

Dr Radun Jeremić,
pukovnik, dipl. inž.
Vojna akademija VJ,
Odsek logistike,
Beograd

NUMERIČKO MODELIRANJE DETONACIJE

UDC: 662.215.1 : 519.876.5

Rezime:

Radi izračunavanja teorijskih vrednosti detonacionih parametara različitih eksplozivnih sastava izvršeno je numeričko modeliranje detonacije i sačinjen računarski program u programskom paketu PASCAL. Za opisivanje ponašanja produkata detonacije primenjena je BKW jednačina stanja, a sistem jednačina hemijske ravnoteže rešavan je metodom minimizacije slobodne energije. Testiranje programskog rešenja izvršeno je za nekoliko eksplozivnih sastava različitih gustina, pri čemu je ostvarena dobra konvergencija rešenja i velika brzina rada. Dobijeno je dobro slaganje eksperimentalnih i teorijskih vrednosti pritiska i brzina detonacije, čime je potvrđena ispravnost modela.

Ključne reči: detonacija, numerički model, jednačina stanja, brzina detonacije, pritisak detonacije.

NUMERICAL MODELLING OF DETONATION

Summary:

Numerical modelling of detonation of different explosive compositions has been carried out in order to calculate theoretical values of detonation parameters. A computer program in the PASCAL program package has been created. The BKW state equation has been applied to describe the behaviour of detonation products and the equation system of chemical equilibrium has been solved by the method of free energy minimization. The program has been tested for several explosive compositions of various densities, operation speed being high and solution convergence good. The experimental and theoretical values of pressures and detonation velocities show good accordance, which confirms the model validity.

Key words: detonation, numerical model, state equation, detonation velocity, detonation pressure.

Uvod

U praksi, pri osvajanju proizvodnje različitih eksplozivnih sastava, postavlja se zahtev za postizanjem određenih vrednosti detonacionih parametara. Ovaj proces može se skratiti i izbeći skupo

eksperimentisanje, numeričkim modeliranjem procesa detonacije i izradom računarskih programa za proračun teorijskih vrednosti detonacionih parametara.

Laboratorije razvijenih zemalja, posebno SAD, sačinile su prve kompjuterske programe za numeričko modeliranje

detonacije još pre 40 godina. Poslednjih godina radi se na istraživanju i razvoju modela za numeričko modeliranje nestacionarne detonacije.

Mader i saradnici (istraživačka laboratorija Los Alamos) 1961. godine izradili su program pod nazivom STRETCH BKW [1]. Za ono vreme taj program se odlikovao velikom brzinom rada i pružanjem zadovoljavajućih rezultata, uz korišćenje samo jednog niza konstanti u BKW jednačini stanja za sve eksplozivne materije.

Razrađene su i druge varijante programa koji koriste BKW jednačinu stanja. Tako su Cheret i saradnici izradili programe pod nazivom ARPAGE i LA MINEUR [1], Cowperthwaite i saradnici izradili su program TIGAR [2] koji se zasniva na JCZ jednačini stanja.

Mader je izradio program pod nazivom FORTRAN BKW 1967. godine, koji je veoma korišćen u istraživačkim institucijama mnogih zemalja, a koji je do danas više puta usavršavan i prilagođavan savremenim softverskim paketima.

Kod nas nije mnogo rađeno na ovoj problematici. Jedan od retkih modela bio je program EXPLO5 [3], koji je imao i nedostataka, jer je prilagođen za proračun detonacionih parametara livenih kompozitnih eksploziva sa polimernim vezivom. Osnovni nedostatak ovog programa je problem konvergencije rešenja za mnoge sastave i što nije primenljiv za gustine eksploziva ispod 1 g/cm^3 .

Cilj ovog rada bio je izrada programa koji nema navedena ograničenja, koji je primenljiv za bilo koji sastav kako brižantnih eksploziva, tako i baruta i raketnih goriva.

Numerički model procesa detonacije

Po svojoj prirodi detonacija je hemijski i hidrodinamički proces. Za razliku od gasovitih eksplozivnih materija, kod kojih je hemijska kinetika procesa detonacije prilično istražena, kod kondenzovanih eksplozivnih materija mnogo manje se zna o mehanizmu i kinetici hemijskih reakcija u detonacionom talasu. 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 sastava. 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 razmatraju kao fluid velike gustine, nepromenljivog sastava, bez primesa čvrstih čestica ili drugih nehomogenosti.

