creative commons

COMMONS DEED

저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:

저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.

비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.

변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 이용허락규약(Legal Code)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

Disclaimer

dCollection

공학석사학위논문

고에너지 물질의 연소 특성 모사를 위한 압력 기반 반응속도 모델 결정 및 검증

A determination and verification of pressure driven reaction model for simulating combustion characteristics of energetic materials

2019년 2월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

백 동 현

고에너지 물질의 연소 특성 모사를 위한 압력 기반 반응속도 모델 결정 및 검증

A determination and verification of pressure driven reaction model for simulating combustion characteristics of energetic materials

지도교수 여 재 익

이 논문을 공학석사 학위논문으로 제출함

2018년 12월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

백 동 현

백동현의 공학석사 학위논문을 인준함

2019년 2월

위 원 장 : _____ (인)

부위원장 : _____ (인)

위 원 : _____ (인)

초 록

RDX, HMX 및 PETN 과 금속이 혼합된 고폭 화약은 최대 압력의 크기를 줄이면서, 임펄스를 증가시키기 위해 사용된다. 알루미늄은 폭발 성능이 증진된 화약에서 후 연소 반응을 일으켜, 반응 시간을 길게 한다. 본 연구에서는 Al, AP, Binder, RDX, HMX, PETN 등이 섞인 4 종류의 고폭 화약에 대한 반응 속도 모델링을 수행했다. 모델의 검증은 화약의 크기 효과를 측정하는 반응 막대 시험과 충격 민감도를 측정하는 순폭 시험으로 하였다. 그 결과, 전산 모사를 통해 얻어진 화약의 충격 민감도와 크기 효과가 실험 결과와 정확히 일치 됨을 확인할 수 있었다. 또한, Al 과 AP 의 고폭 화약에 대한 폭발 성능 증진의 효과도 구현했다.

주요어: RDX, HMX, PETN, 알루미늄 (Aluminum, Al), 폭발 성능 증진 (Enhanced blast), AP (Ammonium perchlorate), 반응 막대 (Rate stick), 순폭 시험(Gap test)

학번: 2017-27686

목 차

초 록 i
목 차 ii
표 목차..... iii
그림 목차..... iii

제 1 장 서 론 1

제 2 장 실 험 4
2.1 반응막대시험(Unconfined rate stick test) 4
2.2 Large-Scale Gap Test (LSGT)..... 6
제 3 장 반응 모델 파라미터 결정 8
제 4 장 지배 방정식 및 구성 방정식 9
제 5 장 계산 결과 16
5.1 Numerical set up 16
5.2 Unconfined rate stick test : PETN 80 17
5.3 Unconfined rate stick test : The others..... 20
5.4 LSGT : Donor-Gap 30
5.5 LSGT : Donor-Gap-Acceptor 36

제 6 장 결 론 38

참고문헌 38
Abstract 42

표 목차

표 1 반응막대시험에 사용된 화약의 물성 5

표 2 각 화약에 대한 LSGT 데이터 7

표 3 각 화약에 대한 모델링 상수 14

표 4 PMMA의 모델링 상수 15

표 5 각 화약의 rate stick 길이 및 mesh 크기 16

표 6 각 경우에 대한 PMMA 두께 및 Acceptor 길이 16

표 7 Chapman-Jouguet values of PETN 80 17

표 8 Calculated detonation properties of three heteregeneous explosives at infinite radius 23

표 9 Effects of Al and AP addition on RDX-based explosives 24

표 10 Shock attenuation in PMMA Gap 31

그림 목차

그림 1 각 화약의 반응막대시험 5

그림 2 LSGT Configuration 7

그림 3 Computational domain for the unconfined rate stick test simulation 16
그림 4 Structure of detonation wave at infinite radius of PETN 80 18
그림 5 Density contours for unconfined rate stick of PETN 80 18
그림 6 Propagation of detonation wave in 0.98 mm and 5 mm for unconfined rate stick of PETN 80 19
그림 7 Size effect curves of PETN 80 19
그림 8a Mesh resolution test result of RDX 25..... 21
그림 8b Detonation structure of RDX 25 : mesh size 0.2 mm 21
그림 8c Detonation structure of HMX 66 : mesh size 0.04 mm 22
그림 8d Detonation structure of HMX 95 : mesh size 0.02 mm 22
그림 8e Comparison of the resolved detonation strcture of all explosives analyzed 8a-8d..... 23

그림 9a RDX 25 rate stick pressure contour for radius 50, 30, 17.5 mm cases(from top to bottom) at time 6.5, 11.5, 16.5 μs(the length range is 0 ~ 100 mm) 25
그림 9b Propagation of detonation wave in 17.5 mm and 50 mm for unconfined rate stick of RDX 25..... 25
그림 10a HMX 66 rate stick pressure contour for radius 6, 4, 3.0 mm cases(from top to bottom) at time 8.5, 10.5, 12.5 μs(the length range is 50 ~ 100 mm) 26
그림 10b Propagation of detonation wave in 3.0 mm and 6.0 mm for unconfined rate stick of HMX 66..... 26
그림 11a HMX 95 rate stick pressure contour for radius 3.5, 2.5, 0.5 mm cases(from top to bottom) at time 3.5, 4.5, 5.5 μs(the length range is 25 ~ 50 mm)..... 27
그림 11b Propagation of detonation wave in 0.5 mm and 3.5 mm for unconfined rate stick of HMX 95..... 27
그림 12a Size effect curves of RDX 25 28
그림 12b Size effect curves of HMX 66 28
그림 12c Size effect curves of HMX 95 29

그림 13 Shock attenuation shown in PMMA 30
그림 14a Go and No Go cases for RDX 25. The red line indicates the level-set boundary of the PMMA gap at t = 8, 10, 13 and 17 μs (from left to right) 32
그림 14b Pressure evolution for the Go case of RDX 25..... 32
그림 14c Pressure evolution for the No Go case of RDX 25..... 33
그림 15a Go and No Go cases for HMX 66. The red line indicates the level-set boundary of the PMMA gap at t = 8, 14, 17 and 20 μs (from left to right) 33
그림 15b Pressure evolution for the Go case of HMX 66.... 34
그림 15c Pressure evolution for the No Go case of HMX 66.... 34
그림 16a Go and No Go cases for HMX 95. The red line indicates the level-set boundary of the PMMA gap at t = 8, 16, 19 and 21 μs (from left to right) 35
그림 16b Pressure evolution for the Go case of HMX 95.... 35
그림 16c Pressure evolution for the No Go case of HMX 95.... 36

제 1 장 서 론

고폭 화약은 임계 값 이상의 충격을 받을 때, 점화 후 반응 성장을 통해 폭굉에 도달하는 충격 폭굉 천이 현상(SDT, Shock to detonation transition)을 일으킨다. 수 μs 안에 발생하는 급격한 연소반응으로 인해 압력 구배가 큰 영향을 미친다. 따라서 화약의 폭굉 반응 전산 모사 시 압력 기반 반응속도 모델이 필요하다. 그동안 폭굉 반응 모델을 개발했던 선행 연구들이 있었다.

1980 년 Tarver 와 Edward Lee 에 의해 고안된 Ignition & Growth(I&G) 모델[1]은 SDT 현상의 물리적인 의미를 모두 설명한다. 그러나 파라미터 수가 많아 모델링 하는데 어려움이 따른다. Johns 와 Wilkins, Lee 는 점화를 제외한 반응 성장의 영향만 고려한 JWL++ 모델[2]을 고안했다. 기존의 I&G 모델에서 점화 항과 폭굉 천이 항을 무시하여 파라미터 수를 줄인 모델이다. 이 모델은 I&G 모델에 비하여 간단하나 점화가 항상 일어난다고 가정하므로 점화의 영향을 확인 할 수 없다는 단점이 있다. 최근에 개발된 개선된 I&G 모델[3]은 I&G 모델의 점화 항과 JWL++ 모델을 결합 했기 때문에 점화에서 폭굉에 이르는 현상을 모두 설명할 수 있다. 또한, 해석적인 방법으로 파라미터를 쉽게 결정할 수 있다는 장점이 있다. 이 반응 속도 모델로 다양한 조성을 가진 복합 화약의 반응 모델을 결정할 수 있다.

김보훈 등[3, 4]은 RDX 50 %, 알루미늄 35 %이 혼합된 화약의 반응속도 파라미터를 결정하여 Unconfined rate stick test 전산 모사를 통하여 크기 효과를 재현하고, LSGT(Large Scale Gap Test)전산 모사를 사용하여, 화약의 충격 민감도를 재현했다.

RDX, HMX, PETN 과 같은 고폭 화약은 순물질 보다 Binder 및 알루미늄, 산화제 등과 혼합된 형태로 사용된다. 알루미늄과 같은 금속 물질은 최대 압력(Peak pressure)의 크기를 감소 시키는 대신, 임펄스(Impulse)와 같은 성능을 증대시키기 위해서 첨가된다. 알루미늄은 화약의 주성분의 폭발로부터 생긴 기체 생성물 안에서 공기 중의 산소와 반응한다. 산화제를 첨가할 경우 알루미늄의 반응에 산소를 공급하여, 알루미늄의 반응을 더 활발하게 해주는 역할을 한다. 지금까지 이러한 종류의 고폭 화약에 대한 실험 연구 및 수치해석 연구가 진행되었다.

Xiang 등[5]은 수중 환경에서 HMX 와 알루미늄이 혼합된 고폭 화약의 특성을 분석했다. Al 의 함량을 증가시킬 때, 임펄스가 증가한 뒤 감소하는 경향성을 보였으며, 임펄스가 최대가 되는 최적의 알루미늄 함량을 찾아내었다. 그 후속 연구[6]에서는 RDX 와 알루미늄, AP 가 혼합된 화약에 대한 연구가 진행되었다. 수중 환경에서 AP 가 존재할 경우가 없을 때 보다, 후 연소(Subsequent reaction)로 인한 버블 에너지가 커짐이 확인되었다. 버블 에너지가 커질수록, 수중 환경에서 버블의 파괴(Bubble collapse)로 인한 파괴력이 커지므로 AP 가 존재할 경우 파괴력이 더 강함이 확인되었다.

김우현 등[7]은 HMX 과 알루미늄이 혼합된 고폭화약의 폭발 성능을 2 상 모델을 사용하여 모사했다. 알루미늄의 함량이 증가됨에 따라, 폭속이 감소하고 알루미늄의 후 연소로 인해 두 개의 피크가 발생함을 확인했다. 알루미늄 및 AP 가 존재할 경우 실험적인 연구가 많이 진행되었지만, 알루미늄과 AP 가 동시에 존재하는 경우에 대한 수치해석 연구는 지금까지 진행되지 않았다.

본 연구에서는 개선된 I&G 모델을 사용하여 표 1 에 제시된 성분을 가진 복합 화약의 반응 속도 모델을 결정하였고, 이를 검증하기 위해서 Unconfined rate stick test 와 Gap test 시험 및 전산 모사를 수행했다. 먼저 PETN 80%과 Sylgard 20%가 섞인 PETN 80 화약의 크기 효과를 재현하고, 남은 세 화약에 대해서도 크기 효과 및 충격 민감도를 재현했다. 또한, 각 고폭 화약의 연소 반응에서 화약의 주성분이 모두 소모된 후, 알루미늄 및 AP 가 후 연소 반응을 일으키면서 나타나는 영향을 재현했다.

