

JWL++ 반응속도식의 미정상수 결정을 위한 화약의 이론적 모델

김보훈* · 여재익**

Analytic model to determine the unknown parameters of JWL++ rate equation

Bohoon Kim*, Jai-ick Yoh**

ABSTRACT

The analytical model determining the unknown parameters of reaction rate equation which is necessary to simulate the combustion phenomena of energetic materials is proposed. The relationship between detonation velocity and size effect of energetic materials is derived from simplified JWL++ model. Theoretical model is used to investigate the combustion characteristics of certain energetic materials before running Hydrocode by pre-determination of unknown parameter, b . When $b=0.8$, the behavior of HANFO gunpowder is in the form of concave-up and ANFO explosives has the concave-down form in case of $b=1.5$. The analytical model provides efficient and highly accurate results rather than previous method which simulated the unconfined-rate-stick via the numerical means.

Key Words : Energetic materials, Rate equation, Analytic model

고에너지 물질(Energetic Materials)은 연료 물질과 산화제로 이루어진 복합체로 외부에서 에너지가 가해지면 화학적 엔탈피가 열적 엔탈피로 급격하게 변화하는 물질이다.

고에너지 물질의 폭발 현상을 이해하고 화약이 충전된 무기체계의 성능과 취약성을 검증하기 위해서 다양한 형태의 실험적 시도들이 있었다.[1,2] 그러나 실험적 방법은 막대한 시간과 비용을 요구하고 고온 고압이라는 극한조건으로 인해 높은 위험성을 갖고 있어서 고에너지 물질의 실험적인 접근이 쉽지 않다. 이에 따라 최근 수치해석적 연구에 대한 필요성이 점차 증대되고 있는 실정이다. 수치해석에 기반한 폭발현상 해석은 시험을 통해 얻기 힘든 다양한 해석 결과를 비교적 용이하게 제공하며, 여러 형태의 전산모의 시험을 할 수 있기 때문에 비용절감은 물론 고에너지 물질을 활용한 화약의 개발기간을 단축시킬 수 있는 장점이 있다.

그러나 아직 수치해석을 통해 고에너지 물질의 폭발현상을 연구하기 위해서 해결해야 할 부분이 많이 남아 있다. 먼저 화약의 정확한 구성관계식(constitutive relation)을 파악해야 하는 문제가 있다. 구성관계식은 상태방정식(equation of state)과 반응속도식(reaction rate equation)으로 이루어져 있다. 이중 상태방정식은 화약의 반응 전 고체 상태와 반응 후 폭발반응으로 형

성된 가스 상태를 기술하는 관계식을 의미하는데, 현재까지 개발된 고에너지 물질의 상태방정식은 적용되는 화약에 따라 차이가 있지만 해석에 큰 지장이 없는 수준에서 양호한 정보를 제공한다. 그러나 반응속도식은 고에너지 물질에 따른 고유한 특성이기 때문에 각각의 화약에 대한 폭발특성을 잘 묘사할 수 있는 관계식을 결정해야 한다. 이를 위하여 화약의 반응특성을 기술할 수 있는 I&G 모델(Ignition & Growth model)과 JWL++ 모델(Jones-Wilkins-Lee++ model)의 반응속도식 모델이 제안되었다.

I&G 모델[3]은 Tarver와 Edward Lee에 의해 고안된 폭굉을 기반으로 하는 연소 현상을 묘사하기 위한 반응식으로 현재 AUTODYN을 비롯한 대부분의 상용코드에서 폭넓게 쓰이고 있다. I&G 모델은 hotspot의 발생 및 그에 의한 영향을 고려하며, 반응물과 생성물의 상태방정식과 1개의 생성물의 분율 관계식으로 구성되어 있으며 초고속으로 전파되는 반응파(reacting wave) 생성에 관련된 폭굉 반응 해석에 가장 적합한 모델로 알려져 있다. 폭굉 현상은 연소 반응이 급격하게 발생하여 압력의 팽창과 구배가 지배적인 요소로 작용하기 때문에 초음속으로 전파되는 화염이 있는 문제에 대해서는 압력을 고려하는 I&G 모델이 적합하나, 일반적으로 연소 반응이 느려 화염이 아음속으로 전파되는 폭연 현상의 경우는 온도에 큰 영향을 받기 때문에 I&G 모델을 적용하는데 한계가 있다. 또한 I&G 모델이 포함하는 12개의 미정상수(unknown parameters)

* 서울대학교 기계항공공학부

** 연락처, jjyoh@snu.ac.kr

TEL : (02)-880-9334 FAX : (02)-887-2662

들을 동시 다발적으로 결정하는데 비교적 많은 시간과 비용이 요구된다는 단점이 있다.