Savremene teorije detonacije uzimaju u obzir širinu zone hemijske reakcije i brzinu hemijskih reakcija u njoj. Realni produkti detonacije predstavljaju smešu nekoliko gasova čiji se ravnotežni sastav menja sa promenom stanja, brzinom koju diktiraju zakoni hemijske kinetike, pri čemu, sa kretanjem gasova, varira i količina čvrstih čestica uključena u produkte detonacije.

Parametri snažnog detonacionog talasa ($p_{CJ} \gg p_0$) u CJ tački povezani su sa parametrima polazne eksplozivne materije zakonima o očuvanju mase, impulsa i

energije, Čepmen-Žugeovim uslovima i jednačinom stanja produkata detonacije, koji se mogu napisati u sledećem obliku:

– brzina detonacije

$$D = V_0 \sqrt{\frac{p_{CJ} - p_0}{V_0 - V_{CJ}}} \quad (1)$$

– brzina produkata detonacije

$$w_{CJ} = (V_0 - V_{CJ}) \sqrt{\frac{p_{CJ} - p_0}{V_0 - V_{CJ}}} \quad (2)$$

– udarna adijabata

$$U_{CJ} - U_0 = \frac{1}{2} p_{CJ} (V_0 - V_{CJ}) + Q_v \quad (3)$$

– uslov tangiranja udarne adijabate i Micheljonove prave

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{CJ} = \frac{p_{CJ} - p_0}{V_0 - V_{CJ}} = \gamma \frac{p_{CJ}}{V_{CJ}} \quad (4)$$

– jednačina stanja produkata detonacije

$$p_{CJ} = f(\rho_{CJ}, T_{CJ}) \quad (5)$$

Produkti detonacije u detonacionom talasu, sabijeni pod ogromnim pritiskom, imaju gustinu koja je za oko 4/3 puta veća od gustine polazne eksplozivne materije. U tako ekstremnim uslovima pritisak ima dvojak fizičku prirodu.

Deo pritiska je posledica toplotnog kretanja molekula, a drugi deo potiče od uzajamnog dejstva tesno sabijenih molekula, i vezan je za potencijalnu energiju njihovog sabijanja. U skladu sa tim, može se reći da se pritisak sastoji od elastič-

ne i toplotne komponente, pa se, analogno tome, i unutrašnja energija sabijenog gasa sastoji od elastične (potencijalne) i toplotne (kinetičke) energije.

Veoma je teško da se odrede jednačine stanja produkata detonacije u celom dijapazonu pritisaka, od vrednosti u Čepmen-Žugeovoj tački do nule (širenje u vakuumu). Tačan teorijski proračun jednačine stanja kondenzovanih eksplozivnih materija, čak i u slučaju poznatih potencijala međumolekularnih dejstava, u opštem slučaju nije moguć zbog teškoća u proračunu statističkih suma i neaditivnosti potencijala međumolekularnih dejstava. Radi toga je, pri određivanju jednačine stanja produkata detonacije kondenzovanih eksplozivnih materija, neophodno povezivanje teorijskih postavki o ponašanju produkata detonacije pri visokim gustinama, temperaturama i pritiscima sa odgovarajućim eksperimentalnim rezultatima. Na taj način dobijeno je nekoliko različitih poluempirijskih jednačina stanja kojima se opisuje ponašanje gasovitih produkata detonacije.

Za proračun teorijskih vrednosti parametara detonacije eksploziva i različitih eksplozivnih sastava danas se široko primenjuje poznata jednačina Becker-Kristiakowsky-Wilsona, ili tzv. BKW jednačina stanja [1]:

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

gde je:

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

Vrednosti empirijskih konstanti u BKW jednačini stanja i kovolumena gasovitih produkata detonacije

Tip parametra	β	b	α	θ	Kovolumeni								
					H ₂ O	H ₂	O ₂	CO ₂	CO	NH ₃	CH ₄	NO	N ₂
RDX	0,160	10,91	0,50	400	250	180	350	600	390	476	528	386	380
TNT	0,096	12,68	0,50	400	250	180	350	600	390	476	528	386	380

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

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_g),

V_g – molarna zapremina smeše gasovitih produkata (tj. razlika između molarne zapremine svih produkata detonacije i molarne zapremine čvrstih produkata) – $V = 1/\rho n_g$ (cm³/mol),

α , β , θ i b – empirijske konstante.

