

## Analiza primenljivosti jednačina stanja pri proračunu detonacionih karakteristika eksploziva

Dr Radun Jeremić, dipl.inž.<sup>1)</sup>  
Mr Radenko Dimitrijević, dipl.inž.<sup>1)</sup>

Dat je proračun teorijskih vrednosti detonacionih karakteristika nekoliko vrsta eksploziva pri čemu su, za opisivanje ponašanja gasovitih produkata detonacije, primenjene različite jednačine stanja. Ravnotežni sastav produkata detonacije izračunavan je primenom metode minimizacije slobodne energije. Numerički model detonacije realizovan je u programskom paketu PASCAL. Kao kriterijum za ocenu numeričkog modela i primenjene jednačine stanja, uzeto je prosečno odstupanje izračunatih i eksperimentalnih vrednosti pritiska i brzine detonacije. Rezultati pokazuju da su za proračun detonacionih karakteristika eksploziva najpogodnije BKW i JCZ jednačine stanja.

*Ključne reči:* Detonacija, jednačina stanja, brzina detonacije, pritisak detonacije, eksplozivi.

### Uvod

DETONACIJA je složen proces koji se istovremeno odvija prema termodinamičkim i prema hidrodinamičkim zakonima. Zbog svoje složenosti, mehanizam i kinetika hemijskih reakcija u detonacionom talasu još uvek nisu dovoljno istraženi. Osnovni razlog za to su veliki pritisak (do 40 GPa) i temperatura (do 4000 K) koji vladaju u zoni hemijskih reakcija, zbog čega je primena različitih mernih metoda izuzetno otežana.

S druge strane, postoji stalna potreba za pouzdanim predviđanjem vrednosti detonacionih parametara različitih eksplozivnih materija. Ovaj problem je najpre rešavan primenom hidrodinamičke teorije detonacije, koju su postavili Chapman i Jouget, prema kojoj se ravnoteža u produktima detonacije uspostavlja trenutno. U tom smislu produkti detonacije se tretiraju kao fluid velike gustine, nepromenljivog sastava, bez primesa čvrstih čestica ili drugih nehomogenosti. Taj model je poznat kao stacionarna ili idealna detonacija.

Savremene teorije detonacije uzimaju u obzir širinu zone hemijske reakcije i brzinu hemijskih reakcija u njoj. Realni produkti detonacije predstavljaju smešu nakoliko gasova čiji se ravnotežni sastav menja s promenom stanja, brzinom koju diktiraju zakoni hemijske kinetike. Pri tome se uzima u obzir i prisustvo čvrstih komponenata u produktima detonacije čiji sastav, takođe, varira s kretanjem gasova.

Pored mehanizma i kinetike hemijskih reakcija u detonacionom talasu, jedan od ključnih problema za opisivanje realnog sistema je iznalaženje najpovoljnijeg oblika jednačine stanja produkata detonacije koja će davati najpouzdanije rezultate za što širi spektar eksplozivnih materija i za različite gustine.

Utvrđivanje opšteg teorijskog oblika jednačine stanja kondenzovanih eksplozivnih materija nije moguće, zbog teškoća u proračunu statističkih suma i neaditivnosti potencijala međumolekularnih dejstava.

Povezivanjem teorijskih predstava o ponašanju produkata detonacije pri visokim gustinama, temperaturama i pritiscima, s odgovarajućim eksperimentalnim rezultatima, moguće je doći do odgovarajućih poluemprirskih jednačina stanja produkata detonacije kondenzovanih eksplozivnih materija.

U tom smislu, po konvenciji, jednačina stanja predstavlja podešen (kalibrisan) određeni izraz kojim se opisuju osobine materijala u nekom ograničenom području i koji omogućuje izračunavanje karakteristika fizičkog sistema uz odgovarajući stepen aproksimacije [1].

U literaturi je dat veliki broj različitih jednačina stanja koje se primenjuju za opisivanje ponašanja gasovitih produkata detonacije. S tog aspekta razmotrene su jednačine stanja koje se danas najčešće koriste pri numeričkom modeliranju procesa detonacije.

