

## 고성능폭약의 성능에 영향을 미치는 요소들의 이론적 계산

권 상 기<sup>1)</sup>

### Theoretical calculation of the parameters influencing on the performance of high explosives

Sangki Kwon<sup>1)</sup>

**ABSTRACT** : In order to determine the performance of an explosive, various parameters such as the detonation pressure, detonation velocity, heat generation, and fume generation of the explosive should be accurately described. In this study, the pressure increase, volume expansion, temperature increase, and detonation velocity of high explosives were tried to determined theoretically based on thermochemical theories. From this study, a Fortran program for calculating the explosion parameters, which can influence on the performance of explosives, was developed and applied to the high-explosives, ANFO and NG.

**Key words** : VOD, Detonation pressure, Thermochemical theory, High-explosive, ANFO

**초 록** : 고성능 폭약의 성능을 결정하기 위해서는 폭발압력, 폭발속도, 열, 발생하는 가스 등이 정확히 기술될 수 있어야 한다. 본 연구에서는 실측하는데 어려움이 따르는 폭굉 시의 현상을 이해하기 위해 폭약이 폭발할 때 발생하는 압력, 부피팽창, 온도, 폭발속도 등을 이론적으로 계산하고자 하였다. 본 연구를 통해 폭발 현상을 표현하기 위한 계산 프로그램이 개발되었으며 이 프로그램을 이용하여 ANFO와 NG에 대해 폭약성능에 영향을 미치는 요소들을 이론적으로 계산하였다.

**핵심어** : 폭굉속도, 폭굉압, 열화학이론, High-explosives, ANFO

#### 1. 서 론

폭약의 폭발이란 열, 충격, 폭음을 일으키는 매우 빠른 속도의 화학반응으로서 폭발의 결과 화학적으로 보다 안전한 형태인 가스를 발생시키게 된다. 폭약의 성능을 결정해주는 것으로는 폭굉속도, 폭굉압(Detonation Pressure), 폭발 후가스(Fume) 특성 등을 들 수 있다. 폭굉속도(VOD, Velocity of Detonation)란 폭발과 폭약을 통해 전달되는 속도로서 폭약의 강도를 결정하는데 가장 중요한 성질이다.

폭굉속도는 밀폐상태에서 측정한 값과 개방상태에서 측정한 값이 있으며 밀폐 폭굉속도는 발파공이나 기타 밀폐된 공간에 위치한 폭약이 폭발할 때 폭약을 통해 전달되는 폭발과의 속도이며 개방상태에서의 폭굉속도는 밀폐 폭굉속도의 70-80% 정도이다 (Richard, 1969). 폭약은 보통 밀폐된 상태에서 폭발되기 때문에 밀폐 폭굉속도가 보다 더 중요하다 할 수 있다.

폭발시 발생하는 충격과의 크기가 폭굉압력에 의해 결정되기 때문에 폭굉압력이 폭약의 성능을 보다 잘 나타낼 수 있지만 폭굉압을 측정하는 것은 쉽지 않기 때문에 보통의 경우 폭굉압력을 측정하기 보다는 밀도와 폭굉속도를 사용하여 폭굉압력을 추정한다.

폭발에 의해 발생하는 가스가 수증기, 이산화탄소와 질소인 경우가 가장 이상적이다. 하지만 실제 발파에서는 CO, NOx 등 유독 가스의 발생이 있게 된다. 폭발 과정에서 산소의 과잉 공급은 NO와 NO<sub>2</sub>를 발생시키는 반면 산소가 부족할 때는 CO가 발생한다. ANFO에 의해 발생하는 유해가스는 CO와 NO이며 다이내믹스의 폭발에 의해 발생하는 유해가스는 NO, CO, SO<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub> 등이다. 이러한 후가스의 특성은 노천발파에서는 중요하지 않지만 폐쇄된 공간에서 실시되는 지하발파에서 중요

1)정회원, 한국원자력연구소  
원고 접수일 : 1999년 12월 28일  
원고 심사완료일 : 2000년 5월 26일

하게 고려되어야 한다.