Vrednosti empirijskih konstanti u BKW jednačini stanja (tabela 1), koje je na osnovu eksperimentalnih podataka odredio Mader, pri proračunu detonacionih parametara daju najpribližnije rezultate za većinu eksplozivnih materija.

U tabeli 1 prikazane su i vrednosti kovolumena za gasovite produkte detonacije. Vrednosti kovolumena i konstanti date su tako da se prema izrazu (1) dobije vrednost pritiska u barima. U skladu sa tim, vrednost univerzalne konstante iznosi $R = 83,14 \text{ bar cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Kod velikog broja eksplozivnih materija, u produktima detonacije pojavljuje se i čvrsti ugljenik. S obzirom na vrednosti pritisaka pri detonaciji mora se uzeti u obzir i kompresibilnost čvrstog ugljenika. Prema Cowanu i Fickettu [1] stanje ugljenika pri visokim pritiscima i temperaturama opisuje se sledećim izrazom:

$$p = p_1(\lambda) + a(\lambda)T + (\lambda)T^2 \quad (2)$$

pri čemu je:

$$p_1(\lambda) = -2,4673 + 6,7692\lambda - 6,9555\lambda^2 + 3,0405\lambda^3 - 0,3869\lambda^4$$

$$a(\lambda) = -0,2267 + 0,2712\lambda$$

$$b(\lambda) = 0,08316 - 0,07804\lambda^{-1} + 0,03068\lambda^{-2}$$

$\lambda = \rho/\rho_0$ – stepen sabijanja čvrstog ugljenika, u odnosu na njegovu normalnu gustinu, pri standardnim uslovima, a koja iznosi $\rho_0 = 2,25 \text{ g/cm}^3$.

Primenom jednačine (2) dobijaju se vrednosti pritiska u megabarima ukoliko se temperatura izrazi u elektronvoltima (odnosno ako se za jedinicu temperature uzme 11605 K). Jednačina je primenljiva u području $0,95 < \lambda < 2,5$ i $0 < T < 5800 \text{ K}$.

Proračun sastava produkata detonacije kondenzovanih eksplozivnih materija

Određivanje ravnotežnog sastava produkata detonacije za date uslove p , V , T jeste prvi korak u izračunavanju detonacionih parametara.

Konačni produkti detonacije formiraju se preko različitih međureakcija, a sastav smeše i koncentracija pojedinih produkata određeni su stanjem ravnoteže u konkretnim uslovima odvijanja procesa. Radi određivanja ravnotežnog sastava

neophodno je da se, na osnovu zakona hemijske ravnoteže, postavi sistem algebarskih jednačina u kojem nepoznate čine brojevi molova pojedinih produkata detonacije.

Broj faza u produktima detonacije uzima se na osnovu Gibbsovog pravila faza, a broj i vrsta komponenata u pojedinim fazama može se pretpostaviti na osnovu bilansa kiseonika, eksperimentalnih analiza, podataka iz literature kao i na osnovu analize konstanti ravnoteže.

Za opisivanje ravnoteže kod eksplozivnih procesa, kao i kod drugih visokotemperaturnih procesa u području hemije, danas se primenjuju dve metode: metoda konstanti, koja je zasnovana na primeni zakona o dejstvu masa i zakona o očuvanju mase i metoda minimizacije slobodne energije.

Metoda konstanti daje zadovoljavajuće rezultate pri opisivanju ravnoteže pri sagorevanju eksplozivnih materija, kao i pri detonaciji gasovitih eksplozivnih materija, dok je za rešavanje složenijih eksplozivnih slučajeva termodinamičke ravnoteže, kao što je to slučaj detonacije kondenzovanih eksplozivnih materija, pogodnija metoda minimizacije slobodne energije. Ovu metodu razvili su White, Johnson i Dantzing [4], a kasnije je Mader prilagodio za kompjutersko rešavanje sistema jednačina.

Jedino svojstvo komponente u produktima, koje treba poznavati radi određivanja ravnotežnog sastava, jeste Gibsova ili Helmholtzova slobodna energija, odnosno hemijski potencijal. Podaci o standardnoj molarnoj Gibsovoj energiji za različite idealne gasove mogu se naći u termohemijskim tabelama, a u slučaju

realnih gasova treba uzeti u obzir i neidealnost primenom neke od jednačina stanja.