제 2 장 실 험

2.1 반응막대시험(Unconfined rate stick test)

반응막대시험은 실린더 형상을 가진 폭약의 반지름에 따른 폭속을 측정하는 시험이다. 이 시험은 폭약의 화학반응이 멈추는 폭굉 중단점(Detonation failure point) 전까지 진행된다.

폭굉 중단 현상[8]은 폭약의 화학반응으로 인해 생성되는 에너지가 반응 구간 내의 생성물의 팽창으로 인해 손실되는 에너지보다 작아지면서, 반응이 중단되는 현상이다. 폭약에 충격이 가해진 이후 폭굉파가 진행됨에 따라, 손실(lateral loss)이 축적되어 폭굉파의 속도는 음속과 같아지고 반응이 멈추게 된다. 이러한 현상은 폭약의 반지름이 감소됨에 따라, 반응으로 생성되는 에너지가 감소하고 팽창으로 인한 손실 에너지가 증가함에 따라 발생한다.

본 연구에서는 표 1에 나타난 네 종류의 화약에 대해서 시험이 진행됐다. 완전 발달된(Fully developed) 파의 속도를 측정하기 위해 화약 지름의 10배의 길이를 가진 형상을 사용했다. 폭속을 측정하기 위해 화약 길이의 절반 구간부터 일정한 간격을 두고 전기 핀을 부착했다. 폭발이 성공할 때, 각 전기 핀에 부착된 감지기(Detector)가 파가 핀에 도달된 시간을 기록하여 핀 간의 거리를 시간으로 나누어 폭속을 계산한다. 반면, 폭굉 중단이 일어나게 되면 감지기로 신호가 전달되지 않는다.

화약	조성 (%)	밀도 (kg/m³)
RDX 25	RDX 25, Al 35, AP 25, Binder 15	1830
HMX 66	HMX 66, Al 25, Binder 9	1900
HMX 95	HMX 95, Binder 5	1820
PETN 80	PETN 80, Binder 20	1560

표 1. 반응막대시험에 사용된 화약의 물성

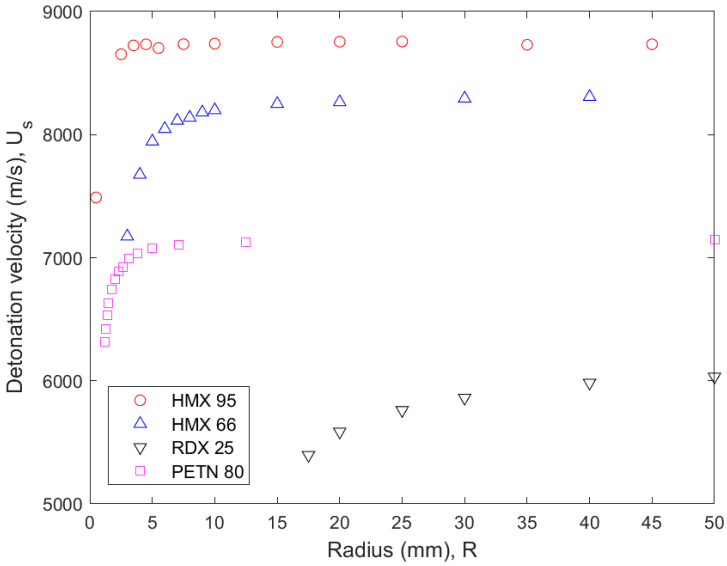


그림 1. 각 화약의 반응막대시험 데이터

그림 1은 표 1의 화약들에 대한 크기 효과(Size effect) 데이터이다. 다른 세 화약과는 달리 RDX 25는 가장 큰 임계 직경(Critical radius of detonation failure)과 완만한 크기 효과를 지닌다. 이는 알루미늄과 AP가 첨가되면서 화약의 주성분인 RDX의 양이 최소가 되기 때문이다. 화약의 주성분이 모두 소모된 후, 알루미늄과 AP가 공급하는 산소가 2차 반응을 일으키기 때문에, 다른 화약들에 비해서 반응이 오랫동안 일어나면서 반응 구간의 길이가 증가한다. 따라서, RDX 25는 반응 구간 내의 팽창으로 인한 소실 에너지가 제일 크므로 폭굉 중단 현상이 발생하는 임계 직경이 가장 크고, 완만한 크기 효과를 보인다. 반면에, 금속 물질이나 산화제가 포함되어 있지 않은 화약들은 임계 직경이 더 작고, 크기 효과도 더 급격하게 나타난다. 이는 반응이 1 μs 이내의 짧은 시간 내에 발생하면서 반응 구간의 길이가 짧아져서 팽창으로 인한 소실 에너지가 작아지기 때문이다.

2.2 Large-Scale Gap Test(LSGT)

LSGT는 각 화약의 충격 민감도를 측정하기 위한 시험이다. 그림 2의 Donor 화약 왼편에서 충격이 가해졌을 때 생성되는 폭굉파가 비반응물질인 Gap을 거치면서 압력 감쇠(Pressure attenuation)을 거친 뒤, 충격파가 Acceptor에 가해졌을 때 폭약의 폭발 여부를 측정한다.

일반적으로 LSGT의 화약 형상은 그림 2에서와 같이 지름 50.8 mm의 실린더 형상이 사용된다. Donor는 pentolite 화약, Gap

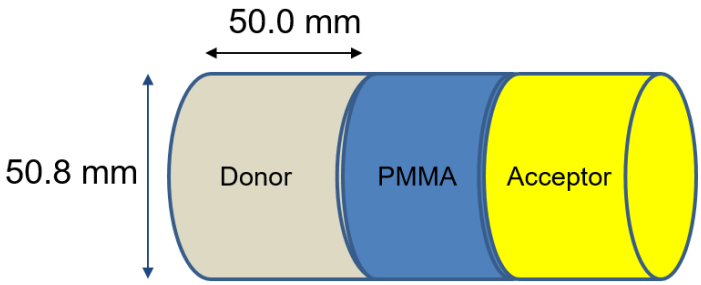


그림 2. LSGT Configuration

Acceptor	밀도(kg m^{-3})	임계 두께(mm)	충격 압력(GPa)
RDX 25	1830	21.45	6.248
HMX 66	1900	43.79	2.859
HMX 95	1820	53.49	1.827

표 2. 각 화약에 대한 LSGT 데이터

물질은 polymethyl methacrylate(PMMA)가 사용된다. 시험은 PMMA 디스크를 쌓음으로써, 두께를 증가시키면서 진행된다. 두께를 증가시키면서 Acceptor 화약이 50%의 확률로 폭발할 때의 PMMA의 두께를 임계 두께(Critical thickness)로 정의[4]한다. LSGT는 PETN 80을 제외한 세 화약에 대해서 진행되었고, 각 화약에 대한 임계 두께 및 충격 압력은 표 2와 같다. RDX 및 HMX와 같은 주성분이 증가함에 따라 화약의 민감도가 증가하여

임계 두께가 증가한다는 것을 확인할 수 있다.

제 3 장 반응 모델 파라미터 결정

식 1은 파라미터 결정에 용이하고 폭발의 연소 특성을 전부 포함하는 개선된 I&G 모델[3]이다.

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)\mu^a\Big|_{0\le\lambda\le0.01} + G(1-\lambda)p^b\Big|_{0.01<\lambda\le1} \qquad (1)$$

첫 번째 항은 충격파에 의한 압축의 영향을 나타내고, 두 번째 항은 반응의 성장을 나타낸다. λ 는 반응 진척도(Reaction progess), p는 압력, t는 시간, μ 는 압축 정도를 나타낸 $\rho/\rho_0 - 1$ 이다.

먼저 반응 성장 측 파라미터(G, b)를 결정하기 위해서 그림 1에서 나타냈던 데이터를 역 반지름에 대한 폭속 데이터로 변환한다. 그래프를 그린 뒤, 역반지름($1/R$)이 0일 때를 외삽(Extrapolation)하여 무한 반경에서의 폭굉파속(D)를 구한다. 그 후, 각 화약에 대한 폭속 데이터와 식 2의 오차를 최소로 만드는 R_D와 b값을 결정한다. 이렇게 정해진 R_D와 b값과 각 화약의 Chapman-Jouguet 압력(p_{cj}) 등을 사용하여 식 3을 통하여 G값을 구한다.

$$\frac{R_D}{R} = -0.4\frac{[1-(U_S/D)^2]^{-0.8}}{\ln[1-(U_S/D)^2]}(\frac{U_S}{D})^{2b-1}(1-\frac{U_S}{D}) \qquad (2)$$

$$G = \frac{D}{R_D p_{cj}^{\ b}} \qquad (3)$$

점화 항에서의 압축 계수(a)는 열점 형성 모델(Hot-spot formulation model)의 경우 실험과 랭킨-위고니오 관계에 의해서 4의 값을 가진다고 알려져 있다[9, 10]. 마지막 I 값은 LSGT 전산 모사를 통해서 Go/No Go가 일어날 때의 계수로 구해진다. 본 연구에서 PETN 80은 LSGT 시험 결과가 존재하지 않아 반응 성장 측 파라미터만 결정하였고, 남은 세 화약은 모든 파라미터를 결정했다. 위에서 언급한 절차를 통해 결정된 반응 속도 파라미터는 표 3에 제시되어 있다.

제 4 장 지배 방정식 및 구성 방정식

본 연구에서는 충격 폭굉 천이(Shock to detonation transition, SDT) 현상을 모사하기 위해서 오일러리안 기반 다 물질 In-house Hydrodynamic 코드를 사용했다. 이 코드에는 Hybrid particle level-set 기법에 Ghost-Fluid 기법이 포함되었다[11]. 실린더 형상이기 때문에 3차원이 아닌 2차원 축 대칭 조건에서 계산을 수행했다. 2차원 축대칭에서의 질량, 운동량, 에너지 보존 방정식은 아래의 식 4 ~ 7과 같다.

