بسم الله الرحمن الرحيم

بسمه تعالی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه

آقای علیرضا علی پور پایان نامه ٦ واحدی خود را **با عنوان بهینه سازی خواص تراک CJ برای مخلوطهای گازی و مواد پرانرژی** در تاریخ ۱۳۸۹/٦/۳۱ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک - تبدیل انرژی پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنما	دکتر کیومرث مظاهری	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر مهدی معرفت	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر محمدرضا انصاری	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر سعید برجی	استادیار	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر مهدی معرفت	دانشیار	

این نسخه به عنوان نسخه نهایی پایان نامه/رساله مورد تأیید است.

امضای استاد راهنما:

۸۹/۱۲/٤

دستورالعمل حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیات علمی، دانشجویان، دانش آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی که با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد ذیل را رعایت نمایند:

ماده ۱- حقوق مادی و معنوی پایان نامه‌ها / رساله‌های مصوب دانشگاه متعلق به دانشگاه است و هرگونه بهره‌برداری از آن باید با ذکر نام دانشگاه و رعایت آیین‌نامه‌ها و دستورالعمل‌های مصوب دانشگاه باشد.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و استاد راهنما مسئول مکاتبات مقاله باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب حاصل از نتایج پایان نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با مجوز کتبی صادره از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین نامه های مصوب انجام می‌شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این دستورالعمل در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ۱۳۸۴/۴/۲۵ در شورای پژوهشی دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب لازم الاجرا است و هرگونه تخلف از مفاد این دستورالعمل، از طریق مراجع قانونی قابل پیگیری می شود.

نام و نام خانوادگی: **علیرضا علی پور**

امضاء

آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین‌بخشی از فعالیت‌های علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/رساله دکتری نگارنده دررشته**مهندسی مکانیک** است که در سال**۱۳۸۹**در دانشکده**فنی و مهندسی**دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب‌آقای**دکتر کیومرث مظاهری**از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده رابه عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می‌کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواندخسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظوراستیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتاب‌های عرضه شده‌نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب**علیرضا علی پور**دانشجوی رشته**مهندسی مکانیک** مقطع**کارشناسی ارشد**تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی:**علیرضا علی پور**

تاریخ و امضا:

دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده فنی و مهندسی

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- تبدیل انرژی

بهینه سازی خواص تراکCJبرای مخلوط‌های گازی و ترکیبات پرانرژی

علیرضا علی پور

استاد راهنما

دکتر کیومرث مظاهری

شهریور ۱۳۸۹

تقدیم به

آنهاکه بهترینند

تقدیر و تشکر:

سپاس و ستایش معبود یگانه را که پرتو الطاف بی شمارش در تمامی لحظات زندگیم ساطع و آشکار است؛ حمد و ثنا می گذارم او را که فکرت و اندیشه را در بستر روحم روان ساخت و بهره گیری از خوان گسترده‌ی دانش را روزیم گردانید.

امتنان و سپاس می گذارم تلاش‌ها، زحمت‌ها و راهنمایی‌های ظریف، ارزشمند و بی شائبه‌ی استاد فرزانه و گرانمایه‌ام، **جناب آقای دکتر کیومرث مظاهری** را که با همیت و جدیت مرا به دقت، اندیشه، درک و تعمق وا می‌داشتند.

از یکایک اعضای خانواده‌ام،که حضور آنها همواره برایم سبب آرامش است، صمیمانه تشکر کرده و دست مهربان آنها را به گرمی می فشارم.

از تمامی دوستانی که در این دوره از زندگیم با دلهای خود مرا یاری کردند، کمال تشکر را دارم.

چکیده:

هدف از این پژوهش یافتن موادی است که بتوانند خواص بهینه را برای تراک ایجاد کنند. برای مدلسازی تراک از تئوری CJ استفاده شده است.پارامترهای تراک به عنوان تابع هدف و اجزا ترکیب به عنوان متغیرهای تابع هدف در فرایند بهینه سازی تعریف شدند. استفاده از یک الگوریتم مناسب بهینه سازی، امکان یافتن ترکیبات جدید با خواص بهینه را ایجاد نمود.

