

# PETN 기반 복합화약의 구성방정식 파라미터 결정 및 검증

백동현\* · 김보훈\* · 여재익\*†

## A Parametric Study of Constitutive Relations for PETN Based Explosive

Donghyeon Baek\* · Bohoon Kim\* · Jai-ick Yoh\*†

### ABSTRACT

KYP model is a pressure-based chemical kinetics that describes shock to detonation transition of energetic materials. In this research, the parameters of KYP model and JWL EOS for PETN-based explosive, namely PBXN-301, were determined. A series of unconfined rate stick tests and two dimensional hydrodynamic simulation were conducted to obtain the size effect behaviour of the explosive. As a result, it was confirmed that the parameters obtained from KYP modeling have more accuracy to predict the detonation velocities according to the inverse radius of PBXN-301 than the qualitatively obtained LLNL constitutive equations.

### 초 록

KYP 모델은 화약의 폭굉 반응속도를 기술하는 압력기반모델이다. 본 연구에서는 PETN 기반 복합 화약(PBXN-301)의 KYP 모델 및 JWL EOS의 파라미터를 결정하였다. 크기효과를 얻기 위하여 반응 막대 시험을 수행하였고 2차원 하이드로다이나믹 해석 결과와 비교하였다. 해석 결과, 정성적으로 얻어진 LLNL의 구성방정식보다 KYP 모델링을 통해 도출된 파라미터가 PBXN-301 화약의 역반지름에 따른 폭굉과속을 잘 예측하는 것으로 나타났다.

Key Words: PBXN-301(PETN 기반 복합화약), KYP Model(KYP 모델), JWL EOS(JWL 상태방정식), Unconfined Rate Stick Test(반응 막대 시험)

### 1. 서 론

PETN(pentaerythritol tetranitrate,  $C_5H_8N_4O_{12}$ )

80%와 sylgard 20%가 혼합된 PBXN-301은 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  $\mu s$  안에 발생하는 급격한 연소반응으로 인해 압력구배가 큰 영향을 미친다. 따라서 화약

\* 서울대학교 기계항공공학부

† 교신저자, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

의 폭굉반응 전산모사 시 반응속도를 기술하는 압력기반 반응속도모델과 폭굉 반응 시 압력을 기술하기 위한 상태방정식이 필요하다. 압력 상태방정식은 JWL EOS가 쓰여 왔으나, 반응속도 모델을 개발했던 선행 연구들이 있었다.

1980년도에 Tarver와 Edward Lee에 의해 고안된 Ignition & Growth(I&G) 모델[1]은 SDT 현상의 물리적 의미를 모두 설명한다. 그러나 파라미터 수가 많아 모델링 하는데 어려움이 따른다. Johns와 Wilkins, Lee은 반응성장의 영향만 고려한 JWL++ 모델[2]을 고안하였다. 기존의 I&G 모델에서 점화항과 폭굉 천이 항을 무시하여 파라미터 수를 줄인 모델이다. 이 모델은 I&G 모델에 비해 간단하나 점화가 항상 일어난다고 가정하므로 점화의 영향을 확인 할 수 없다. 최근에 개발된 KYP(Kim-Yoh-Park) 모델[3]은 I&G 모델의 점화항과 JWL++ 모델을 결합하였기 때문에 점화에서 폭굉에 이르는 현상을 모두 설명한다. 또한, 해석적 방법으로 모델링을 용이하게 할 수 있다.

이런 장점들 때문에 최근 KYP 모델링에 대한 연구가 진행되었다. 김보훈 등[3]은 50% RDX(cyclotrimethylene-trinitramine,  $C_3H_6N_6O_6$ ), 35%의 알루미늄, 15%의 HTPB가 섞인 RDX 기반 복합화약에 대하여 KYP 모델링을 했다. 모델링 후, 반응 막대 시험과 2차원 축대칭 하이드로다이나믹 해석결과를 비교했을 때 시험과 전산 해석 결과가 일치함을 검증하였다.