JWL++ 모델[4]은 I&G 모델을 간략화한 형태로, 모델을 구성하는 미정상수의 수가 적기 때문에 실험이나 경험식을 통해서 용이하게 파라미터들을 구할 수 있다는 장점이 있다. I&G 모델로부터 몇 가지 가정에 의해 방정식이 간략화되었으나, 고에너지 물질의 연소현상에 대한 모사를 I&G 모델과 거의 유사한 수준에서 해석할 수 있다는 강점이 있다. 이러한 장점에도 불구하고, 아직 이 모델에 대한 연구가 대체적으로 이루어져 있지 않은 상태이며, 특히 JWL++ 모델의 질량분율 방정식(mass fraction equation)의 미정상수를 결정하는 방법론이 아직 제대로 정립되어 있지 않은 실정이다.

JWL++ 모델을 사용한 기존의 연구[5]에서는 고에너지 물질의 미정상수값을 결정하기 위해 연소장 전체를 반복적으로 풀어 얻은 수치해석 결과를 실험과 비교하였다. 이 방법은 상당한 크기의 비용과 시간이 소요되는 연소장 해석을 실험 결과와 동일한 결과를 얻을 때까지 계속적으로 수행해야 하는 비효율성을 갖고 있으며, 수치해석을 통해 도출된 결과가 사용된 격자의 개수와 적용된 수치해석 기법들에 따라 달라질 수 있기 때문에, 정확한 미정상수값을 결정하는데 한계가 있었다. 따라서 기존의 JWL++ 모델의 미정상수 결정 방법은 정량적이기 보다는 정성적 측면에서 상수들을 결정하는 수준이라고 할 수 있다.

따라서 본 연구에서는 고에너지 물질의 폭발 현상을 수치해석적 방법으로 해석하기 위한 선행연구로써 I&G 모델 보다 효율적인 반응모델로 알려진 JWL++ 모델을 소개하고, 기존의 방식이 가지고 있는 비효율성과 고비용 등의 문제를 효과적으로 해결함과 동시에 수치해석과 관련된 격자와 기법들에 무관하게 미정상수들을 결정할 수 있는 새로운 방법론을 제시하는 것을 목적으로 한다.

I&G 모델의 질량분율 방정식은 점화(ignition)와 화염의 발달(growth)에 관계된 식들의 합으로 구성되어 있다. 식 (1)은 Lee 등[3]에 의해 제안된 I&G 모델의 반응속도식이다.

$$\frac{dF}{dt} = I(1-F)^b \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 - a \right)^x + G_1(1-F)^c F^d P^y + G_2(1-F)^e F^g F^z \quad (1)$$

여기서 F 는 질량연소율(mass fraction burned)을 의미하며 $I, b, a, x, G_1, c, d, y, G_2, e, g, z$ 는 미정상수이다. 이 상수들을 결정하는 방법으로 실험에 의해 축적된 표본화(sampling)한 데이터베이스

에 대하여 곡률을 계산하고 산출해 나가는 곡선 맞춤(curve fitting) 방식이 있다. 이 수법은 평면 위에 흩어진 점에 대하여 어떤 파형 또는 함수가 측정값과의 제곱오차합을 구하고 그것을 최소가 되도록 하여 각 점으로부터 곡선의 편차를 줄여 나가는 방식이다. 하지만 미정상수들의 값들을 결정할 때 곡선 맞춤 기법과 같은 귀납적 추리는 물리적으로 한계가 있을 수 있다. 모든 고에너지 물질이 각각 다른 연소 거동 특성을 보이고 이 때 미정상수들의 값도 달라진다. 또한 일반적으로 미정상수의 값을 정확히 계산하려면 변수의 개수만큼 방정식이 필요하고, 곡선 맞춤 기법을 도입한다고 해도 I&G 모델은 너무 많은 수의 미결정 상수들의 존재로 인해 그 값을 명확하게 정의하는데 어려움이 있다.