این کار در دوبخش مخلوط‌های گازی و مواد پرانرژی انجام گرفته است. در مخلوط‌های گازی، خواص بهینه و نسبت هم ارزی متناسب با آنها یافت شدو با استفاده از کد معتبر CEA از صحت نتایج اطمینان حاصل شد. در مواد پرانرژی، خواص بهینه و درصد اجزا در ترکیب تعیین و با استفاده از کد CHEETAHاعتبار سنجی شده است.

این کار از دو جهت قابل بررسی می باشد، در مرحله اول می توان ترکیبات صنعتی را بررسی نمود و به اصلاح آنها پرداخت. در اینجا نتایج مربوط به دو ترکیب صنعتی اماتول[1] و انفو[2] آورده شده است. به عنوان مثال ترکیب صنعتی اماتول حدود ۱۰ درصد نسبت به ترکیب با خواص بهینه آن تفاوت دارد که می توان این ترکیب را برای ایجاد خواص بهتر اصلاح نمود. در مرحله بعد می توان ترکیبات جدیدی را با خواص بهینه ایجاد کرد که جایگزین ترکیبات حاضر باشند. از مهمترین نتایج بدست آمده می توان به تاثیر موازنه اکسیژن در تعیین ترکیب مناسببرای خواص بهینه در مواد پرانرژی اشاره کرد. ترکیب مناسب برای موازنه اکسیژن صفر به ترکیب مناسب برای سرعت و فشار بهینه نزدیک می باشد.

واژگان کلیدی: مخلوط‌های گازی، مواد پرانرژی، تئوری CJ، معادله حالت BKW، خواص تراک،بهینه سازی، موازنه اکسیژن

[1] Amatol

[2] Anfo

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فهرست علائم ونشانه ها ..... ی

فهرست جدول ها ..... ب

فهرست شکل ها ..... د

فصل ۱ - مقدمه ۱

۱-۱-پیشگفتار ۲

۱-۲-مروری برکارهای انجام شده ۴

۱-۳-معرفی پژوهش حاضر ۷

۱-۴-مروری بر مطالب این پایان نامه ۸

فصل ۲ - تئوری مسئله و معادلات حاکم ۹

۲-۱-مقدمه ۱۰

۲-۲-معادلات حاکم بر فرایند تراک ۱۰

۲-۳-معادلات حاکم بر شرایط تعادل ۱۳

۲-۴-مبانی تئوری پتانسیل المان ۱۵

۲-۵-معادله حالتBKW ۱۶

۲-۶-موازنه اکسیژن ۱۸

۲-۷-جمع بندی فصل حاضر ۱۹

فصل ۳ – بهینه سازی ۲۰

۳-۱-مقدمه ۲۱

۳-۲-دسته بندی مسائل بهینه سازی ۲۲

۳-۳-الگوریتم شر ۲۴

۳-۳-۱- شرط خاتمه ۲۶

۳-۴-تعیین پارامترهای بهینه تراک با استفاده از کد بهینه سازی و کد تعادلی ۲۶

۳-۵-جمع بندی فصل حاضر ۲۸

فصل ۴ - نتایج ۳۰

۴-۱-مقدمه ۳۱

۴-۲-اعتبارسنجی کد تعادلی برای مخلوط های گازی و مواد پرانرژی[۵] ۳۱

۴-۳-بهینه سازی خواص تراک مخلوط های گازی ۳۳

۴-۴-بهینه سازی خواص تراک در مواد پرانرژی ۳۸

۴-۴-۱- ترکیبات صنعتی ۴۰

۴-۴-۲- ترکیبات جدید ۴۴
۴-۵-نتیجه گیری فصل حاضر ۴۹

فصل ۵ - نتیجه‌گیری و پیشنهادات ۵۰
۵-۱-مقدمه ۵۱
۵-۲-جمع بندی تحقیق حاضر ۵۱
۵-۳-پیشنهادات برای ادامه کار ۵۲