본 연구에서는 PBXN-301에 대하여 구성방정식인 KYP 모델 및 JWL EOS 파라미터를 결정하였다. LLNL에서 제공하는 파라미터와 비교하

여, 2차원 축대칭 전산해석 수행 시 어느 경우가 실제 반응 막대 시험 결과와 일치하는지 검증하고자 했다.

## 2. 반응 막대 시험 및 시뮬레이션

### 2.1 반응 막대 시험

반응 막대 시험[3]은 화약의 크기에 따라 폭굉과 속이 변하는 크기효과(size effect)를 측정하기 위하여 수행된다. 화약에 충격을 가했을 때 실린더 내의 화약에서 수  $\mu s$  내에 급격한 연소 반응이 일어난다. 폭굉파가 전파됨에 따라 최대 압력(ZND pressure)이 커지고 증가하는 압력구배로 인해 속도가 빨라진다. 속도 및 압력이 증가하다가 일정해지는 완전 발달된(fully developed) 폭굉파가 되었을 때, 실린더의 크기에 따른 폭굉과 속을 측정하는 것이 반응 막대 시험의 목적이다. Fig. 1은 한화에서 수행한 반응 막대 시험의 구조도이다. PBXN-301을 길이 300 mm의 PVC 파이프에 감싸고 화약의 반지름을 8.45 mm, 10.2 mm, 12.35 mm로 변화시키면서 폭굉과 속을 측정하는 실험이다. 150 mm 지점부터 50 mm 간격으로 광케이블을 부착하고, VOD meter에 연결하여 폭굉파를 10MHz의 진동수로 측정했다.

Table 1. Experiment data from HANWHA(2017).

$1/R(mm^{-1})$	$U_s(m/s)$
0.081	7120.5
0.098	7064
0.118	7104

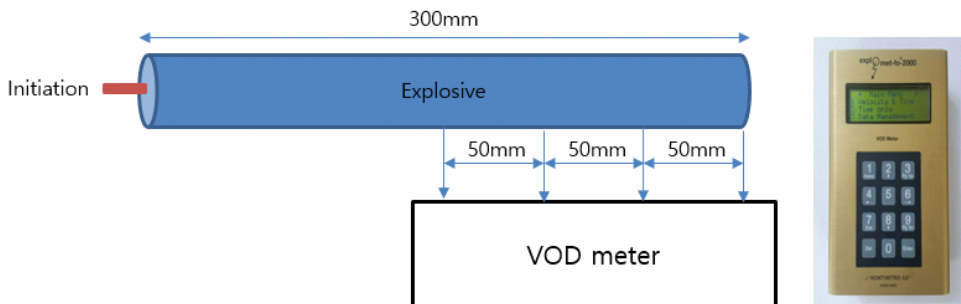


Fig. 1 Configuration of unconfined rate stick test for PBXN-301 packed in PVC pipe.

다. Table 1.은 실험을 통해 얻은 폭굉과속이다. 반지름의 차이가 거의 없기 때문에 속도의 큰 차이는 없지만, 대체적으로 속도가 감소하는 경향을 띄고 있음을 볼 수 있다.

## 2.2 구성방정식

Eq. 1은 I&G 모델과 JWLL++ 모델의 장점이 결합되어, 파라미터 결정에 용이하고 화약의 연소 특성을 전부 포함하는 KYP 모델이다.

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)\mu^a + G(1-\lambda)p^b \quad (1)$$

반응성장 측 파라미터를 결정하기 위해 Cheetah를 통하여 각 반지름에 대한 폭굉과속을 구한다[5]. 폭굉 데이터를 기반으로 반지름의 역수( $1/R$ )에 대한 속도 그래프를 그린 뒤, 외삽(extrapolation)하여 무한반경에서의 폭굉과속( $D$ )

$$\frac{R_D}{R} = \frac{0.4(1-(U_s/D)^2)}{\ln(1-(U_s/D)^2)} \left(\frac{U_s}{D}\right)^{2b-1} \left(1 - \frac{U_s}{D}\right) \quad (2)$$

Table 2. Comparison of dimensionless velocity depending on inverse radius between Cheetah and Eq. 2 for PBXN-301.

