論文

로켓 추진제의 익스트림-스케일 상면 두께 예측

여재익*

Predicting Extreme-Thickness of Phase Fronts in HMX- and Hydrocarbon-based Propellants

Jai-ick Yoh*

ABSTRACT

The structure of steady wave system is considered which is admitted by the continuum equations for materials that undergo phase transformations with exothermic chemical reaction. With its theoretical basis in one-dimensional continuum shock structure analysis, the present approach estimates the micro-width of waves associated with phase transformation phenomena. *n*-heptane is selected as the hydrocarbon fuel for evaporation and condensation analysis while HMX is used for melting and freezing analysis of solid rocket propellant. The estimated thickness of evaporation - condensation front of *n*-heptane is on the order of 10^{-2}micron while the HMX melting - freezing front thickness is estimated at 1 micron.

초 록

정상파 시스템의 구조는 발열반응으로 상변화를 하는 물질의 연속방정식에 의해 타당성을 검증받는다. 1차원 연속체 충격 구조 분석에서의 이론적 배경을 기반으로, 상변화 현상과 관련된 파의 마이크로 두께를 산출하였다. 상변화를 하는 물질로써, n-heptane은 탄화수소 연료의 증발과 응축 분석에 사용하였고, HMX은 고체 로켓 연료의 용융과 응고 분석에 사용하였다. n-heptane의 증발-응축 면의 산출 두께는 10^{-2}마이크론 차수이고, 반면에 HMX의 용융-응고 면의 산출 두께는 1 마이크론 차수 이다. 소개된 상면 두께 산출 이론은 실험적으로 얻을 수 없는 방대한 범위의 에너지 물질까지 계산범위를 확장시킬 수 있다.

Key Words : Phase Front Structure(상면 구조), n-heptane, HMX, Energy Materials(에너지 물질), Thermal-Mechanical Modeling(열적-기계적 모델링), Phase Variable (상계변수)

Ⅰ. 서 론

연속체 이론에서 충격파는 유동 양의 빠른 변화가 발생하는 불연속체보다 얇은 지역으로 해석된다. 일반적인 충격파의 두 균일한 최종 상태는 질량, 운동량, 에너지 보존을 만족하는 마이크론 단위의 유한한 길이의 매끄러운 구조를 통해 이어져있다. 본 논문은 연속체 안에서 충격파와 같은 방법으로 전달되는 상면의 두께를 계산하는 새로운 방법을 소개한다. 에너지 물질[1]에 대한 열적-기계적 모델은 서로 다른 상 사이에 존재하는 파 구조의 분석에 사용된다. 특히 상변환(증발과 응축)과 함께 움직이는 액체-기체 경계 분

† 2008년 7월 28일 접수 ~ 2008년 12월 12일 심사완료
* 정회원, 서울대학교 기계항공공학부
교신저자, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr
서울시 관악구 신림동 산 56-1

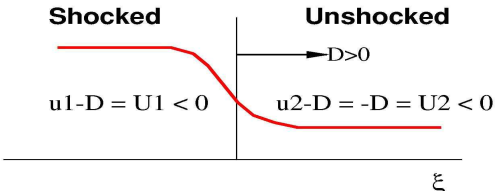

Fig. 1. 충격파가 있는 구조의 도식

석에 사용된다. 고체-액체 경계의 상의 전면은 참고문헌[1]에 언급된 에너지 물질의 모델 방정식과 함께 분석된다. 탄화수소계 연료의 증발과 응축에서는 n-heptane이 액체 연료로 사용되고, 고체추진제 산화제 그레인의 용융과 결빙에서는 HMX가 관련된 파 구조의 분석에 사용된다.