مراجع ۵۴

پیوستها ۵۶
پیوستالف: محاسبه انرژی گیبس برای مخلوط گازهای ایده آل ۵۷
پیوستب: جدول موازنه اکسیژن برخی مواد پرانرژی ۵۸
پیوستج: نتایج بهینه سازی خواص برای برخی ترکیبات پرانرژی ۵۹

واژه نامه ۶۵

فهرست علائم و نشانه‌ها

نشانه	شرح	یکا
$D(u_1)$	سرعت انتشار تراک	mm/μs
E	انرژی داخلی	KJ
H	آنتالپی ترکیب	KJ
G	انرژی آزاد گیبس ترکیب	KJ
N_i	تعداد مول گونه i ام	
R_{un}	ثابت جهانی گازها	cal/(mol.K)
T	دما	K
S	آنتروپی ترکیب	
X_i	کسرمولی گونه i ام	
c	سرعت صوت	mm/μs
e	انرژی داخلی مخصوص	KJ/gr
p	فشار	GPa
q	گرمای حاصل از انفجار	KJ/gr
t	زمان	μs
u	مولفه سرعت محوری در دستگاه تراک	mm/μs
v	حجم مخصوص	cc/gr
μ_i	پتانسیل شیمیایی(انرژی گیبس جزئی)	
n_{ij}	تعداد اتم‌های نوع j در گونهiام	
λ_j	ضرایب لاگرانژ(پتانسیل المان‌ها)	
ρ	دانسیته	gr/cc
W	کار انبساط آیزنتروپیک محصولا تراک	(Mj/Kg)
γ	نسبت گرماهای ویژه	
α	ضریب تجربی معادله حالتBKW	
β	ضریب تجربی معادله حالتBKW	
θ	ضریب تجربی معادله حالتBKW	
Κ	ضریب تجربی معادله حالتBKW	
OB	موازنه اکسیژن	
$F(x_1,x_2,\ldots,x_n)$	تابع هدف	
$x_1,x_2,\ldots,x_n$	متغیر های طراحی	
w_i	تابع وزنی	
$g_f(x_k)$	گرادیان تابع f در نقطه x	

فهرست جدول ها

عنوان صفحه

جدول۴-۱-نتایج اعتبارسنجی کد حاضر برای تراک CJدر مواد شدید الانفجار ۳۲
جدول۴-۲- مقادیر بهینه پارامترهای مختلف تراک گازی برای مخلوط متان و هوا ۳۳
جدول۴-۳- مقادیر بهینه پارامترهای مختلف تراک گازی برای مخلوط پروپان و هوا ۳۴
جدول۴-۴- مقادیر بهینه پارامترهای مختلف تراک گازی برای مخلوط استیلن و هوا ۳۴
جدول۴-۵- مقادیر بهینه پارامترهای مختلف تراک گازی برای مخلوط هیدروژن و هوا..... ۳۵
جدول۴-۶- ترکیبات بهینه برایFAE ۳۸
جدول۴-۷- تعدادی ازترکیبات صنعتی بهمراه اجزا تشکیل دهنده و نسبت آنها..... ۳۹
جدول۴-۸- خواص تراک برای اماتول با استفاده از کد تعادلی و کدCHEETAH..... ۴۰
جدول۴-۹ – پارامترهای بهینه تراک CJبرای ترکیب AN+TNTودرصد مواد در ترکیب..... ۴۱
جدول۴-۱۰- خواص تراک برای انفو با استفاده از کد تعادلی وکدCHEETAH ۴۳
جدول۴-۱۱-پارامترهای بهینه تراک CJبرای ترکیب AN+FuelOil ودرصد مواد در ترکیب ۴۳
جدول۴-۱۲- پارامترهای بهینه تراک CJبرای ترکیب ADN+PETNودرصد مواد در ترکیب..... ۴۵
جدول۴-۱۳-پارامترهای بهینه تراکCJ برای ترکیبADN+PETN+TNT و درصد مواد در ترکیب ۴۶
جدول۱-مواد منفجره، ترکیب شیمیایی، دانسیته و موازنه اکسیژن..... ۵۸
جدول ۲- پارامترهای بهینه تراکCJ برای ترکیب TATB+ANودرصد مواد در ترکیب..... ۵۹
جدول ۳- پارامترهای بهینه تراکCJ برای ترکیب HNS+ANودرصد مواد در ترکیب..... ۵۹
جدول۴- پارامترهای بهینه تراکCJ برای ترکیب ADN+TNTودرصد مواد در ترکیب..... ۶۰
جدول ۵-پارامترهای بهینه تراک CJبرای ترکیب ADN+ADNBFودرصدمواد در ترکیب ۶۰
جدول۶-پارامترهای بهینه تراکCJبرای ترکیب ADN+CELLULOSEودرصد مواد در ترکیب ۶۱