Gibsova slobodna energija smeše, koja se sastoji od n hemijskih komponenata i koja sadrži n_i brojeva molova i -te komponente, može se izraziti kao suma proizvoda hemijskih potencijala i broja molova pojedinih komponenata:

$$G = \sum_{i=1}^n n_i \mu_i \quad (6)$$

Ukoliko se izraz (6) podeli sa RT i član G/RT označi sa F , onda se izraz za izračunavanje slobodne energije smeše idealnih gasova može napisati u sledećem obliku:

$$F(X) = \sum_{i=1}^n f_i \quad (7)$$

gde je:

$X = (n_1, n_2, \dots, n_n)$ broj molova pojedinih produkata,

$$f_i = n_i \left[C_i + \ln \left(\frac{n_i}{N} \right) \right] \quad (8)$$

$$C_i = \frac{\mu_i}{RT} = \left(\frac{G_r^0 - G_0^0}{RT} \right)_i + \ln \left(\frac{p}{p_0} \right) \quad (9)$$

$$\bar{N} = \sum_{i=1}^n n_i \quad (10)$$

Izračunavanje ravnotežnog sastava svodi se na određivanje pozitivnog niza vrednosti n_i uz istovremeno zadovoljavanje uslova minimizacije slobodne energije i uslova o bilansu mase, koji se može napisati u sledećem obliku:

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} n_i = b_j \quad (j = 1, 2, \dots, m) \quad (11)$$

gde je:

m – broj različitih vrsta atoma u molekulu eksplozivne materije,

a_{ij} – broj atoma j -tog elementa u molekulu i -tog produkta (matrica elementarnog sastava produkata detonacije),

b_j – broj atoma j -tog elementa u molekulu eksplozivne materije (vektor elementarnog sastava eksplozivne materije).

Ako se pođe od nekog pozitivnog niza vrednosti broja molova pojedinih produkata $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$, koji zadovoljava uslov bilansa mase, i paralelno rešava uslov o minimizaciji slobodne energije, može se formirati n algebarskih jednačina tipa:

$$\frac{n_i}{y_i} - \frac{\bar{N}}{Y} + \sum_{j=1}^m \pi_j a_{ij} = -f_i(Y) \quad (12)$$

pri čemu je:

$f_i(Y) = C_i + \ln\left(\frac{y_i}{Y}\right)$ – za gasovite produkte,

$f_i(Y) = C_i$ – za čvrste produkte,

π – Lagrangeov multiplikator;

zatim m jednačina oblika:

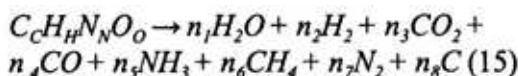
$$\sum_{j=1}^m \pi_j a_{ij} = b_j \quad (13)$$

Na temelju ukupnog broja molova, kao nepoznate veličine, može se formirati sledeća jednačina:

$$\sum_{i=1}^n n_i - \bar{N} = 0 \quad (14)$$

Sistem jednačina formiran na ovaj način rešava se, obično, iteracijskim metodama, kao što je, na primer, Njutnova metoda.

Jednačina dekompozicije kondenzovanih eksplozivnih materija pri procesu detonacije može se napisati u sledećem obliku:



Kao što se vidi, ovde se uzima u obzir i nastajanje slobodnog ugljenika, jer većina kondenzovanih eksplozivnih materija ima negativni bilans kiseonika.

Na osnovu ovakve šeme dekompozicije, matrica sastava produkata detonacije $-a_{ij}$ može se prikazati tabelom 2. Pri tome je vektor elementarnog sastava eksplozivnih materija $b_j = x, y, z, u$.

Tabela 2

Matrica sastava produkata detonacije

Produkti	C	H	N	O
H ₂ O	0	2	0	1
H ₂	0	2	0	0
CO ₂	1	0	0	2
CO	1	0	0	1
NH ₃	0	3	1	0
CH ₄	1	4	0	0
N ₂	0	0	2	0
C	1	0	0	0