압축공기의 충격파가 지나간 상태는 불안정 평형상태이다. 구조의 적분은 충격파가 지난 점부터 충격파가 지나지 않은 상태의 안정된 점까지 계산된다. Fig. 1은 $\xi = x - Dt, U = u - D$ 의 좌표에서 안정된 충격파를 보여준다. 그 결과 이 구조에서 왼쪽 점의 상류와 하류 모두 음의 값을 갖는다. 여기서 D는 음의 ξ방향의 안정파 속도이다. (즉, D<0).

x와 t 로 연결된 도함수는

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial t}\frac{d}{d\xi} = -D\frac{d}{d\xi}; \frac{\partial}{\partial x} = \frac{d}{d\xi} \quad (1)$$

로 나타내며 속도 차이는

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{dU}{d\xi} \quad (2)$$

가 된다. 그러므로 이상기체의 운동방정식은 다음과 같다. ($m = \rho U$ 와 $p = \rho RT$일 때)

$$\rho U = m, \ (U = D - u) \quad (3)$$
$$\frac{dU}{d\xi} = \frac{3}{4\mu_f}\left\{ mU_{-\infty} + \frac{m}{U_{-\infty}}RT_1 - mU - \frac{m}{U}RT \right\}$$
$$\frac{dT}{d\xi} = \frac{1}{K}\left\{ \frac{\gamma}{\gamma-1}mRT_1 + \frac{1}{2}mU_{-\infty}^2 - \frac{4}{3}\mu_f U U_\xi \right\}$$
$$\left\{ -\frac{\gamma}{\gamma-1}mRT - \frac{1}{2}mU^2 \right\}$$

공기의 일정한 표준 값(μ_f = 1.95 X 10^{-5} Ns/m^2, K = 0.0276 W/m K, R = 287 m^2/s^{2}K)을 사용하여 충격파가 지나간 상태에서 충격파가 지나기 전의 상태, 즉 주변상태로 적분될 수 있다.

다음 부분에서 일반적인 상변환 면의 파 두께는 일반적인 파 구조 분석과 같이 계산된다. 정확한 데이터를 가진 물질의 모델을 다룸으로써, 상면의 나노 두께의 정성 측정이 이러한 접근을

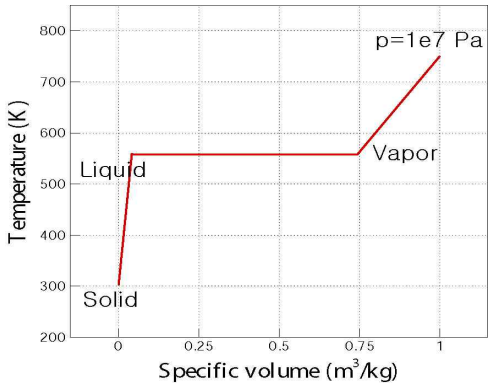

Fig. 2. 준 평형이란 가정 하에 일정압력($p = 10^7$ Pa)에서의 T-v 선도 (HMX)

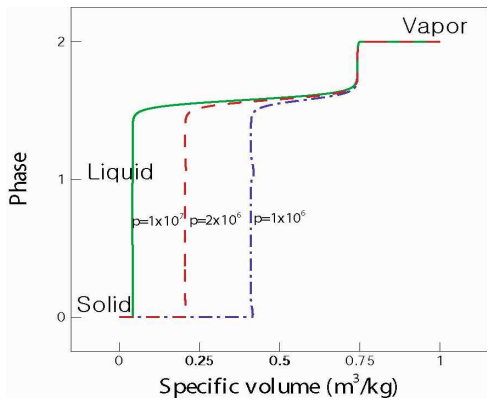

Fig. 3. 열적-준 평형상태 가정 하에 일정 압력의 상-부피의 궤적

통하여 가능하게 된다. 본 이론의 명확한 이해를 위하여 참고문헌[2]에서 소개된 Phase-field 이론을 간략히 소개한다. Fig. 2와 3에 나타난 온도와 비체적 (T-v) 그리고 상 계와 비체적 (φ-v)의 관계는 다음과 같다.