جدول۷-پارامترهای بهینه تراکCJ برای ترکیب ADN+EDDودرصد مواد در ترکیب..... ۶۱
جدول۸-پارامترهای بهینه تراکCJبرای ترکیب ADN+RDXودرصد مواد در ترکیب..... ۶۲
جدول۹-پارامترهای بهینه تراک CJ برای ترکیب ADN+BICYCLOHMXودرصد مواد در ترکیب..... ۶۲
جدول ۱۰-پارامترهای بهینه تراکCJبرای ترکیب ADNBF+HNEودرصد موا ددر ترکیب..... ۶۳
جدول ۱۱-پارامترهای بهینه تراکCJبرای ترکیب HNE+RDXودرصد مواد در ترکیب..... ۶۳
جدول ۱۲-پارامترهای بهینه تراکCJبرای ترکیب RDX+TNT+ANودرصد مواد در ترکیب..... ۶۴

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

شکل۲-۱- موج احتراقی از دیدگاه ناظر ساکن و ناظر متصل به جبهه موج ۱۱

شکل۳-۱-فلوچارت تعیین خواص بهینه تراکCJ..... ۲۸

شکل۴-۱-تغییرات فشار تراک با دمای اولیه برای مخلوط استوکیومتری متـان و هـوا (مقایسـه نتـایج کـد حاضر با کدهایCEA وSTANJAN)..... ۳۲

شکل۴-۲- رفتار سوخت های مختلف در مقابل نسبت هم ارزی..... ۳۷

شکل۴-۳- تغییرات خواص تراک بر حسب درصدAN..... ۴۲

شکل۴-۴ –تغییرات موازنه اکسیژن با درصد ADNدرترکیبADN+PETN..... ۴۷

شکل۴-۵-تغییرات خواص تراک با درصدADN درترکیبADN+PETN..... ۴۷

شکل۴-۶- تغییرات موازنه اکسیژن با درصدADNدرترکیبAND+PETN+TNT..... ۴۸

فصل ۱ - مقدمه

۱-۱- پیشگفتار

بشراززمان های دور همواره در پی راهی برای ساختن مواد تراک‌پذیر[1] و استفاده از این مواد بوده است. در نخستین سال‌های کشف، این مواد تنها برای مقاصد نظامی و تسلیحاتی بکار برده می‌شدند اما با پیشرفت علم بشر، علاوه بر استفاده های نظامی، ایجاد تراک[2] دربسیاری از صنایع همانند شکل‌دهی مواد و فناوری تخریب و ... کاربرد فراوانی پیدا کرد. باگذشت زمان گرایش بشر به ساخت مواد ترا ک‌پذیر توانمندتر و کنترل پدیده تراک و استفاده مناسب‌تر از آن افزایش پیدا کرد و در این راستا فعالیت‌ها و پژوهش‌های بسیاری صورت گرفت.