반면, JWL++ 모델은 I&G 모델에 비해 굉장히 간단한 형태로 구성되어 있다. I&G 모델의 첫 번째 텀(I)과 세 번째 텀(G_2)이 생략되고 남은 두 번째 텀(G_1)에서 계수 c 값을 1로, 그리고 $F^d P^y$ 를 $(P+Q)^b$ 와 같다고 가정하면, I&G 모델로부터 JWL++ 모델을 얻을 수 있다. 우리는 인공점성(artificial viscosity)을 의미하는 Q 값을 임의로 조절하면서 JWL++ 모델을 튜닝할 수 있지만, 이를 0으로 무시하면 결과적으로 다음과 같은 수식을 얻는다.

$$\frac{dF}{dt} = GP^b(1-F) \quad (2)$$

여기서, G 는 반응상수(rate constant)이고, b 는 압력기반계수(power dependence on pressure)이다. 이는 물분율의 시간에 대한 상미분 항이 미정상수들의 합과 곱으로 이루어진 간단한 형태의 방정식으로 표현될 수 있음을 의미한다. 여기서 P 는 압력(pressure)이며, 식 (3)과 식 (4)는 반응 전과 후의 압력을 의미한다.

$$P_{unreacted} = \frac{1}{n\kappa} \left(\frac{1}{\nu^n} - 1 \right) \quad (3)$$

$$P_{reacted} = Ae^{-R_1\nu} + Be^{-R_2\nu} + \frac{C}{\nu^{1+w}} \quad (4)$$

식 (3)과 (4)는 질량연소율 항을 이용하여 다음과 같이 통합적으로 표현된다.

$$P_{total} = (1-F)P_{unreacted} + FP_{reacted} \quad (5)$$

기존에는 화약의 크기효과(size effect)를 고려한 고에너지 물질의 연소 시험(unconfined rate stick)에서 도출된 폭굉파의 속도와 고에너지 물질의 반지름간의 관계를 수치해석적인 방법인

Hydrocode[6]를 완전히 풀어 도출된 값과 실험으로 측정된 데이터를 상호 반복비교 함으로써 상태방정식의 미정상수를 결정하였다. 이 방법은 앞서 언급한 대로 비효율적이며 도출된 값이 정량적이지 않기 때문에 문제가 있다고 사료된다. 따라서 기존의 방식이 가지고 있는 비효율성과 고비용 등의 문제를 효과적으로 해결함과 동시에 수치해석과 관련되는 격자와 기법들에 무관하게 미정상수들을 결정할 수 있는 방안으로서 이론적 방법(analytic method)을 제안한다.

$$U_s = D \left(1 - \frac{\langle x_e \rangle}{\sigma R_0} \right) \quad (6)$$

고에너지 물질의 연소 실험(unconfined rate stick)에서 폭굉파의 속도(detonation velocity)는 Eyring 등[7]이 제안한 식 (6)과 같다. 여기서 R_0 는 초기 폭발물의 반경(initial explosive radius)이고, U_s 는 반경 R_0 일 때 폭굉파의 속도(detonation velocity at radius R_0)를 의미한다. D 는 무한 반경에서의 폭굉 파속(detonation velocity at infinite radius)이고, $\langle x_e \rangle$ 는 평균 반응구간의 길이(average reaction zone length)이다. 파라미터 σ 와 반응구간의 통과하는 시간(time to cross the reaction zone) t_e 는 경험적으로 각각 다음과 같이 정의된다.[8]

$$\sigma = \frac{0.4}{(1 - (U_s/D)^2)^{0.5}} \quad (7)$$

$$t_e = \frac{\langle x_e \rangle}{U_s} \quad (8)$$

앞서 제시한 식 (2)는 모두 상수로 이루어져 있는 1계 상미분 방정식이다. 이를 적분하기 위하여 F 에 관계된 항을 좌변으로 넘기고 남은 상수들과 미소 시간항을 우변으로 모아 양변에 적분을 취하면 다음과 같은 방정식을 얻는다. 여기서 I 는 F 항을 포함하는 적분(integral of all F -terms)을 의미한다.