저온 (300K)에서 고체상(φ=0)이 가열에 의해 액체(φ=1)로 변화하는 것을 나타낸다. 여기서 온도는 용융점인 550K를 지나며 부피의 변화는 크지 않음을 볼 수 있다. 액체가 기체로 변화되는 과정 (φ=1→2)은 급격한 증발로부터 팽창이 동반됨을 알 수 있다. 이는 Classical Phase 이론과 일치함을 알 수 있으며 본 이론의 정당성을 뒷받침 해주고 있다.

II. 상면의 구조

2.1 증발과 응축 면

비정상상태 방정식에서 $\xi = x - Dt$, $U = u - D$을

사용한 기준 구조가 움직이는 정상상태 방정식으로의 전환은 $\pm\infty$에서 최종상태 사이의 파 구조의 세부사항을 제공한다. 여기에서 D는 음의 ξ 방향 (즉, D<0)으로의 균일한 상면 '파' 속도이다. x와 t에 관한 도함수와 속도차분 $\partial u/\partial x$는 앞에서 정의되었다. (식 1과 2 참고)

질량 운동량 방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$\rho U = m$$
$$\rho U\frac{dU}{d\xi} = \frac{d}{d\xi}\left(\sigma + \frac{4}{3}\mu_f\frac{dU}{d\xi}\right) \tag{4}$$

파의 구조는 운동량 방정식(5)의 1차 상미분 방정식에서 ξ를 한 번에 적분하여 구한다.

$$mU - \sigma - \frac{4}{3}\mu_f\frac{dU}{d\xi} = \beta \tag{5}$$

(β는 $\xi \rightarrow$ -∞에서 구할 수 있는 적분 상수이다.)

질량 유속을 상수 m으로 정의하면 운동량 방정식의 구조는

$$\frac{dU}{d\xi} = \frac{3}{4\mu_f}\left\{mU + p + \rho\mu_\varphi G^2 - mU_k - p_k\right\} \tag{6}$$

로 표현된다. 에너지와 상 계 구조 방정식에 관하여 x와 t 에 관한 입자는 ξ의 도함수로 대체되고, 임의의 함수 ϕ의 전체 도함수 $\dot{\phi}$은 $Ud\phi/d\xi$로 변형된다. (ϕ는 T 와φ의 함수)

1차 도함수로 에너지식을 쓰기 위하여 새로운 변수 H (H는 $\frac{dT}{d\xi} = H$로 정의된다.)를 정의하면, 에너지 식은

$$\frac{dH}{d\xi} = \frac{1}{\kappa}\begin{Bmatrix} mc_v H - \frac{4}{3}\mu_f\left(\frac{dU}{d\xi}\right)^2 + \rho RT\frac{dU}{d\xi} - B_\varphi(UG)^2 \\ -\rho T\beta_v'(\varphi)\frac{Q_v}{T_v}UG + \rho c_v' T\ln\frac{T}{T_k} \\ +\beta_v'(\varphi)Q_k \end{Bmatrix} \tag{7}$$

이 된다. k가 1일 때는 증발의 경우이고 k가 2일 때는 응축의 경우이다.

상 방정식에 관해서는 $\frac{d\varphi}{d\xi} = G$로 정의되는 변수 G를 소개하여 나타낸다.

$$\frac{dG}{d\xi} = \frac{1}{\mu_\varphi}\begin{Bmatrix} UB_\varphi G + \frac{1}{2}\Psi\frac{\partial}{\partial\varphi}(\varphi(\varphi-1)(\varphi-2))^2 \\ +\beta_v'(\varphi)\frac{T-T_v}{T_v}Q_v \\ -c_v'\left(T\ln\frac{T}{T_k} - (T-T_k)\right) \end{Bmatrix} \tag{8}$$

상 계 변수 φ에서 c_v, R, β_v의 독립성에 주목한다. 상 독립 계수들의 일반화는 그들의 도함수가 0이 되지 않아 방정식을 복잡하게 한다. 독립적인 φ 계수의 결정은 증발 파의 구조에 적합하다. 다시 말해 독립적인 φ는 식(9)와 같이 표현된다.