مواد تراک‌پذیر به دو دسته کلی مخلوط‌های گازی و مواد پرانرژی تقسیم‌بندی می‌شوند. مخلوط‌های گازی شامل مخلوط‌هایی همانند هیدرژن-هوا،استیلن-هوا و ... می باشند. که سوخت و اکسیدکننده به صورت مجزا می‌باشند. مواد پرانرژی دسته‌ای دیگر از مواد تراک‌پذیر هستند که سوخت و اکسیدکننده به طور پیش مخلوط در هر مولکول وجود دارد. از مهمترین مواد پرانرژی جامد می‌توان به TNT, RDX ،PETN ،HMX و از نوع مایع آن می‌توان به نیتروگلیسیرین اشاره کرد. مواد پرانرژی علاوه بر کاربردهای نظامی، در صنایع غیر نظامی از جمله شکل‌دهی و جوشکاری انفجاری، متالوژی پودر، تخریب بناهای فرسوده، استخراج معادن، راه سازی، حفاری چاه‌های نفت و ...کاربردهای زیادی دارند. از این رو طراحی و ساخت تجهیزاتی که با مواد تراک‌پذیر کار می‌کنند نیاز می‌شود که لازمه آن، داشتن اطلاعاتی دقیق از نحوه ایجاد و پیشروی موج تراک، پارامترهای تراک و مقدار بهینه پارامترهای تراک می‌باشد. مهم‌ترین پارامترها در پدیده تراک، فشار، سرعت و انرژی ناشی از این پدیده می‌باشند. یک راه برای تعیین پارامترهای تراک استفاده از آزمایشهای تجربی و بکارگیری حسگرهای دما و فشار می‌باشد، اما تعیین پارامترهای تراک با استفاده از آزمایش‌های تجربی کاری بسیار دشوار و هزینه‌بر و در بیشتر موارد ناممکن است. راه دیگربرای تعیین پارامترهای تراک استفاده از شیوه‌های محاسباتی برای حل معادلات حاکم بر

[1] Detonable
[2] Detonation

فرایند تراک می‌باشد که این توانایی را می‌دهد که پارامترهای یک ترکیب انفجاری را پیش بینی و از هزینه‌های بالای آزمایشات مربوط به آن جلوگیری کرد.

با قابلیت پیش‌بینی پارامترهای تراک و استفاده ازروش‌های بهینه‌سازی می‌توان به ترکیب‌های مناسبی از مواد تراک‌پذیر رسیدکه پارامترهای تراک در آنهابهینه می‌باشند. اهمیت این موضوع با مثالی از مواد پرانرژی بیان می‌شود. استفاده از ترکیب ۸۰ درصد AN و ۲۰ درصدTNT نسبت به ترکیب ۱۰۰ درصدTNT باعث افزایش ۲۰ درصدی در فشار تراک و افزایش ۱۵ درصدی سرعت تراک و افزایش ۵ درصدی انرژی تراک می‌شود و نسبت به ترکیب ۱۰۰ درصدی AN، باعث افزایش ۷۰ درصدی فشار تراک، افزایش ۹۰ درصدی انرژی تراک و افزایش ۲۰ درصدی سرعت تراک می‌گردد. هدف این پژوهش،ایجاد ترکیبات جدید برای رسیدن به خواص بهینه برای موادتراک‌پذیر می‌باشد. در فرایند بهینه-سازی، پارامترهایگوناگون تراک به عنوان تابع هدف تعریف می‌شوند.متغیرهای این تابع هدف، ترکیب مواد تراک‌پذیرمی‌باشند که با استفاده از یک الگوریتم بهینه سازی، بدست می‌آیند.بنابراین برای رسیدن به ترکیب بهینه بررسی دو موضوع پیش‌بینی خواص تراک و بهینه‌سازی آنها موردنیاز می باشد.

اولین مرحله، تعیین پارامترهای تراک می‌باشد. برای استخراج معادلات حاکم بر تراک و تعیین پارامترهای مربوط به آن، نیاز است که مدلی مناسب برای این پدیده ارائه شود. درمیان تئوری‌های موجود برایمدل‌سازی تراک پایا، تئوریCJ، به دلیل سادگی و پیش‌بینی بسیار خوب پارامترهای ترمودینامیکی تراک، بیش از بقیه مورد توجه مهندسین و محققین بوده است.تئوری CJنخستین بار توسط چاپمن[1] و ژوگت[2]ارائه شد. در این تئوری تراک یک فرایند یک بعدی پایا با ضخامت صفر در نظر گرفته می‌شود و فرض بر این است که محصولات پس از خروج از موج تراک در تعادل ترمو- شیمیایی می‌باشند. در این تئوری، برای تعیین ترکیب محصولات تراک از محاسبات تعادلی استفاده می‌شود. برای این منظور قانون دوم ترمودینامیک به همراه معادلات بالانس عناصر مورد استفاده قرار می‌گیرد. قانون دوم ترمودینامیک

[1]Chapman

[2]Jouguet

بیانگر این است که در حالت تعادل ترمو- شیمیایی، انرژی آزاد گیبس محصولات، که تابعی از کسرمولی محصولات است، کمترین مقدار ممکن را دارا خواهد بود.