### JWL jednačina stanja

Ponašanje produkata detonacije dosta često se u literaturi opisuje jednačinom Jones–Wilkins–Lee ili JWL jednačinom stanja [2]:

$$p = A \left( 1 - \frac{\omega}{R_1 \eta} \right) e^{-R_1 \eta} + B \left( 1 - \frac{\omega}{R_2 \eta} \right) e^{-R_2 \eta} + \frac{\omega E}{\eta} \quad (1)$$

Njoj odgovarajuća jednačina izentropije može da se predstavi u sledećem obliku:

$$p_s = A e^{-R_1 \eta} + B e^{-R_2 \eta} + C \eta^{-(\omega+1)} \quad (2)$$

gde su:  $A$ ,  $B$  i  $C$  – linearni koeficijenti,  $R_1$ ,  $R_2$  i  $\omega$  – nelinearni koeficijenti,  $\eta = \rho_0/\rho$  – odnos početne gustine eksplozivne materije i gustine gasovitih produkata detonacije u određenom trenutku,  $E$  – unutrašnja energija (energija detonacije) po jedinici zapremine.

<sup>1)</sup> Vojna akademija VJ, 11000 Beograd, Ratka Resanovića 1

Koeficijenti u JWL jednačini stanja određuju se na osnovu eksperimentalno izmerenih vrednosti parametara detonacije. Podaci za neke eksplozive dati su u tabeli 1 [2].

**Tabela 1.** Parametri u JWL jednačini stanja

Eksploziv	$\rho_0$ (g/cm <sup>3</sup> )	$A$ (Mbar)	$B$ (Mbar)	$C$ (Mbar)	$R_1$	$R_2$	$\omega$	$E$ (Mbar m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> )
HMX	1,891	7,783	0,707	0,006	4,20	1,00	0,30	0,105
HNS	1,650	4,631	0,089	0,013	4,55	1,35	0,35	0,0745
Pentrit	1,770	6,170	0,169	0,007	4,40	1,20	0,25	0,101
TNT	1,630	3,712	0,032	0,010	4,15	0,95	0,30	0,07
Tetrit	1,730	5,868	0,107	0,008	4,40	1,20	0,28	0,082
PBX-9407	1,600	5,731	0,146	0,012	4,60	1,40	0,32	0,086
Oktol 78/22	1,821	7,486	0,134	0,012	4,50	1,20	0,38	0,096
Pentolit 50/50	1,70	5,409	0,094	0,010	4,50	1,10	0,35	0,081

Očigledno je da JWL jednačina stanja ima skoro čisto empirijsku osnovu. Kao takva, najviše se primenjuje pri proračunima rasprskavanja obloge većih eksplozivnih punjenja pod dejstvom pritiska produkata detonacije.

U poslednje vreme koristi se i prošireni oblik ove jednačine koji je poznat kao JWLB jednačina stanja [3]:

$$p = \sum_i A_i \left(1 - \frac{\lambda}{R_i \eta}\right) e^{-R_i \eta} + C \left(1 - \frac{\lambda}{\omega}\right) \eta^{-(\omega+1)} + \frac{\lambda E}{\eta} \quad (3)$$

gde je:

$$\lambda = \sum_i (A_i \lambda_i + B \lambda_i) e^{-R_i \lambda_i} + \omega \quad (4)$$

Međutim, parametarizacija ove jednačine stanja za sada je izvršena samo za mali broj eksploziva.

### JCZ jednačina stanja

Jednačina stanja, koju su dali Jacobs, Cowperthwaite i Zwisler (JCZ), zasnovana je na fizičkom modelu ponašanja molekula produkata detonacije u uslovima visokog pritiska i temperature [4]:

$$P = \frac{G(V, T, \varphi) n R T}{V} + P_0(V, \varphi) \quad (5)$$

gde  $P$ ,  $n$ ,  $R$ ,  $T$  i  $V$  predstavljaju pritisak, broj molova, univerzalnu gasnu konstantu i zapreminu, respektivno.