$$\alpha(\varphi) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \alpha_1\left\{\tanh\left(\frac{\varphi^* - \varphi}{\epsilon}\right) + 1\right\} \\ +\alpha_2\left\{\tanh\left(\frac{\varphi - \varphi^*}{\epsilon}\right) + 1\right\} \end{bmatrix} \tag{9}$$

φ에 관한 도함수는 다음과 같다.

$$\alpha'(\varphi) = \frac{1}{2\epsilon}\alpha_2\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\varphi - \varphi^*}{\epsilon}\right) - \frac{1}{2\epsilon}\alpha_1\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\varphi^* - \varphi}{\epsilon}\right) \tag{10}$$

여기서 α는 조건으로 지정된 끝 상태를 만족하는 $c_v, c_p, \beta_v, \beta_m, R$ 의 어떤 것도 될 수 있다. φ^*는 증발/응축일 때 $(3+\sqrt{3})/3$이고, 용융/결빙일 때는 $(3-\sqrt{3})/3$ 이다. 선택된 ϵ을 가지고, 결과 전달 함수는 두 끝 상태 사이의 스위치와 같은 작용을 한다. 이런 스위치 함수를 가지고, 지배방정식을 풀 수 있다. n-heptane의 모든 다른 변수와 관련된 특성들은 Table 1에 기입하였다.

이 독립 상미분방정식의 적분은 ξ에서 진행되기 위해 고차 Runge-Kutta법[2]으로 수행된다. 증발의 경우 $k=1$에서 액체상태 (즉, ξ = -∞)는 다음의 값을 갖는다.

$\xi = -\infty$에서 (ρ_1=675 kg/m^3, m=0.7315515 kg/m^{2}s, D=1.08378e-3 m/s, u_1=0 m/s, T_1=300 K, p_1=6.07500e5 Pa, φ_1=1.0000001, H=G=0, Q_1=+3.35e15 J)

수치 적분은 $-\infty$에서 상태 1(액체 쪽)부터 $+\infty$에서 상태 2(기체 쪽)로 계산된다. Fig. 4와 5는 식에 의해 얻어진 증발 구조를 나타낸다. 초기상태가 교란될 때 식의 해는 멀리 떨어진 우측

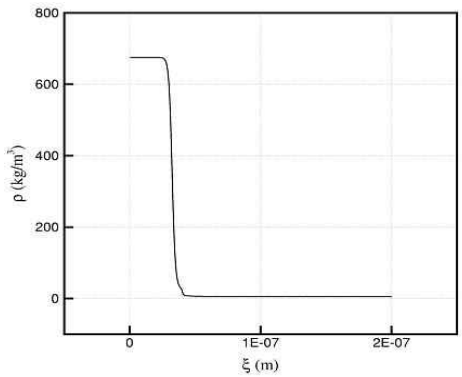

Fig. 4. n-heptane의 밀도계로부터 관측된 증발 면 구조

Table 1. n-heptane의 증발과 응축을 위한 차원 변수들

Property	Value
c_v^{liquid}	2.136 x 10^3 J/kg K
c_v^{vapor}	2.136 x 10 J/kg K
R_{liquid}	3 J/kg K
R_{vapor}	3 x 10^2 J/kg K
$\mu_{f-liquid}$	5.4 x 10^{-4} kg/m s
$\mu_{f-vapor}$	5.4 x 10^{-4} kg/m s
B_φ	3.5 x 10^{-2}
μ_φ	2.0 x 10^{-12}
Ψ	40.0 x 10^{-6}
$T_{vaporization}$	371.4 K