Na osnovu jednačine (12) može se formirati sledeći sistem jednačina koji opisuje stanje hemijske ravnoteže u produktima detonacije:

$$\left(\frac{n_i}{y_i}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + 2\pi_2 + \pi_4 = -f_i(Y) \quad (16)$$

$$\left(\frac{n_2}{y_2}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + 2\pi_2 = -f_2(Y) \quad (17)$$

$$\left(\frac{n_3}{y_3}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + \pi_1 + 2\pi_4 = -f_3(Y) \quad (18)$$

$$\left(\frac{n_4}{y_4}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + \pi_1 + \pi_4 = -f_4(Y) \quad (19)$$

$$\left(\frac{n_5}{y_5}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + 3\pi_2 + \pi_3 = -f_5(Y) \quad (20)$$

$$\left(\frac{n_6}{y_6}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + \pi_1 + 4\pi_2 = -f_6(Y) \quad (21)$$

$$\left(\frac{n_7}{y_7}\right) - \left(\frac{\bar{N}}{Y}\right) + 2\pi_3 = -f_7(Y) \quad (22)$$

$$\pi_1 = -f_8(Y) \quad (23)$$

Prema jednačini (13), koja predstavlja zakon o bilansu mase, može se formirati sledeći sistem jednačina:

$$x = n_3 + n_4 + n_6 + n_8 \quad (24)$$

$$y = 2n_1 + 2n_2 + 3n_5 + 4n_6 \quad (25)$$

$$z = n_5 + 2n_7 \quad (26)$$

$$u = n_1 + 2n_3 + n_4 \quad (27)$$

Na osnovu ukupnog broja molova gasovitih produkata detonacije, kao nepoznate veličine, u skladu sa jednačinom (14) može se napisati sledeća jednačina:

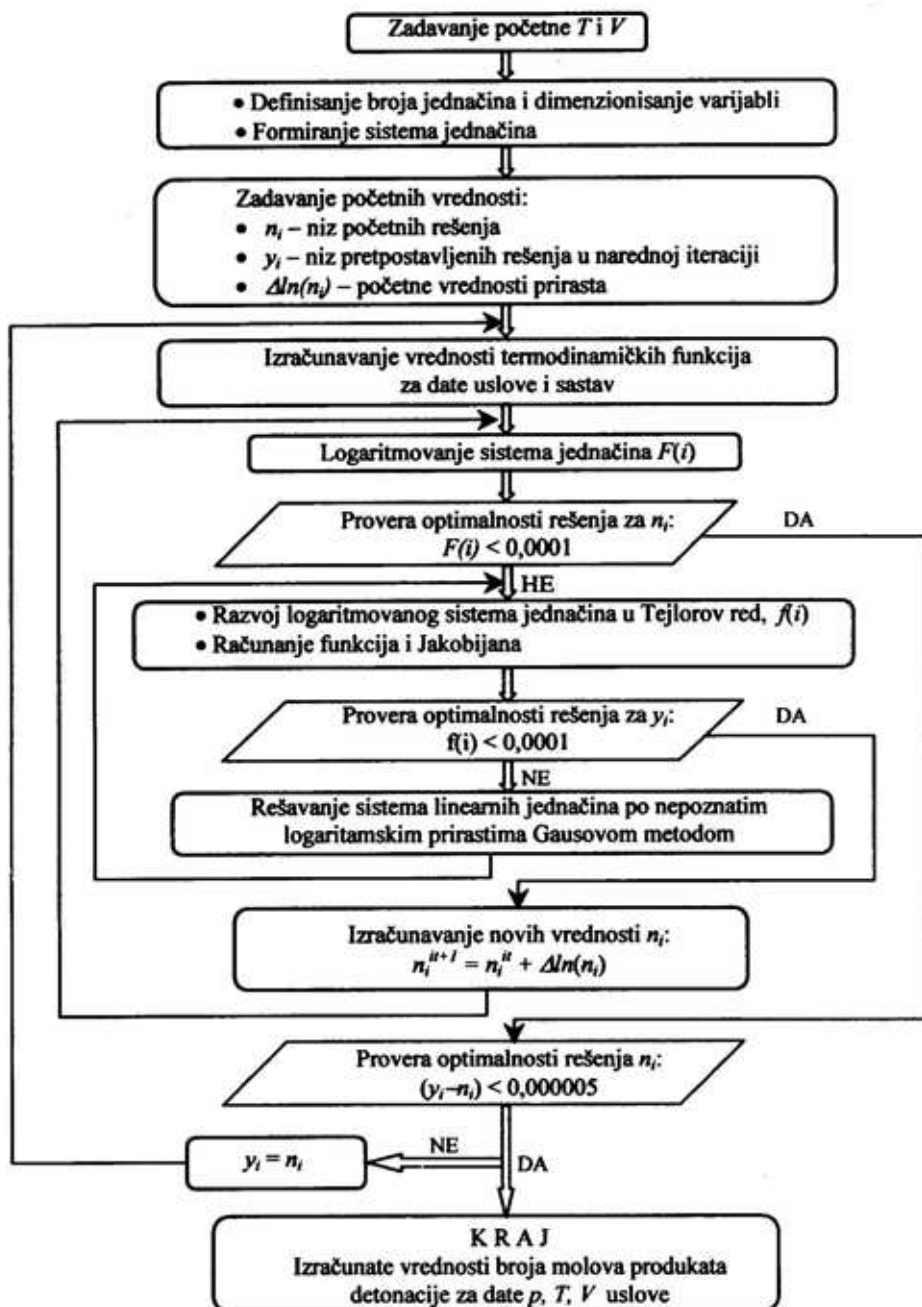
$$(n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_6 + n_7 + n_8) - \bar{N} = 0 \quad (28)$$