Funkcije Gruneisena,  $G$ , i unutrašnjeg pritiska,  $P_0$ , koriste funkciju s dva eksponencijalna člana (EXP-6 potencijalna funkcija) za opisivanje međumolekulskog dejstva produkata detonacije:

$$\varphi(r) = \varepsilon \left[ \left( \frac{6}{\eta - 6} \right) \exp \left[ \eta \left( 1 - \frac{r}{r^*} \right) \right] - \left( \frac{\eta}{\eta - 6} \right) \left( \frac{r^*}{r} \right)^6 \right] \quad (6)$$

gde su:  $r$  – rastojanje između molekula,  $\varepsilon$  – dubina potencijalne jame,  $r^*$  – karakteristična dimenzija molekula,  $\eta$  – konstanta.

U literaturi su date i različite modifikacije JCZ jednačine stanja (JCZ3, JCZS) čija je suština u iznalaženju parametara EXP-6 potencijalne funkcije koji će dati najbolje slaganje s eksperimentalnim rezultatima [3].

### BKW jednačina stanja

Za proračun teorijskih vrednosti parametara detonacije eksploziva i različitih eksplozivnih sastava često se primenjuje poznata poluempirijska jednačina Becker–Kristiako–wsky–Wilsona [1], tzv. BKW jednačina

stanja:

$$\frac{pV}{RT} = 1 + X e^{\beta X} \quad (7)$$

gde su:

$$X = \frac{K}{V(T + \theta)^\alpha}$$

$$K = b \sum_{i=1}^n x_i k_i$$

$K$  – molarni kovolumen smeše gasovitih produkata,  $k_i$  – molarni kovolumen  $i$ -tog gasovitog produkta,  $x_i$  – molarni udeo  $i$ -tog gasovitog produkta ( $n_i/n$ ),  $V$  – molarna zapremina smeše gasovitih produkata  $V = 1/\rho n$  (cm<sup>3</sup>/mol),  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\theta$  i  $b$  – empirijske konstante.

Osnovni problem kod BKW jednačine stanja je utvrđivanje vrednosti empirijskih konstanti koje će dati zadovoljavajuće slaganje s eksperimentalnim rezultatima za širok spektar različitih eksplozivnih sastava u realnom opsegu gustina. Zato je parametarizacija BKW jednačine stanja bila predmet istraživanja mnogih autora.

Na osnovu eksperimentalnih podataka Mader [1] je definisao dva tipa vrednosti parametara u BKW jednačini stanja: RDX i TNT tip, zavisno od sastava eksplozivne materije (BKW1), dok su Fried i Souers [5], na osnovu rezultata ispitivanja 32 eksploziva pomoću tzv. cilindar testa, dali jedinstvene vrednosti konstanti, pri čemu su izvršili i fitovanje vrednosti kovolumena gasovitih produkata radi dobijanja što boljeg slaganja s eksperimentalnim rezultatima. (BKW2).

Vrednosti parametara BKW1 i BKW2 tipa jednačine stanja date su u tabeli 2.

**Tabela 2.** Vrednosti empirijskih konstanti u BKW jednačini stanja i kovolumena gasovitih produkata detonacije

Tip parametra	$\beta$	$b$	$\alpha$	$\theta$	Kovolumeni								
					H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>	CO	NH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	NO	N <sub>2</sub>
RDX tip	0,160	10,91	0,50	400	250	180	350	600	390	476	528	386	380
TNT tip	0,096	12,68	0,50	400	250	180	350	600	390	476	528	386	380
BKW2	0,402	12,31	0,521	3827	226	30,4	305	523	341	754	126	305	369

### Proračun parametara detonacije

Numerički model detonacije, na osnovu kojeg je vršen proračun teorijskih vrednosti detonacionih parametara, zasnovan je na sledećim fundamentalnim jednačinama iz hidrodinamičke teorije detonacije:

1. brzina detonacije:

$$D = V_0 \sqrt{\frac{p_{CJ} - p_0}{V_0 - V_{CJ}}} \quad (8)$$

2. brzina produkata detonacije:

$$w_{CJ} = (V_0 - V_{CJ}) \sqrt{\frac{p_{CJ} - p_0}{V_0 - V_{CJ}}} \quad (9)$$

3. udarna adijabata:

$$U_{CJ} - U_0 = \frac{1}{2} p_{CJ} (V_0 - V_{CJ}) + Q_v \quad (10)$$

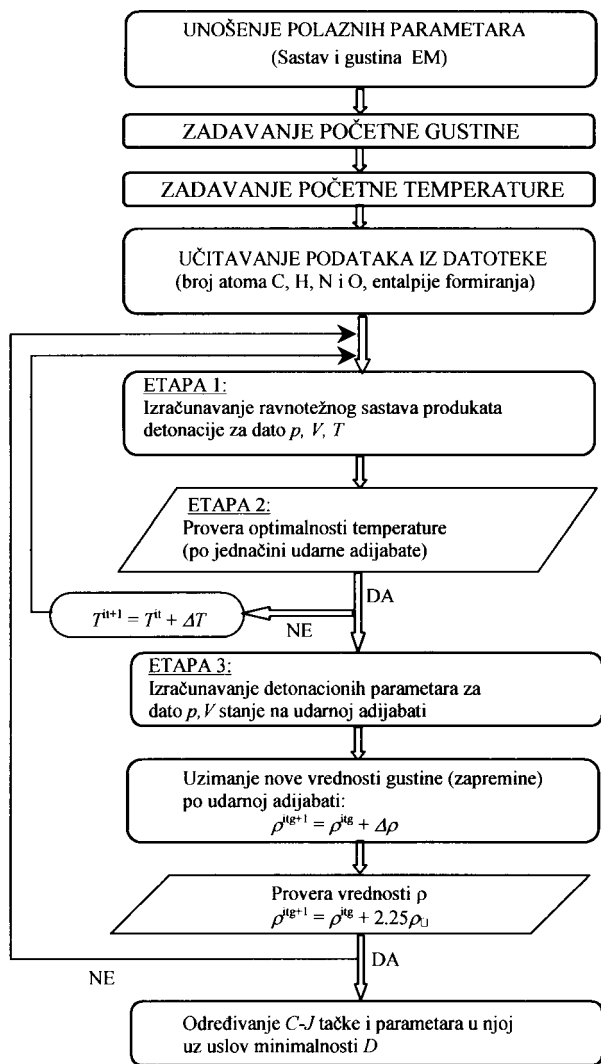
4. uslov tangiranja udarne adijabate i Miheljsoneve prave:

$$-\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{CJ} = \frac{P_{CJ} - P_0}{V_0 - V_{CJ}} = \gamma \frac{P_{CJ}}{V_{CJ}} \quad (11)$$

5. jednačina stanja produkata detonacije:

$$p_{CJ} = f(\rho_{CJ}, T_{CJ}) \quad (12)$$

Za proračun ravnotežnog sastava produkata detonacije, primenjena je metoda minimizacije slobodne energije [1,6]. Uprošćena blok-šema proračuna prikazana je na sl.1.

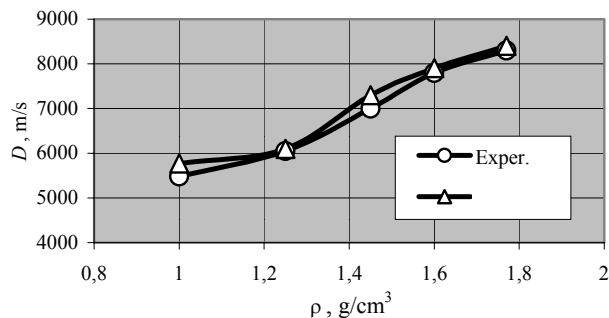


Slika 1. Blok-dijagram postupka za proračun detonacionih parametara kondenzovanih eksplozivnih materija

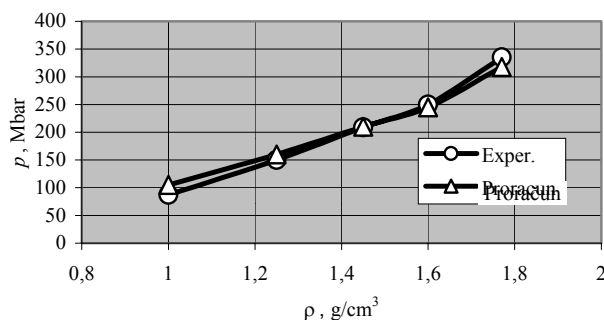
Prema ovom numeričkom modelu napravljen je računarski program za proračun detonacionih parametara u programskom paketu PASCAL.