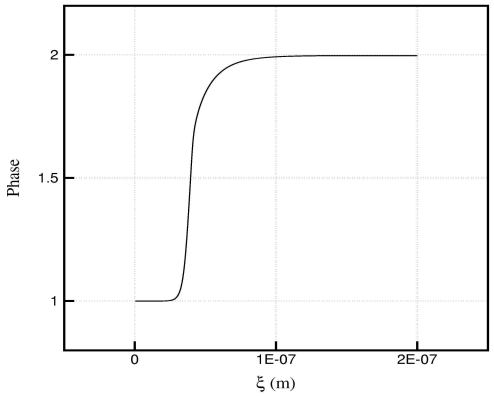

Fig. 5. n-heptane의 상계로부터 관측된 증발 면 구조

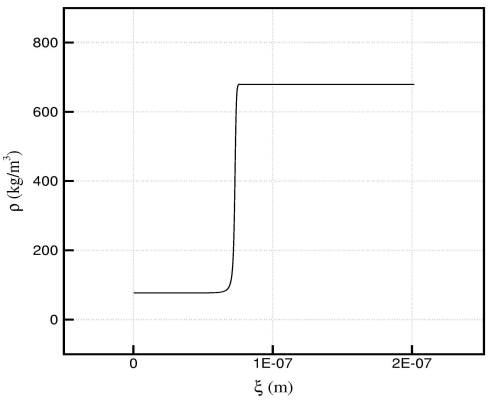

Fig. 6. n-heptane의 밀도계에서 응축에 의한 파 구조

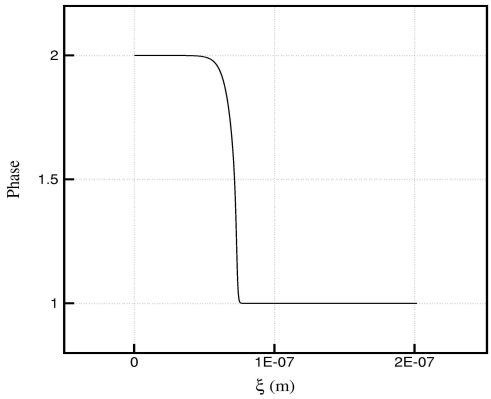

Fig. 7. n-heptane의 상계에서의 증발에 의한 의한 파 구조

에 있는 특정한 구조의 안정점을 통하는 적분경로에 의해 결정된다. 속도분포는 (이 논문에서 보이지는 않았지만) *n*-heptane 증발 경우에 대응하여 밀도의 점프가 있는 안정한 상태에서 초기값 10^{-3} m/s에서 10^{-1} m/s로 증가한다[4-6]. 상계 변수가 1에서 2로 변할 때, 상 면의 두께는 10나노미터의 차수로 측정된다.

밀리미터의 차수를 가지는 헬륨에서 실험적으로 측정된 유사한 파의 두께를 고려했을 때 [7], 제안된 증발 면 두께는 훨씬 작다. 각각의 끝에서 온도 구배는 $T(-\infty)$에서 일정하고 $T(+\infty)$에서는 증발 과정을 위한 먼 계 일정한 온도 구배 조건을 나타내며 ξ에 대하여 선형이다.

응축의 경우에는 -∞에서 증기 상태-2로 고정되어 있고, 적분은 액체상태인 +∞로 계산된다. 응축에서 적분의 초기조건은 다음과 같다.
($\xi=-\infty$에서 ρ_2=5 kg/m^3, U_2=0.11 m/s, m=0.7315515 kg/m^{2}s, T_2=480 K, φ_2=1.9999991, H=G=0, Q_2=-4.35e14 J)

여기서 적분은 $k=2$에서 고정된 상태로부터 $k=1$에서 새로운 상태까지 수행된다. Fig. 6과 7은 $k=2$로 묘사된 방정식의 해에 의해 구해진 응축 파 구조를 나타낸다. 구조는 적분의 방향이 역이 되는 것을 제외하고는 거의 증발과 일치한다. 응축열 Q의 적절한 값을 가지고 적분은 10나노미터의 얇은 지역을 통하여 증기에서 액체로 계산된다.