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial r} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial z} = \vec{S}(\vec{U}) \tag{4}$$

$$\vec{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_r \\ \rho u_z \\ \rho E \end{bmatrix} \quad \vec{E} = \begin{bmatrix} \rho u_r \\ \rho u_r^{\ 2} + p \\ \rho u_r u_z \\ u_r(\rho E + p) \end{bmatrix} \quad \vec{F} = \begin{bmatrix} \rho u_z \\ \rho u_z u_r \\ \rho u_z^{\ 2} + p \\ u_z(\rho E + p) \end{bmatrix} \tag{5}$$

$$\vec{S} = \begin{bmatrix} -\frac{\rho u_r}{r}\varphi \\ \frac{s_{rr} - s_{\theta\theta} - \rho u_r^{\ 2}}{r}\varphi + \eta(\frac{\partial s_{rr}}{\partial r} + \frac{\partial s_{zr}}{\partial z}) \\ \frac{s_{zr} - \rho u_r u_z}{r}\varphi + \eta(\frac{\partial s_{rz}}{\partial r} + \frac{\partial s_{zz}}{\partial z}) \\ \frac{u_r s_{rr} + u_z s_{rz} - u_r(\rho E + p)}{r}\varphi + \eta(\frac{\partial(u_r s_{rr} + u_z s_{rz})}{\partial r} + \frac{\partial(u_r s_{zr} + u_z s_{zz})}{\partial z}) \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$\frac{\partial(\rho\lambda_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\lambda_i u_j)}{\partial x_j} = w_i \tag{7}$$

φ 은 직사각형 좌표계에서는 0, 실린더 좌표계에서는 1이다. u_z 및 u_r 은 각각 축 및 반지름 방향 속도를 나타내고, 단위 질량 당 전에너지(Total energy)는 $E = e + (u_z^{\ 2} + u_r^{\ 2})/2$ 로 나타낸다. e 는 단위 질량 당 내부에너지, p는 압력을 나타내며 η는 유체 및 폭약의 경우에는 0, 비반응 물질에서는 1이다. 식 7을 통해서 반응 진척도가 계산되고, w_i 에는 식 1이 대입된다. LSGT의 경우 Gap 물질의 편차응력(Deviatoric stress)은 식 8 ~ 10에 의하여 계산된다.

$$\dot{s}_{ij} = \dot{s}_{ij,tr} + \dot{s}_{ij,cor} = \Omega_{ik} s_{kj} - s_{ik}\Omega_{kj} + 2G_0(\bar{D}_{ij} - D_{ij}{}^{p}) \quad (8)$$

$$\dot{s}_{ij,\mathrm{tr}} = \Omega_{ik} s_{kj} - s_{ik}\Omega_{kj} + 2G_0\bar{D}_{ij} \quad (9)$$

$$\dot{s}_{ij,cor} = -H : D_{ij}{}^{p} = -2G_0\Lambda N_{ij,tr} \quad (10)$$

G_0은 전단 계수(Shear modulus)을 나타내고, 위의 식에 나타난 연산자(Operator)들은 다음과 같이 정의된다.

$$\overline{D}_{ij} = D_{ij} - \frac{1}{3}D_{kk}\delta_{ij}, \quad D_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}), \Omega_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) \quad (11)$$

위의 지배방정식을 풀기 위해서는 압력을 기술하는 상태 방정식(Equation of state)이 필요하다. 먼저 폭약의 압력은 아래의 식 12와 같이 비반응 상태와 반응 상태의 압력에 반응 분율을 곱하여 계산된다.

$$p = (1-\lambda)p_{unreacted} + \lambda p_{reacted} \quad (12)$$

먼저 비반응 상태의 압력은 LSGT의 Donor 화약으로 쓰이는 pentolite는 식 13와 같이 다항식 형태[12], 다른 네 화약은 식 14[13]로 계산된다. 식 14에 나타난 모든 변수에 대한 연산자는 식 15 ~ 19와 같다.

$$p_{unreacted} = A_1(\rho/\rho_0 - 1)^1 + B_1(\rho/\rho_0 - 1)^2 + C_1(\rho/\rho_0 - 1)^3 \quad (13)$$

$$p_{unreacted} = p_H + \Gamma\rho(e - e_H) \quad (14)$$

$$p_H = C_0{}^2(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}) / [\frac{1}{\rho_0} - S(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho})]^2 \quad (15)$$

$$e_H = C_0{}^2(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho})^2 / 2[\frac{1}{\rho_0} - S(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho})]^2 \qquad (16)$$

$$C_0 = (\frac{\partial p}{\partial \rho})^{1/2} \qquad (17)$$

$$S = dU_{shock} / dU_{particle} \qquad (18)$$

$$U_{shock} = C_0 + SU_{particle} \qquad (19)$$

p_H , e_H 는 위고니오 커브에서 기준이 되는 reference 상태에서의 압력 및 내부에너지다. Γ 는 Gruneisen 상수, C_0 는 음속, S 는 위고니오 커브의 기울기, U_{shock} , $U_{particle}$ 는 각각 충격파 및 입자의 속도를 의미한다.

반응 상태의 압력을 기술하는 대표적인 상태방정식은 식 20으로 나타내어진 Isentropic Jones-Wilkins-Lee(JWL) 상태방정식이다. p_S 는 등엔트로피 압력, v는 ρ_0 / ρ 이다.

$$p_S = A_2 e^{-R_1 v} + B_2 e^{-R_2 v} + C_2 v^{-(\omega+1)} \qquad (20)$$

위 식의 A_2 , B_2 , C_2 , R_1, R_2 , ω 은 실린더 모양의 화약에 구리를 씌워 폭발 시켰을 때 구리의 변위를 측정하는 금속 실린더 테스트(Metal cylinder test)를 수행[14]하거나, 이 시험을 수치적으로 수행하는 열 화학 코드를 통해 구할 수 있다. 구리의 변위는 생성물의 팽창으로 인해 발생하고, 발생한 변위에 대하여 Fitting을 수행하여 파라미터를 구한다. Isentropic 조건에서는 금속의 팽창 정도가 폭발 생성물의 팽창의 정도와 동일하다고 가정하여 파라미

터를 구한다[14]. 하지만, 실린더의 벽에서부터 반사되는 반사 충격파들의 중첩으로 생성물의 재압축이 발생하게 된다[15]. 이러한 High-pressure 효과로 인하여 Isentropic이 아닌 새로운 형태의 상태방정식이 필요하다. 먼저 등엔트로피 조건에서 열역학 1법칙에 의하여 아래의 식 21과 같이 나타낸 후, 여기에 식 20을 대입하여 적분하면 식 22와 같이 등엔트로피 조건에서의 내부에너지(e_S)를 계산할 수 있다.

$$e_S = -p_S dv \tag{21}$$

$$e_S = \frac{A}{R_1} e^{-R_1 v} + \frac{B}{R_2} e^{-R_2 v} + \frac{C}{\omega v^{\omega}} \tag{22}$$

$$\omega = \left| \frac{v dp}{de} \right|_v \tag{23}$$

식 23을 사용하여, Isentropic 조건을 기준으로 테일러 급수를 전개하면 식 24와 같이 압력을 나타낼 수 있고, 이를 종합하면 식 25와 같이 Non-isentropic JWL 상태방정식을 얻을 수 있다. 대상화약들에 대한 실험 데이터가 없으므로, 본 연구에서는 표3과 같이 Cheetah[16]에서 제공된 파라미터를 사용했다.

$$p = p_S + \left| \frac{dp}{de} \right|_v (e - e_S) = p_S + \frac{\omega}{v}(e - e_S) \tag{24}$$

$$p_{reacted} = A(1 - \frac{\omega}{R_1 v}) e^{-R_1 v} + B(1 - \frac{\omega}{R_2 v}) e^{-R_2 v} + \frac{\omega e}{v} \tag{25}$$

마지막으로 비 반응 물질에 대한 압력은 아래의 식 26[17]을 통

해서 계산될 수 있다. 여기서 μ 은 $\rho/\rho_0 - 1$ 을 의미한다. 또한, PMMA의 변형을 모사하기 위하여 식 27의 Johnson-cook 응력 모델을 사용했다.

$$p_{PMMA} = \Gamma_0 E + \rho_0 C_0^{\,2} \mu [1 + (1 - \frac{\Gamma_0}{2})\mu] / [1 - (S_0 - 1)\mu]^2 \qquad (26)$$

$$\sigma_Y = (A_3 + B_3 (\varepsilon^p)^n)(1 + C_3 \ln \dot{\varepsilon}^p)(1 - \frac{T - T_0}{T_m - T_0}) \qquad (27)$$

	Parameters	RDX 25	HMX 66	HMX 95	Pentolite	PETN 80
Unreacted State	ρ_0 [kg m^{-3}]	1830	1900	1820	1560	1560
	C_0 [m s^{-1}]	2406	2467	2467	–	1490
	S	1.89	1.86	1.89	–	3.30
	Γ	0.99	0.99	1.09	–	0.77
	A_1 [GPa]	–	–	–	12.82	–
	B_1 [GPa]	–	–	–	0	–
	C_1 [GPa]	–	–	–	119.3	–
Reacted State	A_2 [GPa]	628.6	652.2	458.0	481.7	205.5
	B_2 [GPa]	4.80	4.10	8.30	8.93	3.80
	R_1	5.10	4.23	3.721	4.70	3.45
	R_2	1.30	0.75	1.068	1.05	0.91
	ω	0.086	0.091	0.359	0.36	0.29
Chemical kinetics	I [μs^{-1}]	0.94	4.30	12.10	1.40	–
	a	4.0	4.0	4.0	4.0	–
	G [μs^{-1}GPa^{-b}]	0.105	0.236	0.538	0.829	0.268
	b	1.30	1.54	1.65	1.3	1.89

표 3. 각 화약에 대한 모델링 상수

Mechanical parameter	
ρ_0 [kg m^{-3}]	1182
Young's modulus [GPa]	0.42
Shear modulus [GPa]	2.32
Thermal parameter	
C_p [J kg^{-1} K^{-1}]	1466
T_0 [K]	300
T_m [K]	330.3
Mie-Gruneisen equation of state	
C_0 [m s^{-1}]	2180
S_0	1.410
Γ_0	0.85
Jonson-Cook model	
A_3 [GPa]	0.76
B_3 [GPa]	0.07
C_3	0.0
m	1.0
n	1.0

표 4. PMMA 의 모델링 상수

ε^P, $\dot{\varepsilon}^P$는 각각 유효 소성 변형(Effective plastic strain) 및 유효 소성 변형률(Effective plastic strain rate)을 나타낸다. 또한, T_m는 녹는점, T_0는 상온, A_3, B_3, C_3, m, n은 Johnson-cook 모델의 파라미터이다. 표 4에는 PMMA의 모델 상수가 제시되어 있다.

제 5 장 계산 결과

5.1 Numerical set up

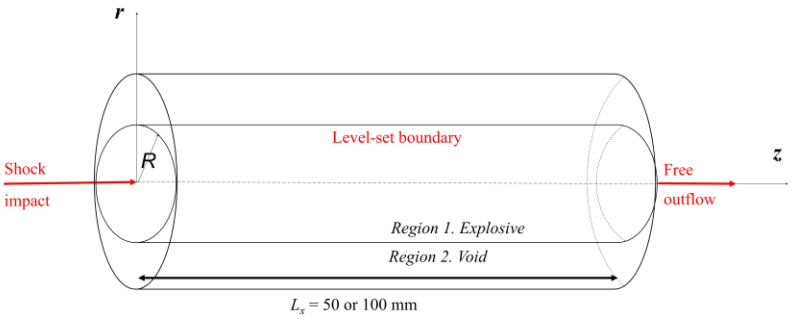


그림 3. Computational domain for the unconfined rate stick test simulation

	PETN 80	RDX 25	HMX 66	HMX 95
Length [mm]	50	100	100	50
Mesh size [mm]	0.05	0.20	0.04	0.02

표 5. 각 화약의 rate stick 길이 및 mesh 크기

	Go/No Go	RDX 25	HMX 66	HMX 95
PMMA gap [mm]	Go	21.0	43.0	53.0
	No Go	22.0	44.0	54.0
Acceptor [mm]	Go	79.0	57.0	47.0
	No Go	78.0	56.0	46.0

표 6. 각 경우에 대한 PMMA 두께 및 Acceptor 길이

그림 3은 Unconfined rate stick simulation에 대한 계산 영역을 나타낸 것이다. 화약과 Void 사이에서 레벨 셋 기법을 사용했고, 표 5의 화약의 길이 및 메쉬 크기를 사용했다. LSGT는 표 2의 임계 두께를 참고하여 계산 영역을 설정했다. 계산 영역 전체 길이는 150 mm로 했으며, 각각에 대하여 PMMA와 pentolite의 길이를 제외한 나머지 영역을 Acceptor로 했다.