Primenom BKW1, BKW2 i JWL jednačine stanja izvršen je proračun detonacionih parametara za nekoliko eksploziva. Rezultati proračuna brzina i pritiska detonacije dati su u tabelama 3 i 4. U istim tabelama dati su i literaturni rezultati dobijeni primenom JWLB i JCZ jednačina stanja.

Na slikama 2 i 3 prikazane su za pentrit eksperimentalne i teorijske zavisnosti brzine detonacije i pritiska detonacije od gustine. Teorijske vrednosti dobijene su proračunom uz korišćenje BKW jednačine stanja.



Slika 2. Zavisnost brzine detonacije pentrita od gustine



Slika 3. Zavisnost pritiska detonacije pentrita od gustine

Očigledno je da se primenom BKW jednačine stanja dobija relativno dobro slaganje između eksperimentalnih i teorijskih vrednosti pritiska i brzine detonacije pentrita u dosta širokom opsegu gustina.

Dobijeni rezultati pokazuju da se, od tri jednačine stanja primenjene u radu, najmanje odstupanje vrednosti pritiska i brzine detonacije dobija primenom BKW jednačine stanja s dva tipa vrednosti konstanti - TNT tip i RDX tip (BKW1).

BKW jednačina stanja s jedinstvenim vrednostima konstanti (BKW2) daje veće odstupanje rezultata. Međutim, njena prednost je u tome što je primenljiva za sve eksplozivne sastave promenljivih gustina bez izmene

Tabela 3. Brzine detonacije nekih eksploziva dobijene primenom različitih jednačina stanja

Eksploziv	Gustina (g/cm <sup>3</sup> )	D <sub>exp</sub> (m/s)	BKW1		BKW2		JWL		JWL <sup>*</sup>		JCZ3 <sup>*</sup>	
			D (m/s)	Δ %	D (m/s)	Δ %	D (m/s)	Δ %	D (m/s)	Δ %	D (m/s)	Δ %
TNT	1,63	6930	7136	2,97	7399	3,69	6654	3,98	6717	3,07	6596	4,82
Tetrit	1,70	7560	7463	1,28	8029	6,20	7475	1,12	-	-	7513	0,62
Pentrit	1,77	8300	8424	1,49	8657	4,30	7796	6,07	8304	0,05	8183	1,41
RDX	1,80	8800	8795	0,06	9114	3,57	8418	4,34	-	-	8742	0,66
HMX	1,90	9150	9258	1,18	9661	5,58	8788	3,96	-	-	9160	0,11
Pentolit (50/50)	1,70	7530	7592	0,82	8048	6,88	7255	3,65	-	-	-	-
Oktol (78/22)	1,82	8480	8749	3,17	9047	6,69	8126	4,17	8390	1,06	-	-
Prosečno odstupanje (%)			1,57		5,27		3,90		1,39		1,52	

Tabela 4. Pritisici detonacije nekih eksploziva dobijeni primenom različitih jednačina stanja

Eksploziv	Gustina (g/cm <sup>3</sup> )	$p_{exp}$ (kbar)	BKW1		BKW2		JWL		JWL <sup>B</sup> *		JCZ <sup>3</sup> *	
			$P$ (kbar)	$\Delta$ %	$P$ (kbar)	$\Delta$ %	$P$ (kbar)	$\Delta$ %	$P$ (kbar)	$\Delta$ %	$P$ (kbar)	$\Delta$ %
TNT	1,63	190	212	0,95	209	0,48	208	0,95	185	11,90	-	
Tetrit	1,70	285	253	11,2	249	12,6	273	4,21	-	-	-	
Pentrit	1,77	300	300	0	310	0,33	306	2,00	291	3,00	-	
RDX	1,80	338	339	0,30	335	0,89	326	3,55	-	-	-	
HMX	1,90	393	394	0,25	392	0,25	412	4,57	-	-	-	
Pentolit (50/50)	1,70	255	256	0,39	258	1,18	251	1,57	-	-	-	
Oktol (78/22)	1,82	342	337	1,46	331	3,22	329	3,80	335	2,05	-	
Prosečno odstupanje (%)			2.08		2.71		2.95		5.65			