2.2 용융와 결빙 면

고체에서 액체로 또는 액체에서 고체로의 전이의 경우 구조 방정식은 앞의 증발 - 응축의 경우와 유사하게 얻어진다. 식에서 주된 차이는 변형 계에서의 보존 변수의 의존성을 더한 것이다. 변수 F 는 운동량, 에너지, 상 계 방정식으로 이

입 된 1차원 변형 변화도이다. 질량 유속을 의미하는 상수 m을 가지고, 운동량 구조 방정식은 ξ에서 구간 -∞에서 적분되어,

$$\frac{dU}{d\xi}=\frac{3}{4\mu_f}\left\{\begin{matrix} mU+p+\rho\mu_\varphi G^2-\mu_s F \\ +\mu_l F^{\frac{-1}{1-2\nu_s}}-mU_k-p_k \end{matrix}\right\} \quad (11)$$

과 같이 된다.

이 식은 $k=1$일 때 용융, $k=2$일 때 결빙으로 나타낼 수 있다. 에너지 방정식은

$$\frac{dH}{d\xi}=\frac{1}{\kappa}\left\{\begin{matrix} mc_v H-\frac{4}{3}\mu_f\left(\frac{dU}{d\xi}\right)^2+\rho RT\frac{dU}{d\xi}+\mu_s F\frac{dU}{d\xi} \\ -\mu_l F^{-\frac{1}{1-2\nu_s}}\frac{dU}{d\xi}-B_\varphi(UG)^2 \\ -\rho T\beta_m'(\varphi)\frac{Q_m}{T_m}UG+\rho c_v' T\ln\frac{T}{T_k} \\ +\beta_m'(\varphi)Q_k-\frac{1}{2}\mu_s' F^{-1}(F^2-1)(UG) \\ -\frac{1-2\nu_s}{2\nu_s}\mu_l' F^{-1}(F^{-\frac{2\nu_s}{1-2\nu_s}}-1)(UG) \end{matrix}\right\} \quad (12)$$

로 표현된다.

증발/응축의 경우와 같이 새로운 변수 H는 원래 에너지 방정식을 두 개의 1차 상미분 방정식 ($\frac{dT}{d\xi}=H$와 식 (12))으로 나누기 위하여 소개된 변수이다.

상 계 방정식은

$$\frac{dG}{d\xi}=\mu_\varphi\left\{\begin{matrix} UB_\varphi G+\frac{1}{2}\Psi\frac{\partial}{\partial\varphi}(\varphi(\varphi-1)(\varphi-2))^2 \\ +\beta_m'(\varphi)\frac{T-T_m}{T_m}Q_m \\ -c_v'(T\ln\frac{T}{T_k}-(T-T_k))+\mu_s'\frac{1}{2}F^{-1}(F^2-1) \\ +\mu_l'\frac{1-2\nu_s}{2\nu_s}F^{-1}(F^{-\frac{2\nu_s}{1-2\nu_s}}-1) \end{matrix}\right\} \quad (13)$$

로 표현된다. (단, $\frac{d\varphi}{d\xi}=G$) 마지막으로 추가 방정식을 가진 고립계가 필요하다. 방정식은 $\frac{dF}{d\xi}=-\frac{F}{U_k}\frac{dU}{d\xi}$ 나 $F=e^{-\frac{U}{U_k}+1}$ 인 속도계를 가지고 변형 차분계와 연계된 것이다.

고체-액체 상 변화 구조를 분석하기 위하여 둔감 추진제 산화제로 쓰이는 HMX를 선택하였다. HMX는 유용한 데이터가 잘 알려진 물질이다 [9-13]. Table 2에서는 용융와 결빙 구조의 계산에 필요한 HMX의 변수를 나타내고 있다.

용융의 경우, HMX의 고체 상태는 $k=1$에 의해 고정되며 $\xi=-\infty$에서 다음의 초기값을 갖는다.