5.2 Unconfined rate stick test : PETN 80

화약의 고유한 특성인 CJ 압력 및 반응 구간의 길이는 메쉬 크기의 결정에 있어서 중요하다. 그림 4는 무한반경에서 PETN 80의 폭굉파의 구조를 나타낸 그림이다. 표 7에서 나타난 CJ 압력은 20.52 GPa 인데, 그림 4의 계산 결과가 CJ 압력을 정확하게 예측하는 것을 확인할 수 있다. 반응이 모두 완결 되었을 때(λ =1), 압력이 21 GPa이고 반응구간의 길이는 0.2 mm 정도이다. 반응구간 내에서의 최대압력(Peak pressure)은 32 GPa이다.

그림 5는 각 반지름에 대한 시간에 따른 파의 전파를 밀도 컨투어로 나타낸 것이다. 초기에는 전파되는 파의 속도가 거의

Champan-Jouguet values	ρ_{cj} [kg m^{-3}]	2130
	p_{cj} [GPa]	20.5
	e_{cj} [KJ/cc]	2.75
	v_{cj} [m/s]	7004

표 7. Chapman-Jouguet values of PETN 80

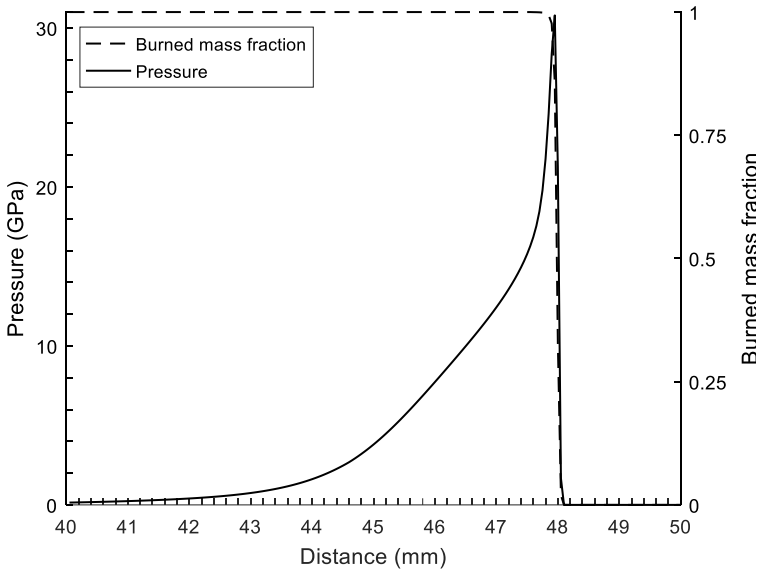


그림 4. Structure of detonation wave at infinite radius of PETN 80

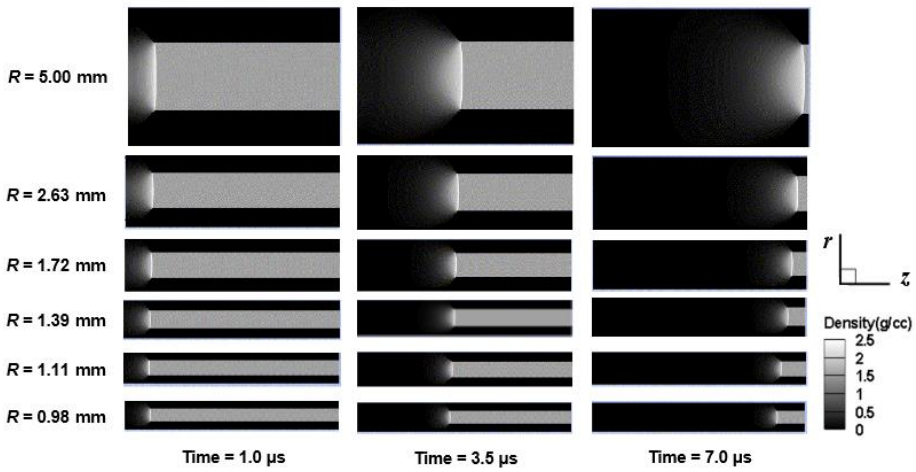


그림 5. Density contours for unconfined rate stick of PETN 80

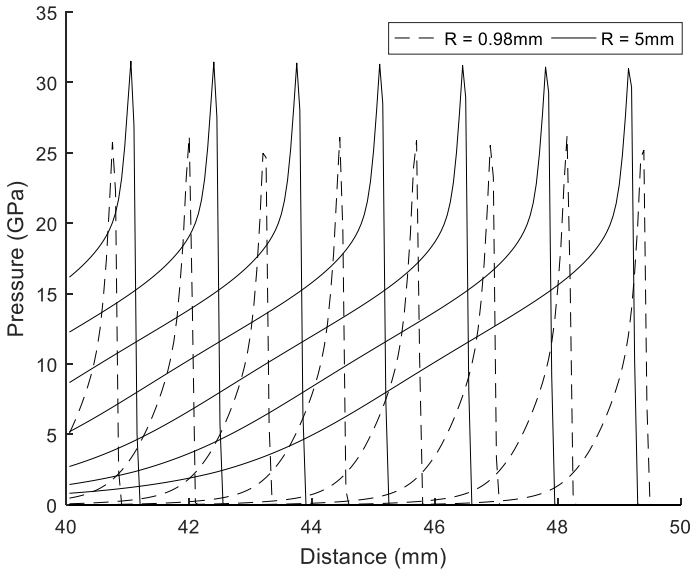


그림 6. Propagation of detonation wave in 0.98 mm and 5 mm for unconfined rate stick

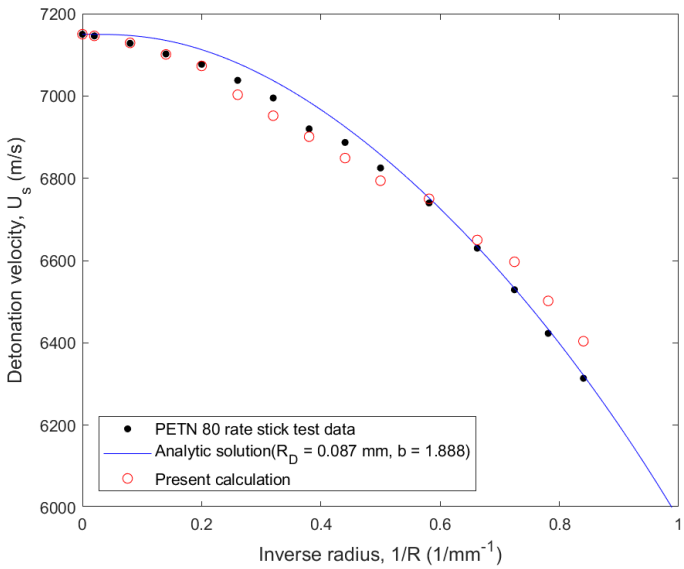


그림 7. Size effect curves of PETN 80

차이가 없지만 시간이 지나면서 파가 완전 발달 됨에 따라 속도의 차이가 나타남을 알 수 있다. 이러한 폭속의 차이는 반지름이 작아짐에 따라 반응으로 인해 생성되는 에너지에 비하여 생성물의 팽창으로 소실되는 에너지가 커지기 때문에 생긴다.

그림 6은 5 mm와 0.98 mm의 경우에 대한 폭굉파의 압력을 나타낸 것이다. 최대압력은 각각에 대하여 31 GPa, 25 GPa 이고, 이로 인한 압력 구배의 차이로 인해 폭속 차이가 발생한다.

그림 7은 PETN 80의 크기 효과 곡선을 나타낸 것이다. 3장 에서 제시된 Fitting 방법을 통해 결정된 반응속도 상수를 입력하여 계산한 결과가 실제 실험 결과와 일치함을 보여준다. Unconfined rate stick test를 통해 결정된 반응 속도 상수를 사용하여 계산을 수행했을 때, 실제 시험으로 얻어낸 크기 효과를 정확하게 모사해 냄을 보여준다.

5.3 Unconfined rate stick test : The others

표 3에서 제시된 반응속도 파라미터를 이용하여 PETN 80을 제외한 세 화약에 대해서 Al 및 AP의 첨가 여부가 폭발 반응에 미치는 영향을 살펴볼 수 있다. 본격적인 계산을 수행하기 전에 각 화약에 대한 적절한 메쉬 크기를 결정해야 한다.

그림 8a는 RDX 25의 메쉬 크기를 결정하는 과정을 보여준다. 메쉬가 더 조밀 할수록 최대압력이 높아지게 되며, 더 이상 압력이 증가하지 않는 메쉬 크기를 선택했다. 0.4 mm 에서부터 반으로 줄이면서 계산을 수행했고, 0.2 mm의 메쉬 크기를 결정했다. 그림 8b는 8a에서 결정된 메쉬 크기일 때의 계산 결과가 CJ 압력을 정확하게 예측하는 것을 보여준다.