$1/R$ ( $\text{mm}^{-1}$ )	Cheetah $U_s$ (m/s)	Cheetah $U_s/D$	Eq. 2 $U_s/D$
0	7155	1	1
0.02	7146	0.9987	0.9999
0.08	7128	0.9962	0.9995
0.14	7102	0.9926	0.9978
0.2	7077	0.9890	0.9947
0.26	7038	0.9836	0.9901
0.32	6995	0.9776	0.9842
0.38	6920	0.9671	0.9770
0.44	6887	0.9625	0.9684
0.5	6825	0.9539	0.9589
0.58	6740	0.9420	0.9445
0.66	6630	0.9266	0.9282
0.72	6529	0.9125	0.9146
0.78	6423	0.8977	0.9000
0.84	6314	0.8824	0.8841

을 구한다. 각 반지름에 대한 무차원 속도 ( $U_s/D$ )값을 구한 뒤,  $R_D$ 와  $b$ 가 결정되었을 때  $U_s/D$ 와  $1/R$ 의 관계를 해석적으로 풀이한 Eq. 2와 비교한다[3]. Cheetah의 크기효과곡선과 Eq. 2의 차이는 Eq. 3에 의해 계산된다.

$$Z = \frac{\sum^N \left| \left(\frac{U_s}{D}\right)_{analytical} - \left(\frac{U_s}{D}\right)_{data} \right|}{N} \quad (3)$$

$R_D$ 가 0.087 mm,  $b$ 가 1.888 일 때, Eq. 3의 값이 최소이다. 이를 통해 압력기반계수( $b$ )를 정한다. 반응성장 속도상수( $G$ )는 Table 3에 제시된 C-J 압력을 사용하여 Eq. 4와 같이 계산한다.

$$G = \frac{D}{R_D P_{cj}^b} \quad (4)$$

점화 항에서 압축계수( $a$ )는 열점형성모델(hot-spot formulation model)의 경우 실험[6,7]과 랭킨-위고니오 관계에 의해 4가 된다[3]. 전체 반응 시간 중 반응 성장에 소비되는 시간이 10%라는 조건[3]으로, Eq. 5에 의하여 점화 속도 상수( $I$ )를 구한다. 모델링 과정을 거쳐서 결정된 반응속도 파라미터는 Table 4에 제시되어 있다.

$$I = 0.1 G P_{cj}^b \left(\frac{\rho_{cj}}{\rho_0} - 1\right)^{-a} \quad (5)$$

압력 상태방정식은 반응물과 생성물에 대해 각각 Mie-Grunisen, JWL EOS를 사용했다. 두 상태방정식과 Eq. 1을 통해 계산된 값들은 Eq. 8에 의해 압력을 계산하는데 사용된다.

Table 3. Chapman-Jouguet values of PBXN-301.

	$\rho_{cj}$ (g/cc)	2.13
C-J	$p_{cj}$ (GPa)	20.5
Values	$e_{cj}$ (kJ/cc)	2.75
	$v_{cj}$ (m/s)	7004

$$p_{unreacted} = p_H + \Gamma \rho (e - e_H) \quad (6)$$

$$p_H = \frac{\rho_0 c_0^2 \mu (1 + \mu)}{(1 - (s-1)\mu)^2}, \mu = \frac{\rho}{\rho_0} - 1$$

$$e_H = \frac{p_H}{2\rho_0} \left( \frac{\mu}{1 + \mu} \right)$$

$$p_{reacted} = Ae^{-R_1(\rho_0/\rho)} + Be^{-R_2(\rho_0/\rho)} + C(\rho_0/\rho)^{-(\omega+1)} \quad (7)$$

$$p = (1 - \lambda)p_{unreacted} + \lambda p_{reacted} \quad (8)$$

LLNL의 문헌[4]과 열화학코드인 Cheetah[5]에 서는 Table 4와 같이 생성물의 JWL EOS 파라미터들을 제공한다.