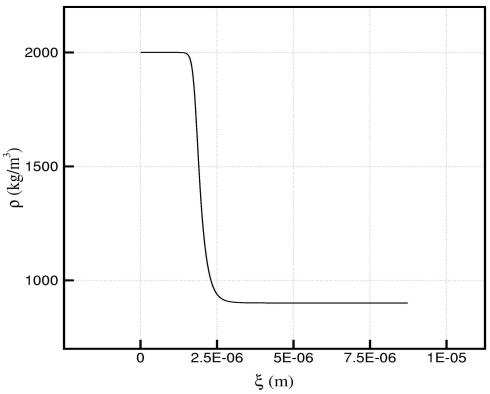

Fig. 8. 고체 HMX의 밀도계로부터 관측된 용융 면 구조

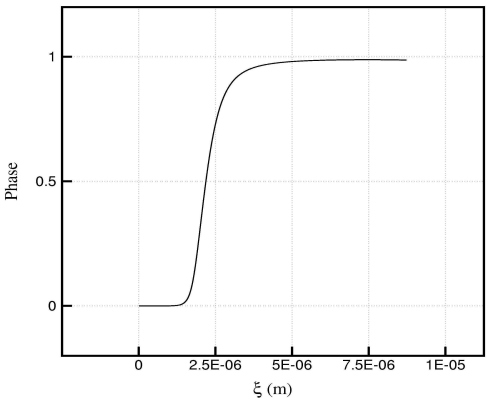

Fig. 9. 고체 HMX의 상계로부터 관측된 용융 면 구조

($\xi=-\infty$에서 ρ_1=2000 kg/m^3, m=2.0 x 10^3 kg/m^{2}s, D=1.0 m/s, u_1=0 m/s, T_1=300 K, p_1=6.07500e5 Pa, φ_1=0.0000001, F=1.00000001, H=G=0, Q_1=+3.3e14 J)

HMX의 용융율에 대한 데이터가 없기 때문에 D의 범위는 10^{-3} ~ 10^3 m/s에서 결정된다. 이 범위의 최소값 10^{-3}m/s는 일반적인 폭연율, 최대값 10^{3}m/s는 일반적인 폭발 속도에 해당한다[14-15]. 일반적으로는 평균값 1m/s를 취한다.

Fig. 8과 9는 방정식에 의한 용융면의 구조를 묘사한다. 특히 전형적인 폭발물의 밀도인 2000 kg/m^{3}의 초기값은 2개의 요소에 의해 감소한다.

용융의 상미분 방정식은 약간 교란된 초기상태에서 용융된 HMX의 새로운 상태로 적분된다. 상 면의 두께는 마이크론의 차원이며, 액체 연료의 증발/응축면 보다 100배 두꺼운 폭발적인 용융면의 관찰이 이를 뒷받침한다.

Table 2. HMX 용융과 결빙을 위한 차원 변수들

Property	Value
c_v^{solid}	1.06 x 10^3 J/kg K
c_v^{liquid}	2.1 x 10^3 J/kg K
R_{solid}	1.1 J/kg K
R_{liquid}	3.0 J/kg K
$\mu_{f-solid}$	1.0 x 10^{-3} kg/m s
$\mu_{f-liquid}$	1.0 x 10^{-3} kg/m s
B_φ	3.5 x 10^{-2}
μ_φ	2.0 x 10^{-12}
Ψ	40.0 x 10^{-6}
$T_{melting}$	558 K

고체 HMX의 초기 상태는 힘이 가해지지 않은 상태이고(즉 F=1) 반면에 적분의 끝 상태는 압축된 상태로 $F \sim 0.3$ 이다.

실제로 우측에 위치한 압축파는 D의 균일한 용융 속도에서 좌측의 힘이 가해지지 않은 물질로 전달된다. 에너지가 전달되는, 즉 에너지 전환에 있어서 비록 보이지는 않았지만 온도 계 역시 이런 관찰을 지지한다. 액체에서 고체로 가기 위해 에너지 전달을 야기하는 우측 온도 계의 선형적 증가에 의해 우측 상태는 좌측 균일 상태와 균형을 이룬다. 이는 정의에 의해 필수적인 용융되는 과정을 나타낸다[16-19].

