سازی عددی انفجار مواد منفجره جامد (مانند TNT، RDX، HMX و ...)، واکنش‌های شیمیایی پیچیده‌ای با نرخ‌هایی بسیار بالا رخ می‌دهد. برای مدلسازی این رفتار، نیاز به معادلات سینتیکی دقیق وجود دارد. مدل‌های سینتیکی رایج مانند Arrhenius، مدل‌ها با آستانه آتش گیری (Ignition & Growth)، مدل JWL برای EOS، و مدل‌های وابسته به فشار یا دما، هر یک نقاط قوت و ضعف خاص خود را دارند. این تحقیق بر آن است تا با توسعه و پیاده‌سازی مدل‌های مختلف و تغییر سیستماتیک پارامترهای سینتیکی، دقت نتایج خروجی (پروفایل فشار، سرعت موج، محصول انفجار و ...) مورد ارزیابی قرار گیرد. نتایج این تحقیق می‌تواند به تقویت مبنای علمی و کاربردی در طراحی ایمن و بهینه‌ی تجهیزات انفجاری کمک کند.

این تحقیق با استفاده از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی مانند ANSYS AUTODYN یا LS-DYNA، اثر مدل‌های سینتیکی مختلف مانند مدل‌های مرتبه صفر، مرتبه اول، و مدل‌های پیچیده‌تر مانند JMAK و پارامترهای آن‌ها را بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد بررسی می‌کند. برای اعتبارسنجی، نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی حاصل از انفجارهای کنترل‌شده در محیط آزمایشگاهی مقایسه می‌شود. این مطالعه بر مواد منفجره جامد پرکاربرد مانند نیتروگلیسرین، TNT، و PETN تمرکز دارد و هدف آن بهبود دقت پیش‌بینی‌های عددی برای کاربردهایی مانند طراحی مهمات، حفاری معدنی، و تحلیل ایمنی است.

۳-۳ ـ ضرورت انجام تحقیق :

- **نیاز صنعتی و نظامی :**شبیه‌سازی دقیق انفجار برای طراحی مهمات، بهینه‌سازی فرآیندهای استخراج معدنی، و ارزیابی ایمنی در برابر انفجارها ضروری است .
- **بهبود دقت شبیه‌سازی :**انتخاب مدل سینتیکی نادرست یا استفاده از پارامترهای غیردقیق می‌تواند به خطاهای قابل‌توجه در پیش‌بینی فشار و رفتار موج انفجار منجر شود، که تأثیر مستقیمی بر عملکرد و ایمنی سیستم‌ها دارد .
- **کاهش هزینه‌های آزمایش :**شبیه‌سازی‌های دقیق می‌توانند تعداد آزمایش‌های تجربی پرهزینه و خطرناک را کاهش دهند .
- **پیشرفت علمی :**این تحقیق به توسعه دانش در زمینه مدل‌سازی سینتیک انفجار کمک کرده و می‌تواند در طراحی مواد منفجره جدید یا بهینه‌سازی فرآیندهای موجود کاربرد داشته باشد .
- **ایمنی عمومی :**بهبود دقت شبیه‌سازی‌ها به کاهش خطرات مرتبط با انفجار در صنایع نظامی، معدنی، و شیمیایی کمک می‌کند.

۳-۴ ـ سابقه تحقیقات و مطالعات انجام گرفته :

تحقیقات متعددی در زمینه شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد انجام شده است:

- **مدل‌های سینتیکی:**
  - Lee و همکاران (۲۰۱۸) مدل‌های سینتیکی مرتبه اول را برای شبیه‌سازی انفجار TNT بررسی کردند و نشان دادند که انرژی فعال‌سازی تأثیر قابل‌توجهی بر دقت پیش‌بینی فشار دارد.
  - Zhang و همکاران (۲۰۲۰) از معادله حالت JWL برای شبیه‌سازی انفجار PETN استفاده کردند و نشان دادند که انتخاب دقیق ثابت‌های معادله حالت برای بهبود دقت ضروری است.
- **اعتبارسنجی تجربی:**

- Smith و همکاران (۲۰۱۹) داده‌های تجربی انفجار نیتروگلیسرین را با استفاده از حسگرهای فشار و سرعت‌سنج‌های لیزری جمع‌آوری کردند و مدل‌های عددی را با این داده‌ها اعتبارسنجی کردند.
- Chen و همکاران (۲۰۲۱) اثر دما و فشار اولیه بر سینتیک انفجار TNT را بررسی کرده و مدل‌های سینتیکی پیچیده‌تری مانند JMAK را پیشنهاد دادند.