Rešavanjem ovako formiranog sistema od 13 linearnih algebarskih jednačina sa 13 nepoznatih dobija se broj molova pojedinih produkata detonacije za određeni pritisak, temperaturu i gustinu. Rešavanje ovog sistema jednačina vrlo je složeno bez primene računara. Metode rešavanja sistema jednačina primenom računara su, u osnovi, iteracijske – najčešće je to Njutnova metoda. Međutim, u mnogim slučajevima Njutnovom metodom se ne postiže dobra konvergencija rešenja, pa se primenjuje modifikovana metoda. Ona se razlikuje od originalne metode samo po tome što se osnovni sistem jednačina najpre logaritmuje, pa se na novodobijeni sistem primeni originalna Njutnova metoda. Na taj način, razvojem u Tejlorov red, dobija se sistem linearnih algebarskih jednačina sa nepoznatim logaritamskim prirastima početnom nizu rešenja:

$$\Delta \ln(n_i) = \Delta \ln(n_i)^{it+1} - \Delta \ln(n_i)^{it} \quad (29)$$

Rešavanjem sistema jednačina termodinamičke ravnoteže na ovaj način postiže se dobra konvergencija rešenja, čak i u slučaju da početna pretpostavljena rešenja znatno odstupaju od stvarnih. Time je izbegnut problem dovoljno tačnog zadavanja početnih rešenja za širok dijapazon gustina, a donekle i vrsta eksplozivnih materija.

Na slici 1 prikazan je blok-dijagram toka rešavanja sistema jednačina termodinamičke ravnoteže u produktima detonacije po modifikovanoj Njutnovoj metodi.



Sl. 1 – Dijagram toka rešavanja sistema jednačina termodinamičke ravnoteže

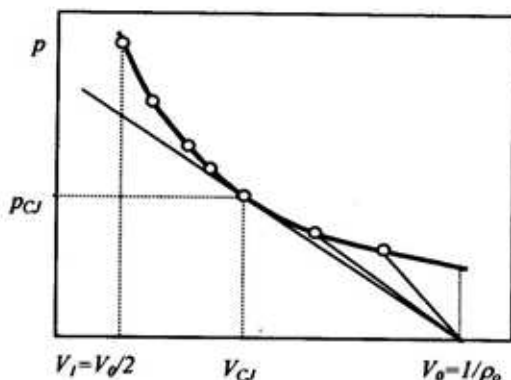
Proračun teorijskih vrednosti detonacionih parametara

Postupak proračuna parametara detonacije na osnovu sistema jednačina (1 do 5), uz korišćenje BKW jednačine stanja, veoma je složen i praktično nije moguć bez upotrebe računara. U osnovi, postupak je iteracijski i sastoji se od nekoliko faza.