### 2.3 계산영역

반응 막대 시험 시뮬레이션의 계산영역을 나타낸 계략도는 Fig. 2와 같다. 실린더의 길이는 폭굉파가 완전발달 되도록 하기 위해 50 mm로 설정

Table 4. Parameters for Equation of state and rate equation for PBXN-301.

	Parameters	Cheetah	Ref.[4]
Reactant	$c_0$ (mm/ $\mu$ s)	1.49	
	$s$	3.30	
	$\Gamma$	0.77	
Product	$A$ (Mbar)	2.055	27.13
	$B$ (Mbar)	0.038	0.018
	$C$ (Mbar)	1.407	0.012
	$R_1$	3.447	7.0
	$R_2$	0.908	1.6
	$\omega$	0.287	0.35
KYP model	$I$ ( $\mu$ s <sup>-1</sup> )	441.67	
	$a$	4	
	$G$ ( $\mu$ s <sup>-1</sup> Mbar <sup>-b</sup> )	1598.93	
	$b$	1.888	

설정하였다. 넓은 반지름 범위에서 크기 효과를 알아보기 위해 14가지의 경우(0, 0.02, 0.08, 0.14, 0.2, 0.26, 0.32, 0.38, 0.44, 0.5, 0.58, 0.66, 0.72, 0.78, 0.84 (mm<sup>-1</sup>))에 대하여 계산을 수행했다. 실린더의 왼쪽 끝에는 폭발 조건을 부여했고, 간단한 계산을 위해 2차원 축대칭 조건을 사용했다.

### 2.4 메쉬 크기 및 폭굉파의 구조

화약의 고유한 특성인 C-J 압력과 반응구간의 길이는 메쉬 크기의 결정에 있어 중요하다. PBXN-301의 경우 반응구간의 길이는 0.2 mm이고, 반응속도가 음속과 같아지고 반응이 완결되는 지점에서 C-J 압력은 20.52 GPa이다. Fig. 3은 메쉬의 크기를 0.05 mm로 했을 때, 반응이 모두 완결(1)되었을 때의 압력이 20.52

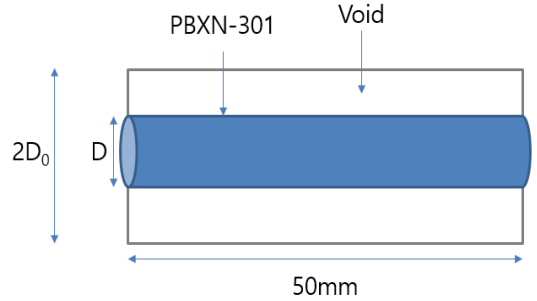


Fig. 2 Computational domain of a 2D cylindrical duct for unconfined rate stick simulation for PBXN-301

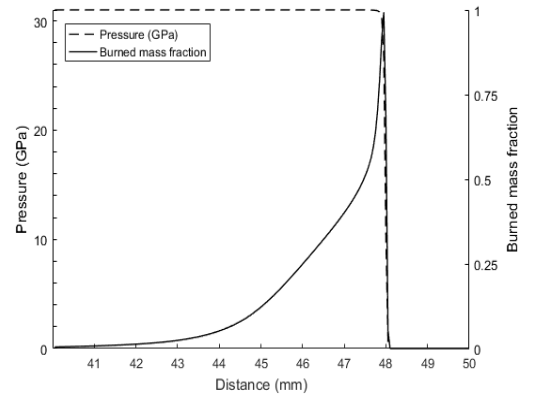


Fig. 3 Structure of detonation wave representing the reaction zone of PBXN-301.