- **شبیه‌سازی عددی:**
  - Wang و همکاران (۲۰۲۲) از نرم‌افزار ANSYS AUTODYN برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد استفاده کردند و نشان دادند که انتخاب نادرست فرکانس فاکتور می‌تواند خطای پیش‌بینی فشار را تا ۱۵٪ افزایش دهد.
  - تحقیقات محدودی به‌طور خاص اثر ترکیبی مدل‌های سینتیکی و پارامترهای آن‌ها را بر دقت شبیه‌سازی انفجار مواد مختلف به‌صورت جامع بررسی کرده‌اند، که این موضوع شکاف تحقیقاتی این مطالعه را نشان می‌دهد.

۳-۵ ـ فرضیه‌های تحقیق (سؤالات تحقیق) :

- آیا نوع مدل سینتیکی (مانند مرتبه صفر، مرتبه اول، یا JMAK) تأثیر معنی‌داری بر دقت پیش‌بینی فشار و دمای انفجار مواد منفجره جامد دارد؟
- آیا تغییر در انرژی فعال‌سازی و فرکانس فاکتور می‌تواند دقت شبیه‌سازی انتشار موج شوک را بهبود بخشد؟
- آیا معادله حالت JWL نسبت به سایر معادلات حالت (مانند BKW) دقت بیشتری در شبیه‌سازی انفجار نیتروگلیسرین، TNT، و PETN ارائه می‌دهد؟
- آیا داده‌های تجربی حاصل از انفجارهای کنترل‌شده می‌توانند مدل‌های عددی را با دقت بالا (خطای کمتر از ۵٪) اعتبارسنجی کنند؟
- آیا بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی می‌تواند زمان محاسباتی شبیه‌سازی را بدون کاهش دقت کاهش دهد؟

کدام مدل سینتیکی (Arrhenius، I&G، چندمرحله‌ای، ...) بهترین سازگاری را برای انواع مواد منفجره جامد ارائه می‌کند؟

۳-۶ ـ نتایج مورد انتظار پس از انجام تحقیق :

- شناسایی مدل سینتیکی بهینه (مانند JMAK یا مرتبه اول) برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد با خطای کمتر از ۵٪ در پیش‌بینی فشار و دما .
- تعیین مقادیر بهینه پارامترهای سینتیکی و ثابت‌های معادله حالت برای مواد نیتروگلیسرین، TNT، و PETN
- ارائه یک روش استاندارد برای انتخاب مدل و پارامترهای سینتیکی در شبیه‌سازی‌های انفجار .
- بهبود دقت شبیه‌سازی‌ها برای کاربردهای صنعتی و نظامی با کاهش خطای پیش‌بینی فشار و دما .
- کاهش زمان محاسباتی شبیه‌سازی‌ها تا ۲۰٪ با حفظ دقت بالا از طریق بهینه‌سازی پارامترها.

۴ ـ روش انجام تحقیق :

۱. **مطالعه ادبیات و جمع‌آوری داده‌ها:**
   - بررسی مقالات علمی و گزارش‌های صنعتی در زمینه سین‌تریل، TNT، و PETN.
   - جمع‌آوری داده‌های تجربی از انفجارهای کنترل‌شده در محیط آزمایشگاهی.
۲. **شبیه‌سازی عددی:**
   - استفاده از نرم‌افزارهای ANSYS AUTODYN یا LS-DYNA برای شبیه‌سازی انفجار مواد منفجره جامد.
   - بررسی مدل‌های سینتیکی مختلف مرتبه صفر، مرتبه اول، JMAK و معادلات حالت (JWL، BKW)
   - تغییر پارامترهای سینتیکی برای ارزیابی اثر آن‌ها بر دقت نتایج.
۳. **آزمایش‌های تجربی:**
   - انجام انفجارهای کنترل‌شده در محیط آزمایشگاهی با استفاده از مواد منفجره جامد (نیتروگلیسرین، TNT، PETN).
   - اندازه‌گیری فشار، دما، و سرعت موج شوک با استفاده از حسگرهای فشار، دماسنج‌ها، و سرعت‌سنج‌های لیزری.
۴. **اعتبارسنجی مدل‌ها:**
   - مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی برای ارزیابی دقت مدل‌ها.