\* prema referenci [3]

vrednosti konstanti. Daljom optimizacijom vrednosti konstanti, kao i numeričkog modela, odstupanja se mogu smanjiti, čime bi ova jednačina bila vrlo pogodna za proračun teorijskih vrednosti detonacionih karakteristika eksploziva.

JWL jednačina stanja je skoro potpuno empirijska, tako da se za svaki sastav i gustinu eksploziva mora vršiti njena parametarizacija, što je njen glavni nedostatak. Zato se ona ne može koristiti za predviđanje detonacionih karakteristika novih eksplozivnih sastava. JWL jednačina stanja daje dobre rezultate pri proračunu širenja i rasprskavanja košuljica projektila, pa se u te svrhe najviše i primenjuje.

Modifikacijom JWL jednačine stanja dobijena je JWL<sup>B</sup> jednačina koja bi trebalo da daje tačnije rezultate, ali za sada nema dovoljno literaturnih podataka o njoj parametarizaciji za različite eksplozive.

Prema literaturnim podacima, JCZ<sup>3</sup> jednačina stanja s optimizovanim vrednostima parametara daje najtačnije rezultate. Baker je izvršio proračun za 47 različitih eksploziva pri čemu je dobio prosečno odstupanje brzine detonacije od 1,63% [3]. Podatke za pritisak detonacije, kao i za optimizovane vrednosti parametara nije dao. S teorijskog aspekta, JCZ jednačina stanja najrealnije opisuje ponašanje gasovitih produkata detonacije, jer je zasnovana na fizičkom modelu ponašanja molekula gasova u uslovima visokih pritisaka i temperatura. Stoga ona ima univerzalni karakter i trebala bi imati prednost u odnosu na ostale jednačine stanja koje su poznate iz literature.

### Zaključak

Pri numeričkom modeliranju procesa detonacije prednost

imaju jednačine stanja koje su primenljive za različite eksplozivne sastave i u širokom dijapazonu gustina. Na osnovu dobijenih rezultata za nekoliko eksplozivnih sastava može se zaključiti, da su za proračun detonacionih karakteristika eksploziva najpogodnije BKW i JCZ jednačine stanja. Za pouzdaniju ocenu neophodno je izvršiti sistematske proračune detonacionih parametara različitih eksploziva u realnom opsegu gustina i izvršiti poređenje s eksperimentalnim vrednostima.

### Literatura

- [1] MADER,C.L. *Numerical modeling of detonations*. University of California Press, Los Angeles, 1979.
- [2] GUIDRY,M. i dr. *Parameterization of the BKW and JCZ Equations of State for Explosives*. FJSRL Technical report 78-0003, Frank J. Seiler Research Laboratory, USAF Academy, Colorado, 1978.
- [3] BAKER,E.L. *Optimized JSZ3 procedures for the Detonation Properties of Explosives*. 11. internacionalni simpozijum o detonaciji, Snowmass, Colorado,1998.
- [4] HOBBS,M.L. i dr. *Extension of the JCZ Product Species Data Base*. 11. internacionalni simpozijum o detonaciji, Snowmass, Colorado,1998.
- [5] HOWARD,M. i dr. *Kinetic Modeling of Non-ideal Explosives With Cheetah*. 11. internacionalni simpozijum o detonaciji, Snowmass, Colorado,1998.
- [6] SUČESKA,M. *Reološka i detonaciona svojstva livenih kompozitnih eksploziva sa polimernim vezivom*. Doktorska disertacija, VVTŠ, Zagreb, 1991.

Rad primljen: 24.4.2002.god.