با توجه به غیر خطی بودن شدید معادلات حاکم (معادلات بقا، معادله حالت، معادلات مربوط به تعادل ترموشیمیایی و روابط مربوط به خواص ترموشیمیایی مواد حاصل از انفجار)، حل عددی این معادلات از پیچیدگی فراوانی برخوردار است. به این دلیل طی سالیان گذشته کدهای متعددی بوسیله مراکز تحقیقاتی شاخص دنیا برای پیش‌بینی خواص تعادلی تراک توسعه داده شده‌اند.

مرحله دوم، فرآیند بهینه‌سازی می‌باشد که هدف آن یافتن ترکیبی است که مقدار بهینه را برای پارامترهای مورد نظر ایجاد کند. بهترین جواب می‌تواند مقدار کمینه یا بیشینه برای یک پارامتر باشد و یا حتی ممکن است هدف یافتن مقداری معین برای یک پارامتر باشد. به عنوان مثال برای پارامترهایی نظیر فشار و سرعت یافتن مقدار بیشینه مطلوب می‌باشد اما برای پارامتری نظیر موازنه اکسیژن مقدار بیشینه مطلوب نبوده بلکه یافتن موازنه اکسیژن نزدیک به صفر مطلوب می‌باشد.

برای حل مسایل بهینه سازی، روش‌های مختلفی در ۳۰ سال گذشته توسعه داده شده‌اند که در ادامه این پایان نامه به آنها می پردازد.

همانطور که گفته شد در این پایان نامه دو موضوع تعیین پارامترهای تراک و فرایند بهینه‌سازی مورد توجه قرار خواهد گرفت از این رو، بخش بعد نگاهی گذرا بر تاریخچه کدهای تعادلی و بهینه‌سازی های انجام شده در این زمینه خواهد داشت.

۱-۲- مروری بر کارهای انجام شده

برای نخستین بار کوان[1] و فیکت[2] در سال ۱۹۵۴ معادلات حاکم بر تراک مواد پرانرژی را با فرض تعادل شیمیایی حل کردند[۱]. در دهه‌های گذشته کدهایی برای تعیین پارامترهای تعادلی در تراک مواد پرانرژی و همچنین مخلوطهای گازی تهیه شده است.

[1] Cowan

[2] Fickett

مدر[1] در سومین سمپوزیوم تراک از کد BKW که با کمک فیکت برروی کامپیوتر IBM704 اجرا می‌شده است، نام برده است. ظاهرا این کد در سال ۱۹۵۶ تهیه شده است. این کد برای ۵ عنصر و ۱۵ گونه شیمیایی تهیه شده بود. این کد خصوصیات تعادل محصولات در دما - فشار مشخص، هوگونیوت محصولات دتونیشن، نمودار آیزنتروپ محصولات و خصوصیات نقطه CJ را محاسبه می‌کرد. شرایط CJ با استفاده از روش تکرار محاسبه می‌شد[۲]. پس از آن در سال ۱۹۶۱ کدی با قابلیت‌های مشابه با نام STRETCH BKW برای کامپیوترهای IBM7030 تهیه شد. در سال‌هایبعد نسخه‌های دیگری از کد BKW برای مواد پرانرژی تهیه شدند. از مهمترین این کدها می‌توان به TIGER، ARPEGE،RUBY و CHEETAH اشاره کرد. شناخته شده‌ترین کدهای تعادلی، برای محاسبه پارامترهای تراک مواد پرانرژی، کدهای Fortran BKW و CHEETAH می‌باشند. کد BKWFortranتوسط مدر[۳] و با زبان برنامه-نویسی فرترن و کد CHEETAH توسط فرید[2] تهیه شده است.