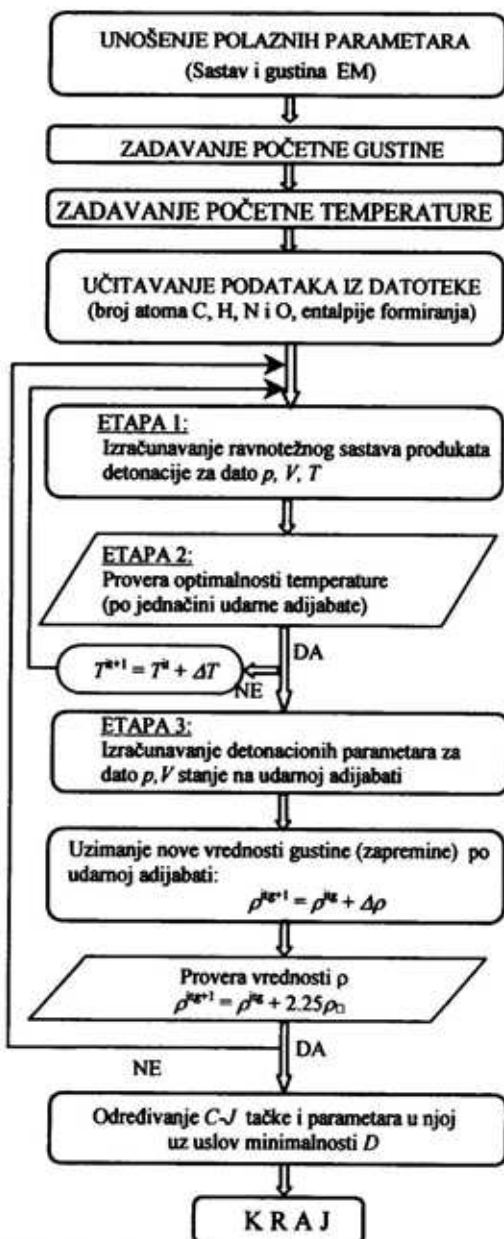
U prvoj fazi se za datu specifičnu zapreminu (odnosno gustinu) i neku pretpostavljenu temperaturu izračunava ravnotežni sastav produkata detonacije, kako je prethodno već objašnjeno. Zatim se na osnovu specifične zapremine, temperature i sastava produkata detonacije, primenom BKW jednačine stanja računa vrednost pritiska.

U drugoj fazi se proverava optimalnost temperature i izračunava stvarna temperatura procesa za zadate početne uslove. Temperatura se izračunava iteracijski, na osnovu jednačine udarne adijabate (3) sve dok, uz željenu tačnost, jednakost ne bude zadovoljena.

U sledećoj fazi obavlja se proračun detonacionih parametara po udarnoj adi-



Sl. 2 – Prikaz koncepcije utvrđivanja C-J tačke i određivanja brzine detonacije



Sl. 3 – Blok-dijagram postupka za proračun detonacionih parametara kondenzovanih eksplozivnih materija

jabati, uz povećavanje gustine za odabrani korak. Pritisak detonacije računa se na osnovu BKW jednačine, brzina detonacije i masena brzina – na osnovu jednačina

(1) i (2), a temperatura – iteracijski dok se ne ispuni jednakost (3).

U poslednjoj fazi, na osnovu uslova minimalnosti brzine detonacije, određuje se C-J tačka i parametri detonacije u njoj.

Koncepcija utvrđivanja C-J tačke i brzine detonacije grafički je prikazana na slici 2.

Na slici 3 prikazan je uprošćen blok-dijagram postupka za proračun detonacionih parametara kondenzovanih eksplozivnih materija. Međutim, treba naglasiti da je praktična realizacija ovog postupka izuzetno složena zbog nepouzdanosti termodinamičkih i drugih podataka koji se u literaturi razlikuju, kao i

zbog problema sa konvergencijom rešenja iterativnog postupka računanja, relativno dugog vremena računanja, čak i na boljim računarima, itd.

Rezultati proračuna

Prema prikazanom numeričkom modelu procesa detonacije sačinjeno je programsko rešenje u PASCALU. Testiranje i provera modela izvršeni su za više vrsta eksploziva i malodimnih baruta različitih gustina, upoređivanjem vrednosti pritiska i brzina detonacije dobijenih proračunom sa eksperimentalnim vrednostima (tabela 3).