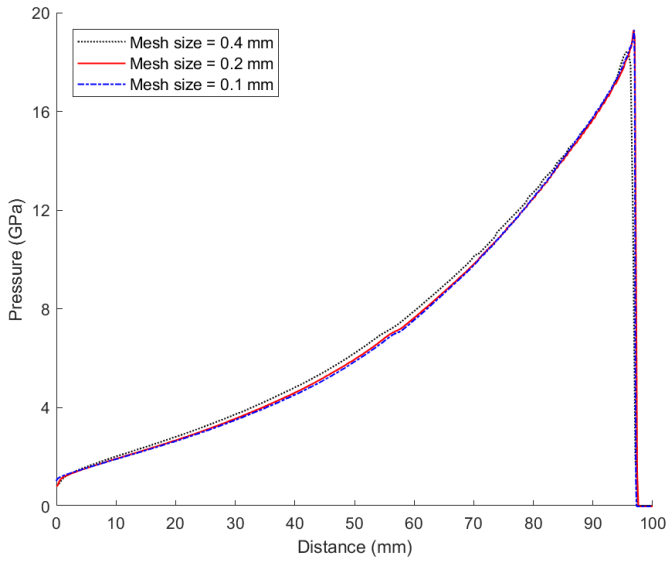


그림 8a. Mesh resolution test result of RDX 25

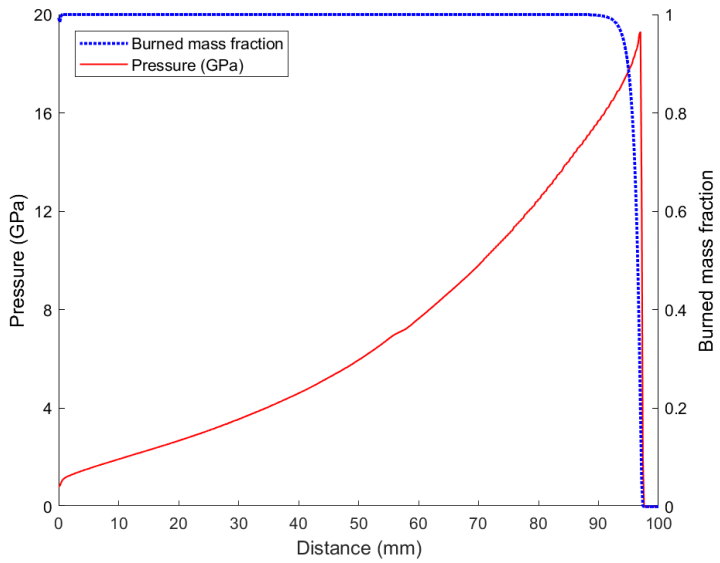


그림 8b. Detonation structure of RDX 25 : mesh size 0.2 mm

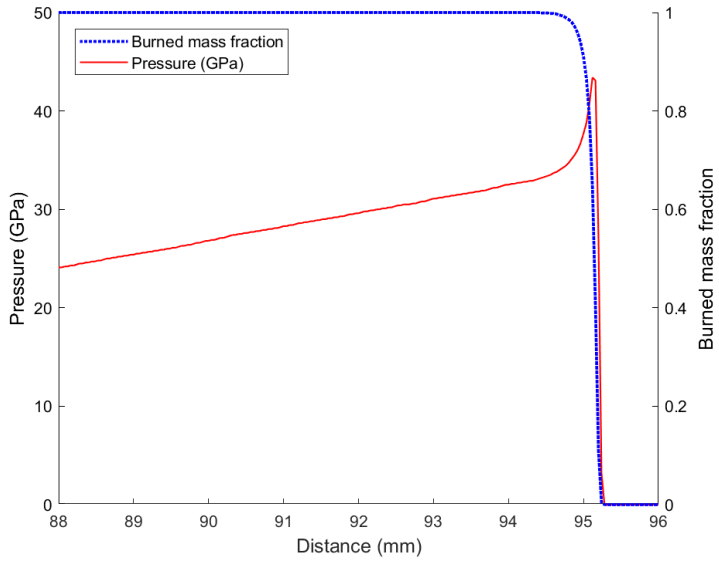


그림 8c. Detonation structure of HMX 66 : mesh size 0.04 mm

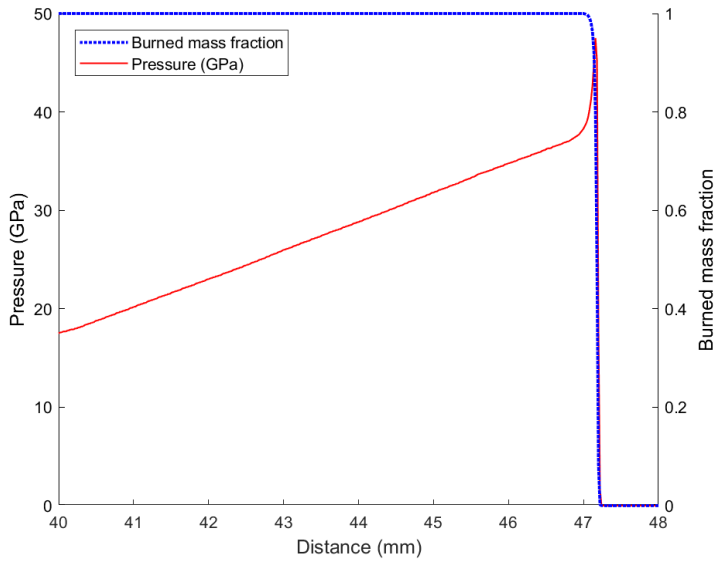
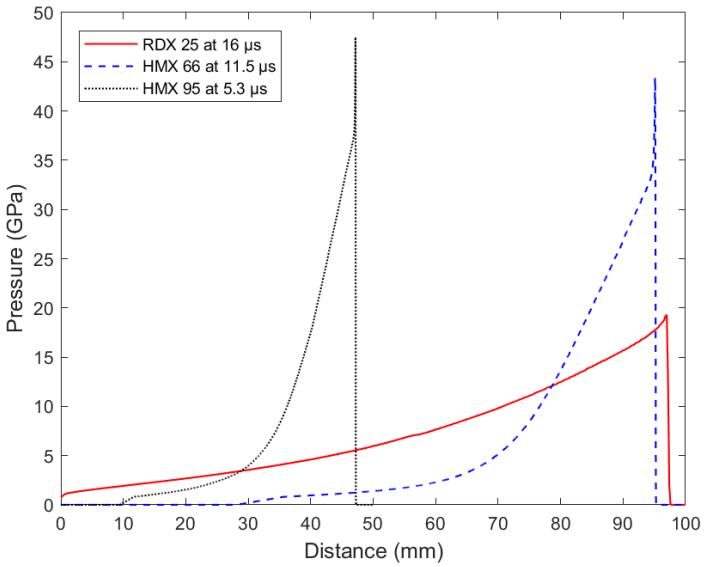


그림 8d. Detonation structure of HMX 95 : mesh size 0.02 mm



(e)

그림 8e. Comparison of the resolved detonation structure of all explosives analyzed 8a−8d

Parameter	RDX 25	HMX 66	HMX 95
Peak pressure [GPa]	19.3	43.0	47.5
p_{cj} [GPa]	16.3	30.0	33.0
p_{cj} [GPa, Cheetah]	16.6	29.1	34.1
Reaction zone [mm]	5.0	0.4	0.2
Mesh size [mm]	0.2	0.04	0.02

표 8. Calculated detonation properties of three heterogeneous explosives at infinite radius

Explosive composition [%]	Total Energy [kJ/kg]	Detonation Energy [kJ/kg]
RDX 85, HTPB 15	5200	3708
RDX 65, Al 20, HTPB 15	7917	3343
RDX 20, AP 43, Al 25, HTPB 12	8505	1474

표 9. Effects of Al and AP addition on RDX-based explosives

RDX 25와 동일한 원리로 남은 두 화약에 대해서도 그림 8c와 8d에서와 같이 메쉬 크기를 정할 수 있다. RDX 25와는 달리, 화약의 주성분인 HMX가 다량 포함되어 있고 반응이 급격하게 일어나며 그에 따라 반응 구간의 길이가 짧아지기 때문에 더 조밀한 메쉬 크기를 필요로 함을 확인할 수 있다. 특별히, HMX 95는 알루미늄과 AP를 모두 포함하지 않고 있기 때문에 다른 두 화약과는 달리 2차 반응을 일으키지 않아 가장 짧은 시간에 반응이 일어나고 가장 날카로운 파의 구조를 가짐을 확인 할 수 있다.

그림 8e는 위에서 얻은 세 화약의 완전 발달된 파의 구조를 비교한 것이다. RDX 25는 화약 주성분의 비율이 가장 작아 가장 낮은 최대압력 크기와 가장 긴 반응 구간의 길이를 가지지만, 알루미늄과 AP에서 공급하는 산소의 2차 반응으로 인하여 압력 꼬리가 제일 길어 짐을 볼 수 있다. AP가 없을 때 알루미늄은 공기 중의 산소 와만 반응하지만, AP가 알루미늄의 연소를 도와주기 때문에 더 긴 시간 동안 반응을 일으킨다. 표 9에서 보는 바와 같이, RDX가 줄어들고 알루미늄과 AP가 늘어나면 폭발 에너지는 감소하지만, 전체 에너지는 증가한다[18]. 이는 알루미늄과 AP의 폭연(Deflagration) 반응으로 인해 생기는 현상이다.

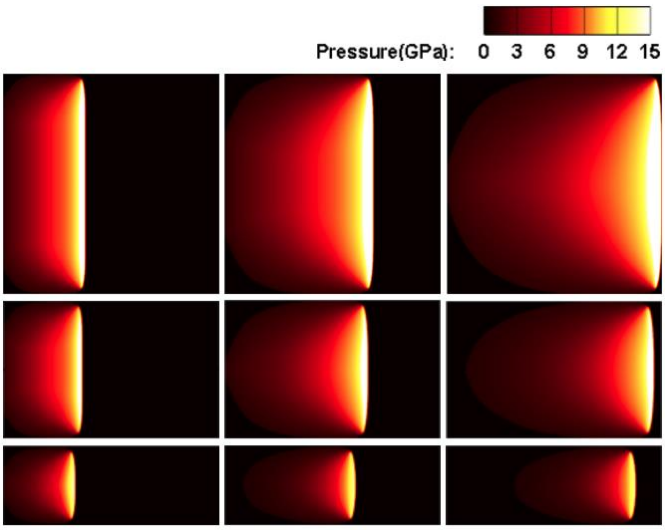


그림 9a. RDX 25 rate stick pressure contour for radius 50, 30 and 17.5 mm cases(from top to bottom) at time 6.5, 11.5, 16.5 μs (the length range is 0 ~ 100 mm)

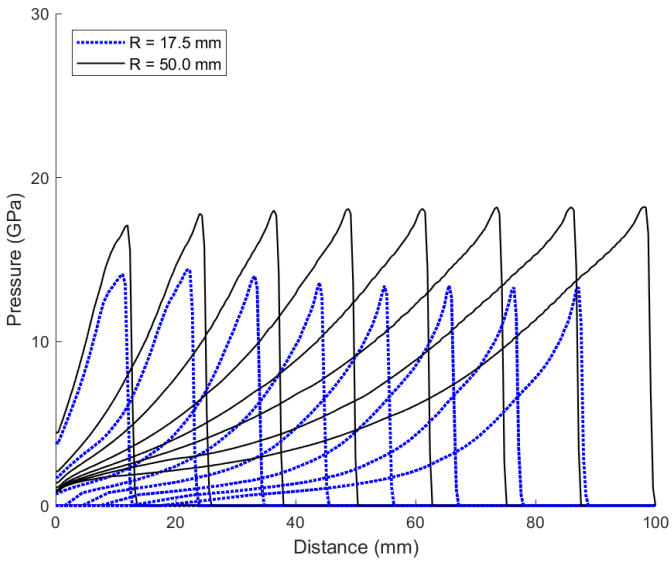


그림 9b. Propagation of detonation wave in 17.5 mm and 50 mm for unconfined rate stick of RDX 25

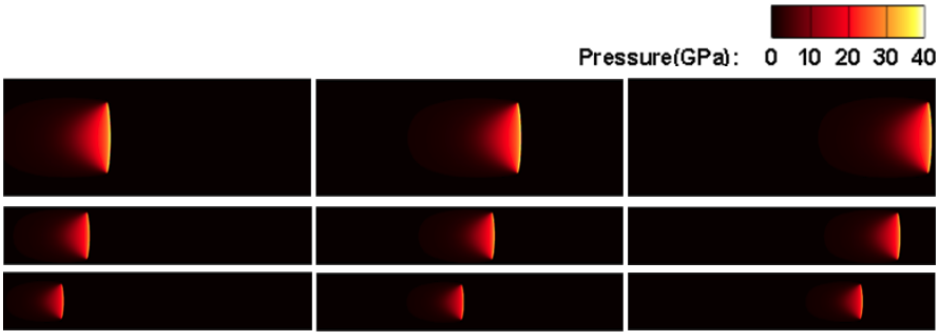


그림 10a. HMX 66 rate stick pressure contour for radius 6, 4 and 3.0 mm cases(from top to bottom) at time 8.5, 10.5, 12.5 μs (the length range is 50 ~ 100 mm)