نخستین برنامه برای تعیین پارامترهای تعادلی تراک در مخلوط‌های گازی در سالهای ۱۹۶۱-۱۹۶۲ در ناسا، توسط گوردون[3] و زلزنیک[4] تهیه شد. پس از آن در سال ۱۹۷۱، نسخه دیگری از این کد با نام Chemical Equilibrium Code تهیه شد. این کد به اختصار CEC71 نامیده می‌شد. از آن زمان تاکنون CEC در نسخه‌های جدیدتر و با قابلیت‌های بیشتر ارائه شده است. آخرین نسخه این کد با نام CEA ارائه شده است. در این کد از روش نیوتن-رافسون برای کمینه‌سازی انرژی آزاد گیبس محصولات استفاده می-شود. از دیگر کدهای موجود برای مخلوط‌های گازی می‌توان به STANJAN وGASEQاشاره کرد. کد بسیار توانمند STANJAN، برای مخلوطهای گازی، در سال ۱۹۸۶ در دانشگاه استنفورد آمریکا بر مبنای روش پتانسیل المان تهیه شد. این کد قادر است که در مدت زمان بسیار کوتاه، جواب‌های بسیار دقیقی از پارامترهای تراک در مخلوط‌های گازی ارائه کند. در این کد زمان حل و همچنین امکان رخ دادن

[1]Mader
[2]Fried
[3]Gordon
[4]Zeleznic

خطاهای محاسباتی به طور چشمگیری نسبت به کدهای تعادلی قبلی کاهش یافته است[۴]. این امر باعث شده که استفاده از روش پتانسیل المان به عنوان یکی از توانمندترین روش‌ها در تعیین پارامترهای تعادلی تراک شناخته شود.

درمسائلی که تعدادگونه‌های شیمیایی موجود درآن زیاد است، روش پتانسیل المان بسیار سودمند است، در این روش تنها به تعداد عناصر موجود در ترکیب، معادلات غیرخطی باید حل شوند، در حالیکه در دیگر روشها به تعداد گونه‌های شیمیایی معادلات غیرخطی وجود دارند.

در سال ۱۳۸۸، کدی توسط مظاهری و بابااحمدی بر مبنای روش پتانسیل المان برای مخلوط‌های گازی و مواد پرانرژی تهیه شد که اعتبارسنجی آن با استفاده از کدهایSTANJAN و CHEETAHحاکی از پیش بینی دقیق پارامترهای تراک CJمی‌باشد. در این کد از معادله حالت گاز کامل برای مخلوط‌های گازی و از معادله حالت BKW برای مواد پرانرژی استفاده شده است[۵]. این کد برای ترکیبات CHNO تهیه شده است.

در زمینه بهینه‌سازی احتراق و بطور خاص در زمینه کاهش آلایندگی‌ها و انتشار NO_x، کارهای متنوعی در ۲۰ سال گذشته انجام شده است.به عنوان مثال میتوان به مراجع[۶]، [۷] و [۸]اشاره کرد، اما در زمینه بهینه‌سازی تراک و بطور ویژه آنچه که مورد توجه این پژوهش می‌باشد، کارهای بسیار کمی انجام شده است. تا آنجایی که بررسی‌های نگارنده نشان می‌دهد، تنها مقاله‌ای که در این زمینه منتشر شده استمربوط به موتارجان[1] و همکارانش می‌باشد که در سال ۲۰۰۶ منتشر شده است. عنوان این مقاله بهینه سازی پارامترهای تراک برای ترکیبات مواد پرانرژی می باشد[۹]. این مقاله در ابتدا به معرفی کد LOTUSE پرداخته‌است. این کد برای تعیین پارامترهای تراک مواد پرانرژی تهیه شده است و قابلیت یافتن ماکزیمم سرعت تراک را برای یک ترکیب معین با استفاده از مفهوم موازنه اکسیژن[2]دارد. موازنه اکسیژن، مقدار مولکول‌های اکسیژن باقی‌مانده بعد از اکسیدشدن هیدروژن به H_2O و کربن به CO_2را

[1] H. Muthurajan

[2]Oxygen Balance