모두 완결( $\lambda = 1$ )되었을 때의 압력이 20.52 GPa 이고 반응구간의 길이가 0.2 mm가 된다는 것을 보여준다. 이 때, 반응구간 내에서의 최대압력은 31 GPa이다.

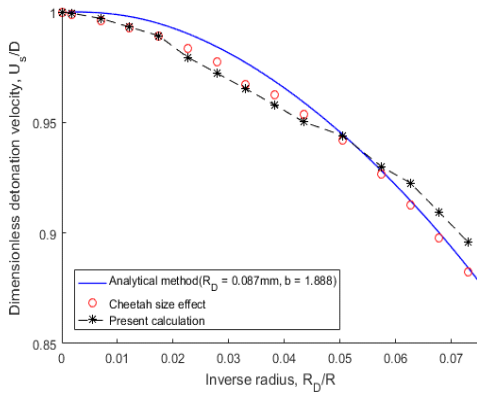


Fig. 4 Dimensionless detonation velocity of unconfined rate stick test & simulation depending on inverse radius for PBXN-301.

Table 5. Comparison on dimensionless velocity depending on inverse radius between calculation and Eq. 2 for PBXN-301.

$1/R$ ( $\text{mm}^{-1}$ )	Cal. $U_s$ (m/s)	Cal. $U_s/D$	Eq. 2 $U_s/D$
0	7150	1	1
0.02	7146	0.9994	0.9999
0.08	7129	0.9970	0.9995
0.14	7101	0.9931	0.9978
0.2	7073	0.9892	0.9947
0.26	7003	0.9794	0.9901
0.32	6952	0.9723	0.9842
0.38	6901	0.9651	0.9770
0.44	6849	0.9579	0.9684
0.5	6794	0.9502	0.9589
0.58	6750	0.9440	0.9445
0.66	6650	0.9301	0.9282
0.72	6597	0.9228	0.9146
0.78	6502	0.9094	0.9000
0.84	6404	0.8956	0.8841