$$I = \int_0^{F_e} \frac{dF}{(1-F)} = G(P_D F_e)^b t_e \quad (9)$$

F_e 는 반응영역(reaction zone)내에서의 질량연소율(burn fraction)을 의미하며, P_D 는 무한 반경에서의 최대 압력(maximum pressure at infinite radius)을 뜻한다. P_m 은 반경 R_0 일 때 최대 압력(maximum pressure at radius R_0)을 의미한다. 특히, F_e 는 무차원 에너지 E_0/E_D 와 무차원 압력

P_m/P_D 에 비례하는 관계에 있기 때문에 무차원 속도의 제곱과 관계한다.

$$F_e = \left(\frac{U_s}{D} \right)^2 \quad (10)$$

또한, 무차원화 된 역반지름(inverse radius)은 식 (10)과 같다.

$$\frac{R_D}{R_0} = \frac{\sigma}{I} F_e^{(b-1/2)} (1 - F_e^{1/2}) \quad (11)$$

R_D 는 무차원 반경(Generalized dimensionless radius)이고, 다음의 식 (12)로 표현된다.

$$R_D = \frac{D}{G_D(P_D)^b} \quad (12)$$

여기서, G_D 는 무한 반경에서의 반응상수(rate constant at infinite radius)이며, P_D 는 무한 반경에서의 최대 압력(maximum pressure at infinite radius)이다.

식 (11)은 U_s/D 와 R_D/R_0 의 관계가 되며, 오직 b 값만이 미지상수로 관계한다. 따라서 관계된 b 값을 조절하면서 무차원화 된 식 (6)과 식 (11)을 도출함으로써 폭굉파의 속도와 역 반지름의 거동을 계산할 수 있다. 결과적으로, 상수 b 를 조절하면서 U_s/D vs. R_D/R_0 의 관계를 도출하는 것이 이론적 방법의 핵심이다.

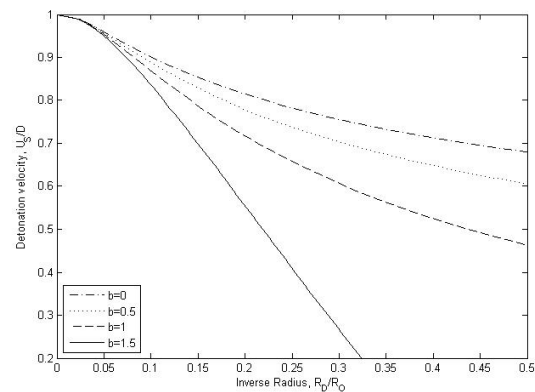


Fig. 1 Solutions of analytic model of JWLL++ model with several b values.

그림 1은 b 값 변화에 따른 폭굉 파속과 고에너지 물질의 반경의 관계를 나타낸 것이다. 상수 b 는 0.5씩 증가시켜 0부터 1.5까지 총 네 가지 경우에 대해서 적용하였다. b 가 1보다 작은 경

우 폭굉 과속과 역반지름 간의 곡선이 아래로 볼록한 형태(concave-up shape)로 나타나며, 그 값이 작을수록 휘어지는 정도가 심하다. 점차 b 값이 1에 근접할수록 직선(straight line)에 가까운 형태가 되며, 다시 1보다 커지면서 위로 볼록한 형태(concave-down shape)로 발달한다.

곡선을 아래로 볼록한 형태를 갖는 고에너지 물질로는 AN계열, potassium계열의 화약 그리고 HANFO 등이 대표적이며, 위로 볼록한 형태를 갖는 고에너지 물질로는 PBX계열, AN-k1a 계열과 ANFO 화약이 있다.

다음 그림 2와 3은 각각 b 값이 0.8과 1.5일 때, 폭굉 과속과 역반지름의 관계가 실험으로 측정된 값들과 매우 근접하게 도출된 이론적 방법의 결과를 나타낸 것이다.