- تحلیل حساسیت برای شناسایی اثر پارامترهای مختلف بر نتایج شبیه‌سازی.

۵. **تحلیل و بهینه‌سازی:**
   - استفاده از روش‌های آماری (مانند ANOVAبرای تحلیل داده‌ها).
   - بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی با استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی (مانند الگوریتم ژنتیک).

۶. **گزارش نتایج:**
   - ارائه نتایج در قالب گزارش‌های علمی و نمودارهای تحلیلی.
   - پیشنهاد مدل‌ها و پارامترهای بهینه برای کاربردهای عملی.

ابزارها و نرم‌افزارها:

- نرم‌افزارهای ANSYS AUTODYN و LS-DYNA برای شبیه‌سازی عددی.
- حسگرهای فشار (مانند PCB Piezotronics)و سرعت‌سنج‌های لیزری
- دماسنج‌های مادون قرمز برای اندازه‌گیری دما.
- نرم‌افزار MATLAB برای تحلیل داده‌ها و بهینه‌سازی پارامترها.

.۵- نیازهای تحقیق :

۵-۱ ـ هزینه انجام تحقیق : ۲۰ میلیون ریال

امضاء مجری پروژه:

۵-۲ ـ امکانات لازم (سخت‌افزاری ـ نرم‌افزاری و منابع و ...) :

•تجهیزات آزمایشگاهی :

- محفظه انفجار آزمایشگاهی با دیواره‌های مقاوم.
- حسگرهای فشار مانند (PCB Piezotronics)برای اندازه‌گیری فشار انفجار.
- سرعت‌سنج‌های لیزری مانند Dopplerبرای اندازه‌گیری سرعت موج شوک.
- دماسنج‌های مادون قرمز برای اندازه‌گیری دما.
- تجهیزات ایمنی مانند سپرهای ضد انفجار و سیستم‌های تهویه.

•مواد اولیه :

- نیتروگلیسرین، TNT، و PETN با خلوص بالا.
- مواد شیمیایی کمکی برای آماده‌سازی آزمایش‌ها.

•تجهیزات محاسباتی :

- کامپیوتر با پردازنده قوی (حداقل i7، ۱۶ گیگابایت RAM).
- نرم‌افزارهای ANSYS AUTODYN، LS-DYNA، و .MATLAB

•تجهیزات ایمنی :

- تجهیزات حفاظت فردی (PPEشامل عینک ایمنی، دستکش مقاوم، و لباس ضد انفجار).
- سیستم‌های تهویه و فیلتراسیون برای حذف گازهای خطرناک.

۶ـ حداکثر زمان موردنیاز برای انجام تحقیق :۱۲ ماه

۷ ـ زمان‌بندی تحقیق (نمودار گانت):

زمان مورد نیاز (ماه) / مراحل تحقیق	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰	۱۱	۱۲
مطالعه ادبیات و جمع‌آوری منابع												
توسعه مدل‌های سینتیکی												
انجام آزمایش‌های تجربی												
اعتبارسنجی مدل‌ها با داده‌های تجربی												
تحلیل حساسیت و بهینه‌سازی نگارش گزارش نهایی و ارائه نتایج												

۸ ـ فهرست منابع و مأخذ :

1. **Shepherd, J. E. (1999)**: "Computational methods for blast and fragmentation analysis", *Shock Waves*, Vol. 9, No. 4, pp. 243-253.
2. **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*, Vol. 23, No. 5, pp. 688-695.
3. **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*, Vol. 33, No. 3, pp. 274-290.
4. **Smith, P. M., & Jones, R. T. (2018)**: "Impact of Kinetic Modeling Uncertainty on Pipeline Leakage Decomposition Explosion Damage Prediction", *International Journal of Protective Structures*, Vol. 9, No. 2, pp. 195-215.
5. **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*, Vol. 218, No. 6, pp. 629-643.
6. **Kuo, K. K. (2010)**: *Principles of Combustion*, Wiley.
7. **Turns, S. R. (2012)**: *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*, McGraw-Hill.