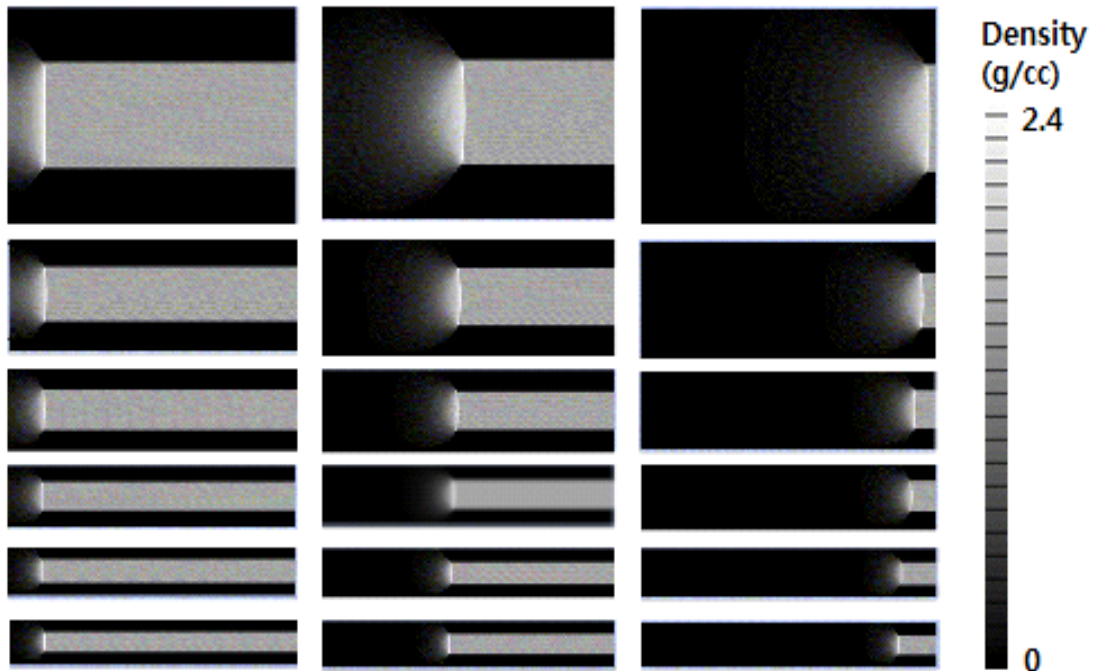


Fig. 5 Density contours for unconfined rate stick simulation of  $0.2 \text{ mm}^{-1}$ ,  $0.38 \text{ mm}^{-1}$ ,  $0.58 \text{ mm}^{-1}$ ,  $0.72 \text{ mm}^{-1}$ ,  $0.90 \text{ mm}^{-1}$  and  $1.02 \text{ mm}^{-1}$  inverse radius at  $t=1.0, 3.5$  and  $7.0 \mu\text{s}$  with density range  $0\text{--}2.4 \text{ g/cc}$

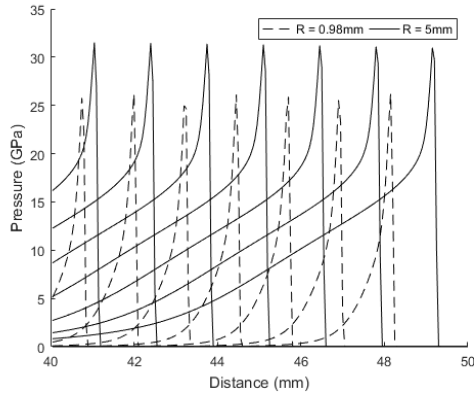


Fig. 6 Propagation of detonation wave in 0.98 mm and 5 mm for unconfined rate stick simulation(range : 40-50 mm).

### 2.5 파라미터 검증

Cheetah의 파라미터를 입력하여 계산을 수행한 결과, Fig. 4 및 Table 5와 같이 Eq. 2 및 Cheetah의 크기효과 곡선과 시뮬레이션 결과가 일치했다. 반응 성장 속도상수를 결정하는 데 중요한 역할을 하는  $R_D$ 와  $b$ 가 결정될 때 그러지는 그래프와 시뮬레이션의 크기효과 곡선이 일치한다는 것은 반응속도 파라미터가 올바르게 설정되었다는 것을 의미한다.

Figure 5는 Cheetah의 파라미터를 입력했을 때 각 반지름에 대하여 시간별 폭굉파의 전파를 밀도 컨투어로 나타낸 것이다. 초기에는 폭굉파 속의 차이가 거의 없으나 시간이 지남에 따라 폭굉파가 완전발달 되면서 속도의 차이가 커진다. 또한, Fig. 6을 통하여 압력과 속도에 대한 정량적 정보를 얻을 수 있다.  $R = 0.98$  mm 일 때, 최대 압력은  $P|_{ZND} = 25$  GPa,  $R = 5$  mm 일 때,  $P|_{ZND} = 32$  GPa 이다. 반지름이 커짐에 따라 커지는 최대압력으로 인해 압력구배가 증가하여 폭굉파속을 증가시킨다. Fig. 5에서와 같이 초기에는 압력의 차이가 거의 없기 때문에 속도의 차이도 크지 않지만, 완전발달이 되는 과정에서 압력이 증가하면서 폭굉파속이 증가한다. 압력이 증가하다가 일정해지면, 압력구배도 일정하므로 Fig. 6와 같이 일정한 속도를 가지게 된다. Fig. 7은 반지름의 역수 대비 완전발달 폭굉

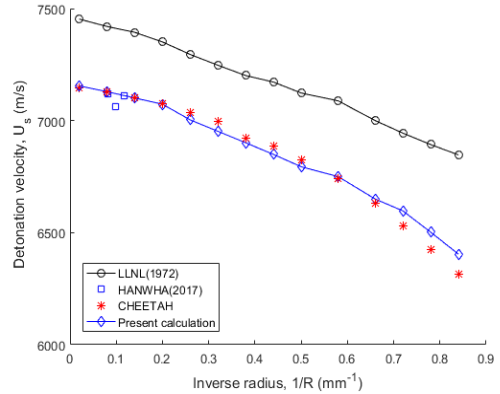


Fig. 7 Size effect curves for the unconfined rate stick test and simulation for PBXN-301.