III. 결 론

고체-액체 로켓 추진제와 같은 상 변환을 겪는 에너지 물질을 위한 열적-기계적 모델이 연소에서 존재하는 파의 구조를 이해하기 위하여 재구성되었다. 특히 증발과 응축 상면의 두께는 *n*-heptane 구조식의 하나의 상태에서 다른 상태까지의 적분에 의하여 산출되었다. 용융과 결빙파의 두께 예측에는 상 변화를 가진 에너지 물질로서 HMX가 사용되었다. 분석에 따르면 액체-기체나 기체-액체상태의 상면 너비는 고 폭발적인 고체-액체 또는 액체-고체 상면의 대략 100분의 1정도로 계산되었다. 비록 이 단계에서 완전히 일반화하진 않았지만, 본 논문에서 묘사한 접근은 다양한 고에너지물질의 상면 두께 측정을 위하여 확장될 수 있다. 따라서 실험적 측정이 불가능한 영역에 활용할 수 있는 가능성을 가지고 있다고 본다.

후 기

본 연구는 국방과학연구소 기초연구사업 (에너지물질 08-08-01)과 서울대학교 공학연구소의 지원 하에 수행되었습니다.

참고문헌

1) J.J. Yoh, "Analysis of phase front structures for energetic materials", *J. Phys.: Condens. Matter,* 18, pp. 8179-8193, 2006.

2) G.A. Ruderman, J.J. Yoh, and D.S. Stewart, "A thermomechanical model for energetic materials with phase transformations", SIAM Journal on Applied Mathematics, Vol. 63, pp. 510-537, 2002.

3) J.J. Yoh, and X. Zhong, "New Hybrid Runge-Kutta Methods for Unsteady Reactive Flow Simulation", *AIAA Journal,*, 42, pp. 1593-1600, 2004.

4) W.A. Sirignano, "Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays", Cambridge University Press, 1999.

5) C.K. Law, "Recent Advances in Droplet Vaporization and Condensation", *Progress in Energy and Combustion Science*, 88, pp. 171-201, 1982.

6) J.S. Shuen, V. Yang, and C.C. Hsia, "Combustion of Liquid-Fuel Droplets in Supercritical Conditions", *Combustion and Flame*, 89, pp. 299-319, 1992.

7) P.A. Thompson, "Compressible-Fluid Dynamics," *Advanced Engineering Series,* 1988.

8) J. Timmermans, *Physico-chemical Constants of Pure Organic Compounds,* v.1, 2, New York: Elsevier Publishing Co., 1965.

9) T.L. Boggs, "The Thermal Behavior of Cyclotrimethylenetrinitramine (RDX) and Cyclotetramethyleneteranitramine (HMX)", Progress in Astro. and Aero., 90, pp. 121-175, 1984.

10) B.M. Dobratz and P.C. Crawford, *LLNL Explosive Hand Book,* Lawrence Livermore National Laboratory, 1985.

11) J.M. Rosen and C. Dickinson, "Vapor Pressures and Heats of Sublimation of Some High Melting Organic Explosives", *Journal of*

chemical and Engineering Data, 14, pp. 120-124, 1969.

12) J.W. Taylor and R. J. Crookes, "Vapour Pressure and Enthalpy of Sublimation of HMX", *Journal of Chemical Society. Faraday Transactions,* 72, pp. 73-728, 1976.

13) J.J. Yoh and M.A. McClelland, "An Overview of Thermal-Chemical-Mechanical Modeling off HMX-based Explosives", 41st Joint Propulsion Conference, Tucson, AZ, 2005, *AIAA-2005-4554.*

14) W. Fickett and W. C. Davis, *Detonation,* University of California Press, Berkeley, CA., 1979.

15) F.A. Williams, *Combustion Theory,* Addison-Wesley, 1985.

16) F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill Book Co., 1985.

17) A.B. Pippard, *Elements off Classical Thermodynamics for Advanced Student of Physics,* Cambridge University Press, 1966.

18) H.B. Callen, *Thermodynamics,* John Wiley & Sons Inc., 1985.

19) J.-P. Poirier, *Introduction to the Physics of the Earth's Interior,* Cambridge University Press, 1991.