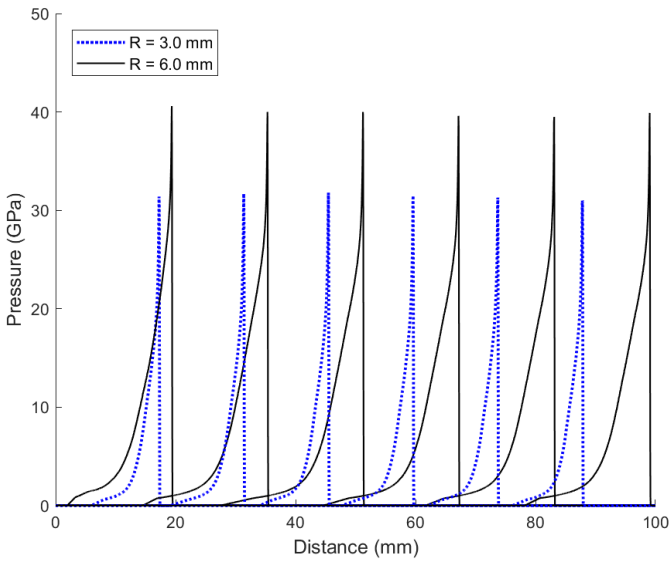


그림 10b. Propagation of detonation wave in 3.0 mm and 6.0 mm for unconfined rate stick of HMX 66

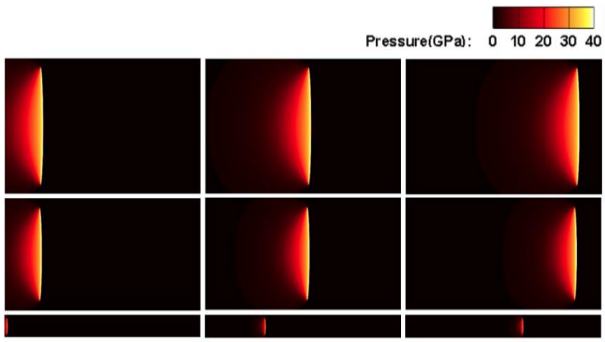


그림 11a. HMX 95 rate stick pressure contour for radius 3.5, 2.5 and 0.5 mm cases (from top to bottom) at time 3.5, 4.5, 5.5 μs (the length range is 25 ~ 50 mm)

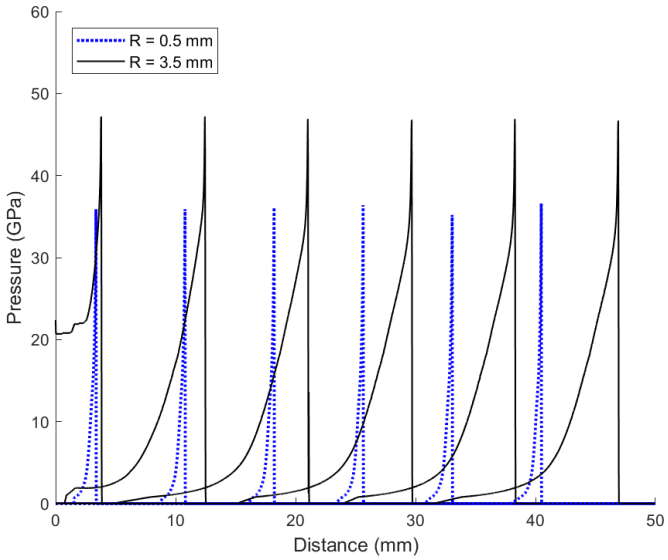


그림 11b. Propagation of detonation wave in 0.5 mm and 3.5 mm for unconfined rate stick of HMX 95

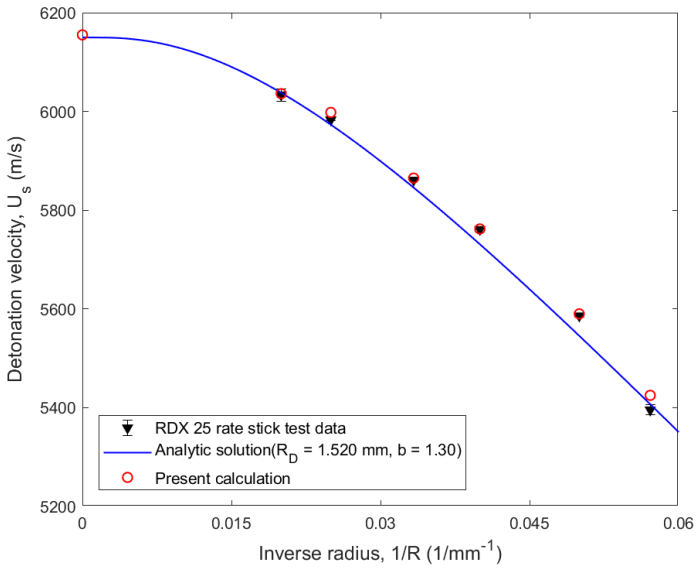


그림 12a. Size effect curves of RDX 25

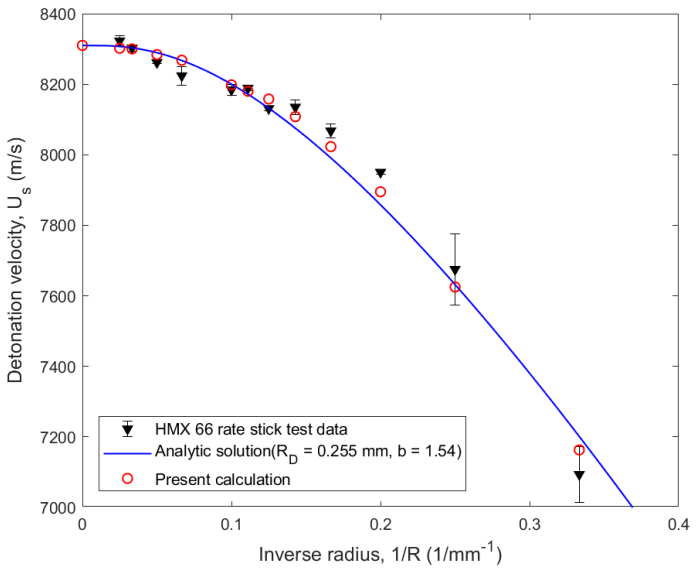


그림 12b. Size effect curves of HMX 66

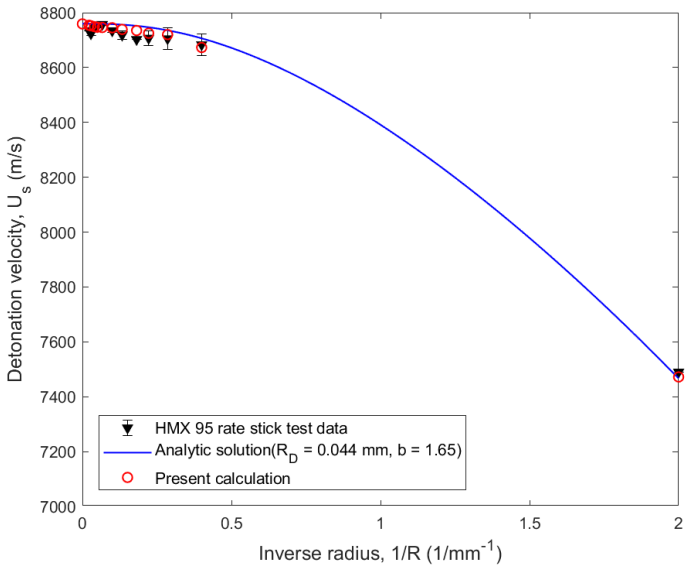


그림 12c. Size effect curves of HMX 95

HMX 66은 RDX 25와 비교했을 때 AP를 포함하고 있지 않아 압력 꼬리는 더 짧지만, HMX 95와 비교했을 때 꼬리가 더 길다는 것을 확인할 수 있다. 이는 HMX 66에 알루미늄이 포함되어 있어 공기 중의 산소와 2차 반응하기 때문에 생기는 현상이다. 이와 같이, 알루미늄과 AP는 화약의 최대 압력을 감소시키는 대신 임펄스를 증가시키고, blast 효과를 증대시킨다.

그림 9a는 RDX 25의 시간에 따른 파의 전파를 pressure contour로 나타낸 것이다. 20 mm가 넘는 반지름에도 크기 효과를 보임을 확인 할 수 있다. 이는 9b에서 보는 바와 같이 크기에 따른 최대압력 차이에 의한 것이다.

반면, HMX 66은 그림 10a에서 보는 바와 같이 6 mm 이하부터 크기 효과가 나타난다. 또한, 그림 10b에서와 같이 RDX 25와

비교했을 때, 두 반지름 간의 최대압력의 차이가 더 큼을 확인할 수 있다. HMX가 95% 포함된 화약의 경우, 크기 효과는 더 작은 반지름에서 급격하게 발생한다. 그림 11a에서 보는 바와 같이, 2.5 mm까지 속력의 변화가 거의 없지만 0.5 mm로 감소할 때 속력의 감소가 급격하게 발생함을 볼 수 있다. 그림 11b는 이 현상이 2.5 mm와 0.5 mm 간의 최대압력 차이가 15 GPa 정도 차이가 나기 때문이라는 것을 말해준다. 그림 12a 부터 12c 까지는 각 화약의 크기 효과를 보여준다. 이들을 통해, RDX나 HMX 같은 주성분이 많이 포함된 화약은 작은 크기의 반지름에서 급격한 크기 효과를 보인다는 것을 확인할 수 있다.