Table 6. Comparison of the fully developed detonation velocity depending on inverse radius for PBXN-301.

$1/R$ ( $\text{mm}^{-1}$ )	Cheetah $U_s$ (m/s)	LLNL $U_s$ (m/s)	Cal. $U_s$ (m/s)
0	7155	7455	7150
0.02	7146	7453	7146
0.08	7128	7420	7129
0.14	7102	7394	7101
0.2	7077	7351	7073
0.26	7038	7295	7003
0.32	6995	7247	6952
0.38	6920	7201	6901
0.44	6887	7172	6849
0.5	6825	7123	6794
0.58	6740	7088	6750
0.66	6630	7000	6650
0.72	6529	6944	6597
0.78	6423	6893	6502
0.84	6314	6847	6404

파속의 경향성을 나타내었고, Table 6은 구체적인 수치를 나타냈다. 반응속도 및 반응물의 파라미터는 동일하게 유지한 상태로 Cheetah에서 제공한 JWL 파라미터를 입력하여 계산한 결과가 문헌에서 제공한 파라미터로 계산한 결과에 비해 실험 데이터에 더 근접함을 확인할 수 있다. 문헌에서 제공한 파라미터로 계산한 폭굉파속이

더 높게 나온 것은 JWL EOS 파라미터의 첫 번째 항이 Cheetah에서 제공한 파라미터보다 커서 이로 인해 압력구배가 증가하여 나타난 것이다. 결과적으로 본 연구에서 결정한 파라미터가 정확함을 확인 할 수 있다. 다양한 반지름에서 실험을 진행하여 데이터를 얻는다면 연구의 신뢰성을 더 높일 수 있을 것으로 예상된다.

### 3. 결 론

PBXN-301에 대하여 KYP 모델과 JWL EOS 파라미터를 결정했다. 반응속도 및 반응물의 파라미터는 동일하게 한 상태에서 Cheetah를 통해서 도출된 JWL EOS 파라미터와 LLNL의 문헌 파라미터를 각각 입력하여 계산을 수행했다. 그 결과, Cheetah의 파라미터들을 대입한 시뮬레이션 결과가 실제 실험 데이터와 근접함을 확인했다. 본 연구를 통해 화약을 모사 하는데 필요한 구성방정식 파라미터를 쉽게 구하는 방법을 알 수 있다. 이는 다양한 종류의 복합화약에 대해서도 가능 할 것으로 기대된다.

### 후 기

본 연구는 ‘복합화약의 폭발성능 해석 모델 개발’ 프로젝트로 한화와 국방과학연구소의 지원으로 수행되었습니다.

### 참 고 문 헌

1. Lee, E. L. and Tarver, C. M., "Phenomenological model of shock initiation in heterogeneous explosives", *Physics of Fluids*, Vol. 23, No. 12, pp.2362-2372, 1980.
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*, Vol. 25, No. 2, pp.54-583, 2000.
3. Kim, B., Park, J., Lee, K. and Yoh, J.J., "A reactive flow model for heavily aluminized cyclotrimethylene-trinitramine.", *Journal of Applied Physics*, Vol. 116, pp.1-9, 2014.
4. Brigitta M. Dobratz, "Properties of chemical explosives and explosive simulants", Lawrence Livermore Lab, UCRL-51319, 1972.
5. Fried, L. E., Howard, W. M. and Souers, P. C., "Cheetah 2.0 user's manual", UCRL-MA-117541 Rev. 5, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA, 1998.
6. 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, pp.20-29, 1976.
7. 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, pp.127-139, 1978.