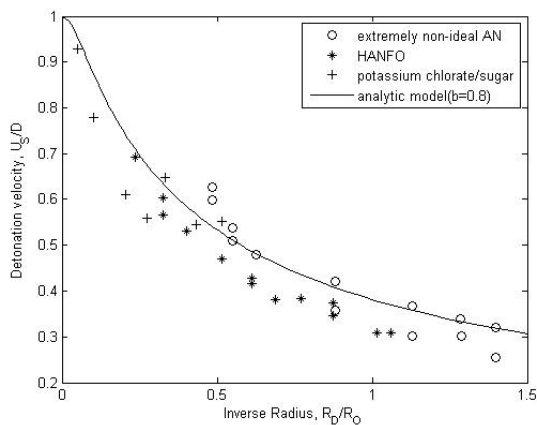


Fig. 2 Concave-up shapes for extremely non-ideal AN(circles), potassium chlorate/sugar(cross) and HANFO(star) with $b=0.8$.

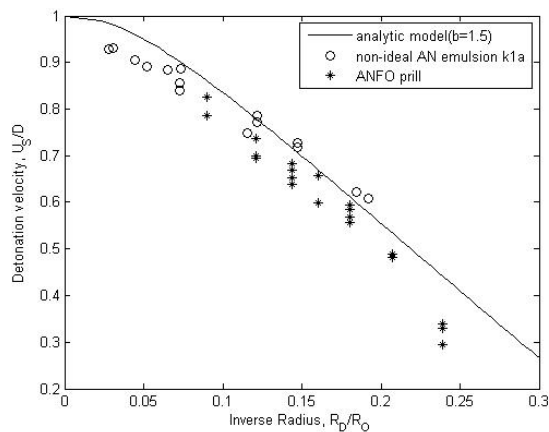


Fig. 3 Concave-down shapes for non-ideal AN emulsion k1a(circle) and ANFO prill(star) with $b=1.5$.

그림 2와 3에서 비교된 고에너지 물질들이 갖는 폭굉 과속의 특성을 본 연구에서 제안한 이론적 방법론에 의해 도출된 결과와 비교함으로써 b 값이 용이하게 결정할 수 있음을 확인할 수 있다.

후 기

본 연구는 고압충격 폭발현상 해석기법 특화연구실의 HH-5 과제와 ADD 위탁과제에 지원을 받아 수행된 것이며, 지원에 대하여 감사드립니다.

참고 문헌

- [1] C.M. Tarver, J.W. Kury, B.R. Don, "Detonation waves in triaminotrinitrobenzene", Journal of applied physics, Vol. 82, No. 8, 1997, pp. 3771-3782.
- [2] C.H. Kim, J.J. Yoh, "Surface chemical reaction of LASER ablated aluminum sample for detonation initiation", Journal of applied physics, Vol. 109, 093510, 2011.
- [3] E.L. Lee, C.M. Tarver, "Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives", Physics of Fluids, Vol. 23, No. 12, 1980, pp. 2362-2372.
- [4] P.C. Souers, S. Anderson, J. Mercer, E. McGuire, P. Vitello, "JWL++: A Simple Reactive Flow Code Package for Detonation", Propellants, Explosives, Pyrotechnics, Vol. 25, 2000, pp. 54-58.
- [5] J.E. Guilkey, T.B. Harman, B. Banerjee, "An Eulerian-Lagrangian approach for simulating explosions of energetic devices", Computers and Structures, Vol. 85, 2007, pp. 660-674.
- [6] K.H. Kim, J.J. Yoh, "Shock Compression of Condensed Matter using Eulerian Multi-material Method", Journal of Applied Physics, Vol. 103, 113507, 2008.
- [7] H. Eyring, R.M. Powell, G.E. Duffey, R.B. Parlin, "The Stability of Detonation", Chem. Rev., Vol. 45, No. 144, 1949.
- [8] P.C. Souers, P. Vitello, "Analytic Model of Reactive Flow", Propellants, Explosives, Pyrotechnics, Vol. 30, No. 5, 2005, pp. 381-385.