5.4 LSGT : Donor-Gap

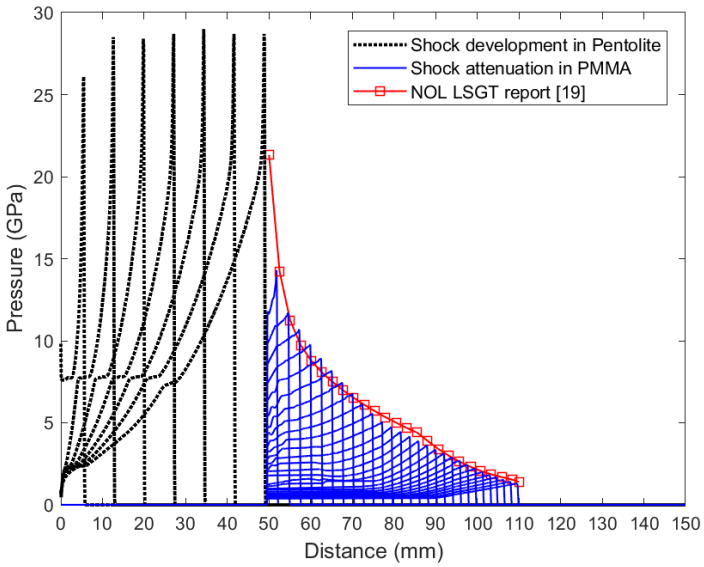


그림 13. Shock attenuation shown in PMMA

두께 (mm)	NOL data (GPa)	계산 결과 (GPa)
2.54	14.20	13.52
5.08	11.23	11.34
10.16	8.77	9.65
15.24	7.49	8.18
21.10	6.25	6.46
22.86	6.10	6.14
30.48	5.01	4.60
35.56	4.40	3.88
43.18	2.99	2.95
44.70	2.85	2.84
45.72	2.63	2.69
50.80	2.07	2.08
52.90	2.03	1.90
53.34	1.86	1.84
55.88	1.69	1.62
60.96	1.40	1.37

표 10. Shock attenuation in PMMA gap

LSGT는 화약의 Go와 No Go 반응을 측정하여, 화약의 민감도를 정량화하는 시험이다. Donor-Gap-Acceptor 쌍을 계산하기에 앞서 Gap에서의 압력 감쇠를 먼저 계산해야, 두께에 따른 화약의 민감도를 정확하게 모사할 수 있다. 그림 13과 표 10은 Gap의 압력 감쇠에 대한 코드 계산 결과와 NOL(Naval Ordnance Laboratory)의 데이터[19]를 비교한 것이다. 그림 2의 계산 영역 도메인에서 두께가 60 mm 일 때 압력 감쇠가 계산되었다. 계산

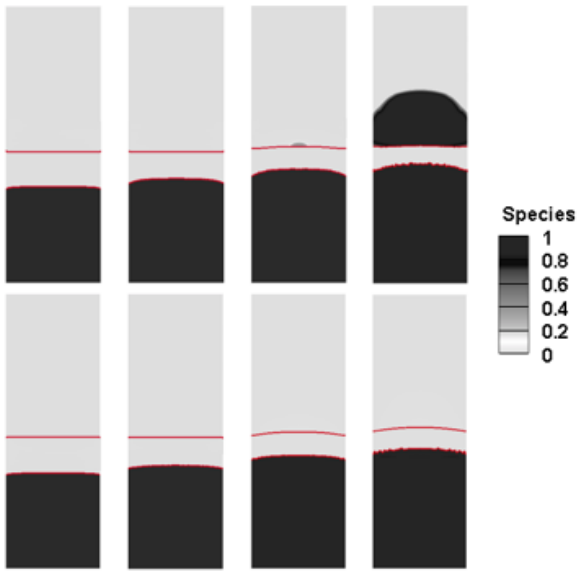


그림 14a. Go and No Go cases for RDX 25. The red line indicates the level-set boundary of the PMMA gap at t = 8, 10, 13 and 17 μs (from left to right)

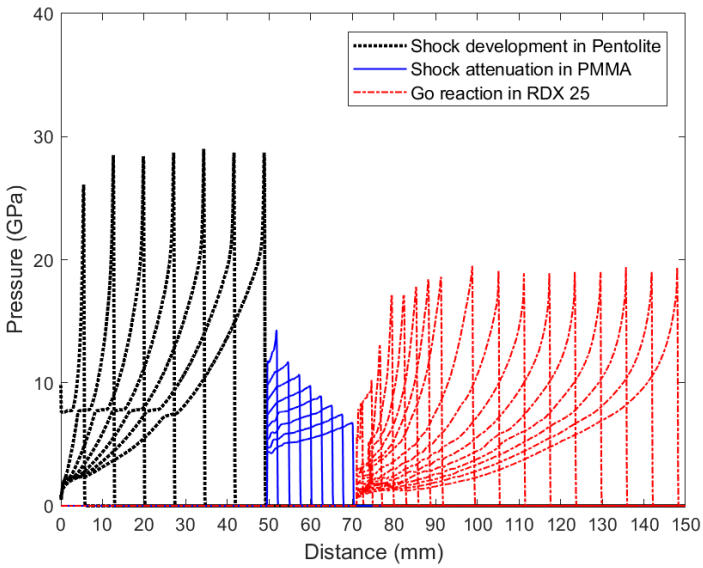


그림 14b. Pressure evolution for the Go case of RDX 25

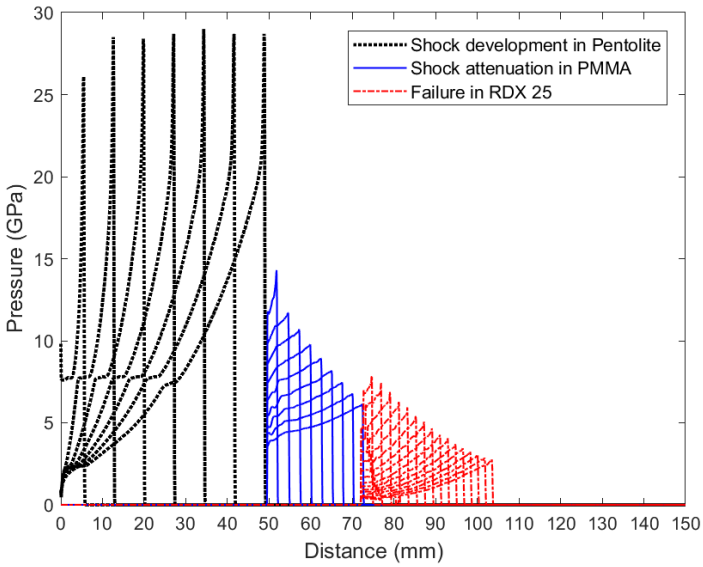


그림 14c. Pressure evolution for the No Go case of RDX 25

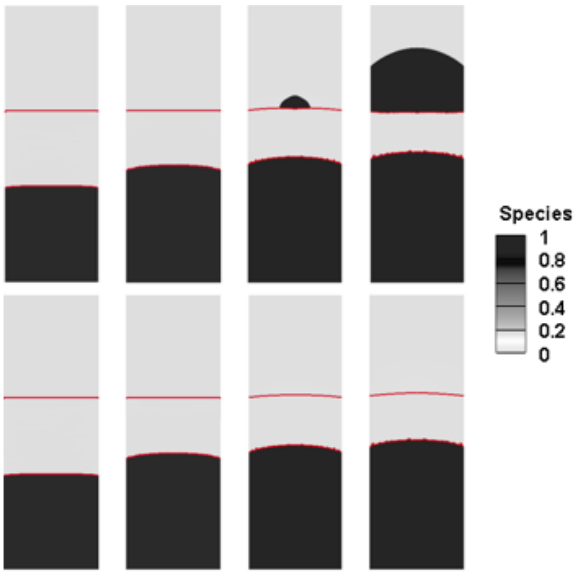


그림 15a. Go and No Go cases for HMX 66. The red line indicates the level-set boundary of the PMMA gap at t = 8, 14, 17 and 20 μs (from left to right)

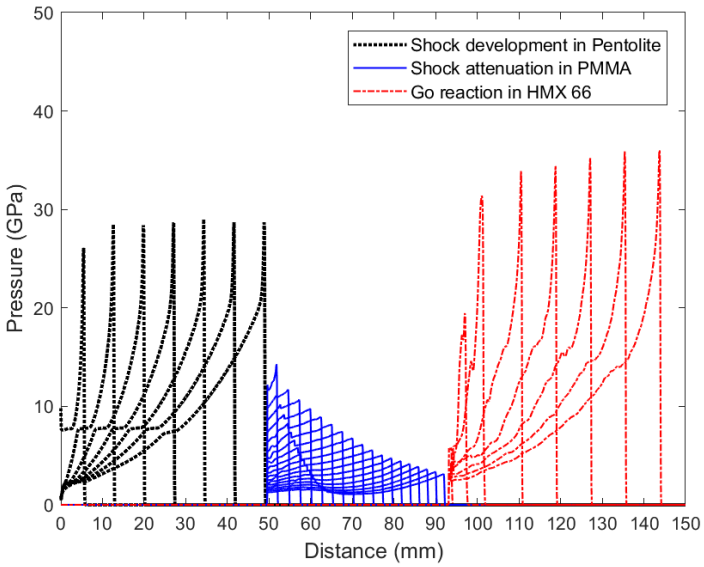


그림 15b. Pressure evolution for the Go case of HMX 66

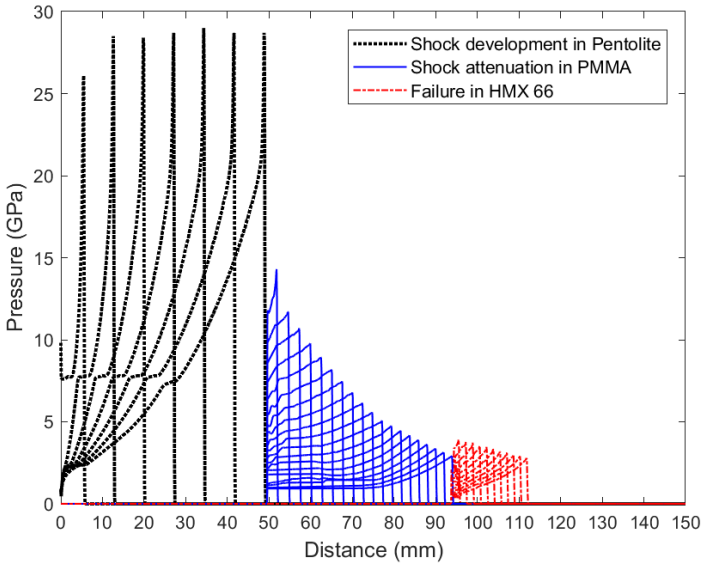


그림 15c. Pressure evolution for the No Go case of HMX 66

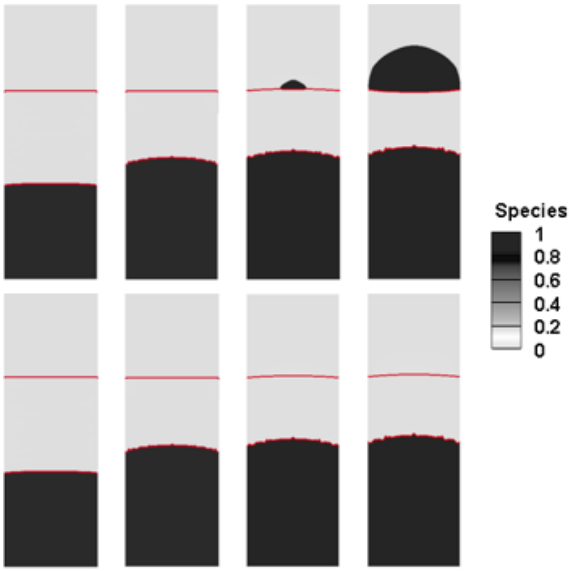


그림 16a. Go and No Go cases for HMX 95. The red line indicates the level-set boundary of the PMMA gap at t = 8, 16, 19 and 21 μs (from left to right)