Tabela 3

Rezultati testiranja modela i eksperimentalne vrednosti za eksplozive

Eksplozivna materija	ρ_0 (g/cm ³)	Eksperiment*		Proračun		Δ_D (%)	Δ_p (%)
		D (m/s)	p (Mpa)	D (m/s)	p (Mpa)		
RDX	1,8	8754	34,7	8796	34,1	0,48	1,73
RDX	1	5981	-	6043	10,4	1,04	-
TNT	1,64	6950	19	7040	20,5	1,29	7,89
TNT	1,061	5254	11	5450	9,04	3,73	17,8
TNT	0,732	4370	5,1	4490	4,8	2,75	5,88
HMX	1,9	9100	39,3	9248	39,1	1,63	0,51
PETN	1,67	7980	30	8040	28,1	0,75	6,33
PETN	1	5780	8,7	5980	10	3,46	14,9
TETRIL	1,7	7560	24,9	7650	25	1,19	0,40
TATB	1,895	7860	31,5	8005	30,1	1,84	4,44
DATB	1,788	7520	25,9	7702	27,1	2,42	4,63
NGL	1,59	7580	-	7645	24,4	0,86	-
NM	1,128	6290	14,1	6323	14,1	0,52	0
HMX/TNT 76,3/23,7	1,809	8476	34,3	8660	34	2,17	0,87
HMX/TNT 78/22	1,82	8480	34,2	8749	33,7	3,17	1,46
RDX/TNT 77/23	1,743	8250	31,3	8391	30,7	1,71	1,92
RDX/TNT 64/36	1,713	8030	29,4	8175	28,3	1,81	3,74
PETN/TNT 50/50	1,70	7530	25,5	7592	25,6	0,82	0,39
NGB-031	0,877	5455	-	5473	79,4	0,33	-
NGB-061	0,898	5485	-	5511	85,3	0,47	-
NGB-081	0,957	5333	-	5656	93,2	6,06	-
NC-01	0,557	3929	-	4096	31,2	4,25	-
NC-011	0,621	4446	-	4564	40,2	2,65	-
Prosečno odstupanje [%]						1,97	4,55

* Eksperimentalne vrednosti prema referencama [1, 5 i 6].

Rezultati proračuna pokazuju da se za testirane eksplozivne dobijaju relativno dobra slaganja izračunatih i eksperimentalnih vrednosti brzine i pritiska detonacije. Slaganja su izuzetno dobra za veće vrednosti gustina eksplozivnih materija, dok su za niže vrednosti gustina odstupanja nešto veća. Istovremeno, postignuto je vrlo dobro slaganje brzina detonacije za nekoliko vrsta malodimnih baruta sa relativno malim gustinama punjenja, što pokazuje da su primenjeni pristup u numeričkom modeliranju detonacije i realizovano softversko rešenje ispravni.

Veća odstupanja vrednosti pritiska detonacije, u odnosu na vrednosti brzina detonacije, mogu se objasniti nepouzdanim eksperimentalnim vrednostima pritiska čije je pouzdano merenje prilično teško. Jedan od razloga odstupanja proračunatih i eksperimentalnih vrednosti je i prilična raznolikost literaturnih vrednosti termodinamičkih veličina eksplozivnih komponenti.

Za povećanje pouzdanosti rezultata, naročito pri manjim gustinama, bilo bi korisno ispitati primenljivost nekih drugih jednačina stanja produkata detonacije koje se sreću u literaturi ili izvršiti posebnu parametarizaciju BKW jednačine stanja za područje nižih gustina.

Razvijeni program potrebno je dalje usavršavati, tako da bude primenljiv i za

eksplozivne sastave koji sadrže i aluminijum.

Zaključak

Prikazani model detonacije i razvijeno softversko rešenje omogućuju teorijski proračun parametara detonacije sa relativno velikom tačnošću, kako brizantnih eksploziva i njihovih smeša, tako i baruta u širokom intervalu gustina.

Najbolji rezultati dobijaju se za eksplozivne sastave većih gustina (preko 1 g/cm^3), dok je pri nižim gustinama odstupanje nešto veće.

Realizovano programsko rešenje može korisno da posluži za predviđanje detonacionih parametara različitih eksplozivnih sastava i da bitno ubrza i pojedini postupak osvajanja proizvodnje eksplozivnih punjenja unapred zadatih karakteristika.

Literatura:

- [1] Mader, C. L.: Numerical modeling of detonations, University of California Press, Los Angeles, 1979.
- [2] Hobbs, M. L. i dr.: Extension of the JCZ Product Species Data Base, 11. internacionalni simpozijum o detonaciji, Snowmass, Colorado, 1998.
- [3] Sućeska, M.: Reološka i detonaciona svojstva livenih kompozitnih eksploziva sa polimernim vezivom, doktorska disertacija, VVTŠ, Zagreb, 1991.
- [4] White, B. W. i dr.: Chemical Equilibrium in Complex Mixtures, *J. of Chem. Phys.*, 28. 5. 1958.
- [5] Baker, E. L.: Optimized JCZ3 procedures for the Detonation Properties of Explosives, 11. internacionalni simpozijum o detonaciji, Snowmass, Colorado, 1998.
- [6] Dimitrijević, R.: Ponašanje malodimnih baruta u uslovima detonacije, magistarski rad, VTA VJ, Beograd, 1996.