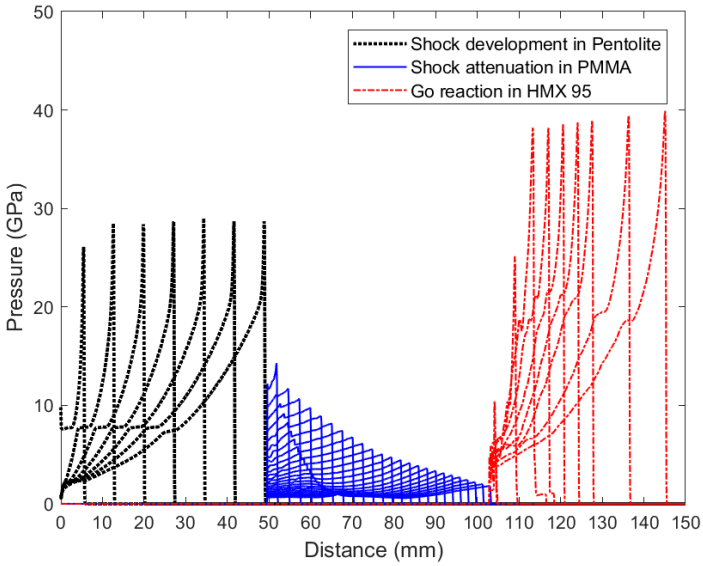


그림 16b. Pressure evolution for the Go case of HMX 95

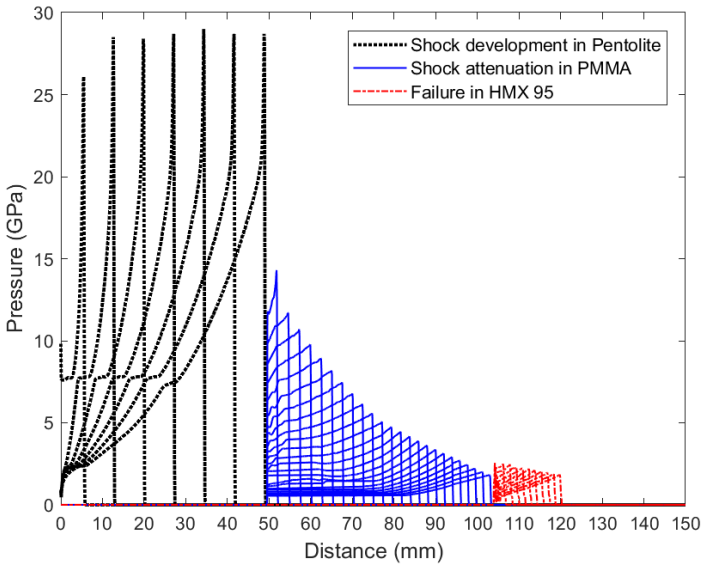


그림 16c. Pressure evolution for the No Go case of HMX 95

결과 실제 두께에 따른 압력의 시험 결과와 거의 일치함을 확인할 수 있다. PMMA의 임피던스(impedance)가 Donor 화약보다 낮기 때문에 경계 면을 가로지를 때 충격파의 압력이 불연속적으로 감소한다. 경계 면을 가로 지른 뒤, PMMA의 밀도는 충격파의 압축으로 인하여 증가하고 압력은 식 26에 의하여 계산된다. 충격파가 PMMA를 가로지르면서 압축으로 인해 에너지가 소실되므로, 그에 대한 영향으로 압력 감쇠가 발생한다.

5.5 LSGT : Donor-Gap-Acceptor

세 화약에 대한 Donor-Gap-Acceptor 쌍에 대한 전산 모사를 수행했다. 전체 길이는 150 mm 이고, 각 경우에 대한 Gap 및

Acceptor의 길이는 표 6에 제시되어 있다. PMMA에서 감쇠 과정을 거친 충격파가 Acceptor로 투과 되면, 식 1에서 보는 바와 같이 Acceptor의 반응은 0.01이 되기 까지 거의 발생하지 않는다. Go 반응의 경우 반응 진척도가 0.01에 도달하여, 그 이후 폭굉으로 천이가 발생한다. 반면, No Go 반응은 반응 진척도가 0.01에 도달하지 못한다.

그림 14a는 RDX 25의 Go와 No Go 경우에 대한 반응 양상을 보여준다. PMMA에서 Acceptor로 파가 전파될 때, 둘 사이 경계 면의 중간 점의 반응 진척도가 가장 크다. 이 점에서의 반응도가 0.01에 도달할 때, 그림 14a의 Go case와 같이 폭발 반응이 일어나게 된다. 이는 폭발 반응을 일으키는데 필요한 임계 에너지(Threshold energy)를 넘었기 때문에 발생하는 현상이다. 그림 14b와 14c는 RDX 25의 시간에 따른 파의 전파 과정을 보여준다. 폭굉파가 시간이 지남에 따라 완전 발달 되고 있음을 확인할 수 있다.

HMX 66은 RDX 25보다 더 민감한 화약이므로, 그림 15a와 같이 더 두꺼운 임계 두께를 나타낸다. 또한, 15b에서 보는 바와 같이 완전 발달되는데 더 빠른 시간이 걸린다는 것을 확인할 수 있다. HMX 95는 알루미늄과 AP를 둘다 포함하지 않고, 주성분을 가장 많이 포함하고 있기 때문에 그림 16a에서 보는 바와 같이 가장 두꺼운 임계 두께를 지닌다. 그리고 그림 16b에서와 같이 세 화약 중 가장 빨리 완전 발달된 폭굉파를 형성하는 것을 확인 할 수 있다.

제 6 장 결론

다양한 성분을 포함하는 복합화약들의 연소 특성을 모사하기 위해 압력 기반 반응속도 모델이 결정되었고, Unconfined rate stick와 LSGT 시험 및 전산 모사를 통해 검증되었다. 모든 화약들의 크기 효과와 충격 민감도를 정확히 예측했고, RDX 및 HMX의 폭발 반응에 알루미늄 및 AP 첨가가 미치는 영향을 구현했다. AP에서 제공되는 산소와 알루미늄의 반응으로 인해 폭발의 임펄스와 반응 시간이 증가한 것을 확인했다. 향후, 알루미늄의 반응이 따로 고려될 수 있는 수치해석 연구가 진행되면 본 연구를 더 잘 보완할 수 있을 것으로 기대된다.

참고문헌

[1] Lee E. L. and Tarver C. M., "Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives", Physics of Fluids, 23(12) (1980) pp. 2362-2372.

[2] Souers P. C., Anderson S., Mercer J., McGuire E. and Vitello P., "JWL++: A simple Reactive Flow Code Package for Detonation", Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 25(2) (2000) pp. 54-58.

[3] Kim B. H., Park J., Lee K. and Yoh J. J., "A reactive flow model for heavily aluminized cyclotrimethylene-trinitramine", Journal of Applied Physics, 116(2) (2014) pp. 1-9.

[4] Kim B. H., Park J. S. and Yoh J. J., "Analysis on shock attenuation in gap test configuration for characterizing energetic materials", Journal of Applied Physics, 119 (2016).

[5] Xiang D. L., Rong J. L., and Li J., "Effect of Al/O Ratio on the Detonation Performance and Underwater Explosion of HMX-based Aluminized Explosives", Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 39 (2014) pp. 65-73.

[6] Xiang D. L., Rong J. L. and He X., and Feng Z., "Underwater Explosion Performance of RDX/AP-based Aluminized Explosives," Central European Journal of Energetic Materials, 14 (2017) pp. 60-76.

[7] Kim W. H., Gwak M.C. and Yoh J. J., "Formation of double front detonations of a condensed-phase explosive with powdered aluminium", Combustion Theory and Modelling, (2018) pp. 378-393.

[8] Eyring H., Powell R. E., Duffey G. H., and Parlin R. B., "THE STABILITY OF DETONATION", Princeton University, (1948) pp. 132-143

[9] Wackerle, J., Johnson, J. O. and Halleck, P. M., "Shock initiation of high-density PETN," 6th symposium on detonation, ACR-221, LA-UR-76-1201, (1976) pp. 20-29.

[10] Wackerle, J., Rabie, R. L., Ginsberg, M. G. and Anderson, A. B., "A shock initiation study of PBX-9404," in proceedings of the symposium on high dynamic pressure, LA-UR-78-

1219, (1978), pp. 127-139.

[11] Yoh J. J. and Kim K. H., "Shock compression of condensed matter using Eulerian multi-material method: Application to multidimensional shocks, deflagration, detonation, and later ablation," Journal of Applied Physics. 103 113507 (2008).

[12] Piacesi D. jr., "Numerical Products from a Point-initiated Explosive Cylinder," Naval Ordnance Laboratory, NOLTR-66-150 (1967) pp. 1-27.

[13] Guilkey J. E., Harman T. B., and Banerjee B., "An Eulerian-Lagrangian approach for simulating explosions of energetic devices," Computers and Structures, 85 (2007) pp. 660-674.

[14] Elek P. M., Dzingalasevic V. V., Jaramaz S. S., and Mickovic D. M., "Determination of detonation products equation of state from cylinder test: analytical model and numerical analysis," Thermal Science, 19 (2015) pp. 35-48.

[15] Tang P. K., "A study of the overdriven behaviors of HMX 95 and PBX-9502," Report No. LA-UR-98-3365, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (1998).

[16] Fried L. E., Howard W. M., and Souers P. C., "Cheetah 2.0 user's manual," Report No. UCRL-MA-117541 Rev. 5, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, (1998).

[17] Steinberg, D. J., "Equation of state and strength properties of selected materials," Report No. UCRL-MA-106439, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore (1996) pp. 1-7.

[18] Kobylkin I. F., "Critical Detonation Diameter of Highly Desensitized Low-Sensitivity Explosive Formuations", Combust. Explos. Shock Waves 45(6), (2009), pp. 732-737.

[19] Erkman J. O., Edwards, D. J., and Clairmont, A. R, Jr, "Calibration of the NOL large scale gap test; Hugoniot data for polymethyl methacrylate", NAVAL ORDNANCE LAB WHITE OAK MD, (1973) p. 63.

Abstract

A determination and verification of pressure driven reaction model for simulating combustion characteristics of energetic materials

Donghyeon Baek

Department of Mechanical and Aerospace Engineering

The Graduate School

Seoul National University

Metalized high explosives effectively tailor the explosion impulse at lowered detonation pressures of common high performance explosives such as RDX ($C_3H_6O_6N_6$), HMX ($C_4H_8O_8N_8$) and PETN ($C_5H_8O_{12}N_4$). The presence of aluminum with and without ammonium perchlorate (AP) allows the subsequent burning for longer and sustained reactions of enhanced blast explosives. The modeling of reaction rate laws for four explosives with varied amounts of Al, AP, Binder, RDX, HMX and PETN is reported. The model validation included the rate stick test for understanding the explosive reaction of the four samples and the large-scale gap test for determining their ignition sensitivity. The experimental results confirmed the accuracy of the model in simulating the shock sensitivity and the size effects before detonation failure. The effect of enhanced blast of these explosives in the presence of Al and AP is also reported.

Keywords: RDX, HMX, PETN, Aluminum, Enhanced blast, Ammonium perchlorate, Rate stick, Gap test

Student Number: 2017-27686