이와 같이 폭약의 성능을 결정하기 위해서는 여러 가지 요소들이 측정되어야 하지만 실제 현장에서 이를 측정하는 것에는 어려움이 따른다. 따라서 본 연구에서는 열역학이론에 기초하여 주어진 폭약성분의 반응에 의해 발생하는 폭굉 및 폭발시 발생하는 생성물, 발생압력과 폭굉속도, 발생열 등을 이론적으로 계산하는 포트란 프로그램을 만들었으며 이 프로그램을 이용하여 고성능폭약(High-Explosive)의 폭발압, 폭굉속도, 발생열, 후가스를 계산하고자 하였다. 여기서 고성능폭약이란 폭발과정에서 폭굉(Detonation)을 발생시키는 폭약으로서 다이너마이트, PETN, ANFO, 에멀전 등이 대표적인 고성능폭약이다.

## 2. 폭발에너지 계산 이론

### 2.1 폭굉과 폭연

폭발이란 폭약내의 평형상태가 파괴되면서 다량의 열과 가스가 발생하는 화학적변화로서 충격에너지의 발산여부에 따라 폭연(deflagration)과 폭굉(detonation)으로 나눌 수 있다.

폭연이란 저성능폭약에서의 폭발반응으로서 반응속도가 음속보다 느리며 따라서 폭발에 의해 충격파가 발생하지 않는다. 흑색화약에서의 화학반응이 이에 속한다. 폭연에 의해 발생하는 폭발 압력은 350 MPa이하로서 이 압력은 주로 폭발 가스에 의해 발생한다. 흑색화약의 경우 화학반응은 압력의 증가에 따라 빨라지며 압력은 화학반응의 속도에 비례하여 증가한다. 이와 같이 폭연 과정에서는 압력의 증가와 반응속도의 증가가 점진적으로 일어나며 일반적으로 반응속도는 500-1600 m/sec 정도이다. 폭연 과정에 있는 폭약의 밀도에는 변화가 없으며 반응 후 가스의 발생으로 증가된 부피의 팽창이 두드러진다.

폭굉이란 폭약에서의 폭발반응이 음속보다 빠르고 이에 따라 충격파가 발생하는 것을 말하며 TNT, PETN, 다이너마이트와 ANFO로 대표되는 blasting agent 들은 폭굉을 일으킨다 (Franklin and Dusseault, 1989). 폭굉 시 발생하는 충격파에 의한 압축력에 의해 350-27,000 MPa의 높은 압력이 충격파의 전면에서 발생하며 화학반응의 속도도 음속보다 빨라 1,500-10,000 m/sec 정도이다. 충격파의 영향으로 폭굉 상태에서의 폭약의 밀도는 원래의 밀도보다 높아지며 또한 높은 압력과 함께 열이 발생하고 압축파의 형태로 주위로 에너지를 빠르게

전달하게 된다.

고성능폭약이 소량일 경우 천천히 연소 되지만 일정 임계질량 이상일 경우에 연소속도가 매우 빨라지며 충격파를 발생시키면서 폭굉을 일으킨다. 이 임계질량은 폭약의 특성으로 TNT의 경우 임계질량이 1톤이다. 하지만 실제 폭발에서는 뇌관을 사용하여 기폭하기 때문에 소량의 TNT도 폭굉 반응을 일으킨다. 그 외에 폭굉에 영향을 미치는 요소로는 폭약성분, 입자크기, 반응속도, 입자 밀도, 장전밀도, 생성열(Heat of formation), 열용량(Heat capacity)와 같은 열-화학적 물성 등으로 이들이 폭약의 폭굉속도, 폭굉압, 온도 등을 결정하게 된다.

가스 매질에서 화학반응에 의해 발생하고 자체적으로 진행되는 충격파는 Chapman과 Jouguet에 의해 Fig. 1과 같이 설명되었다. Fig. 1에서 오른쪽은 폭발의 화학반응이 일어나지 않은 원래 상태의 폭약이고 왼쪽은 폭발반응이 모두 끝난 상태를 나타낸다. 안정한 상태가 시작되는 가상의 면은 흔히 Chapman-Jouguet면 (C-J면)으로 불리며 화학반응이 진행되는 반응영역에서는 질량, 모멘트, 그리고 에너지보존법칙이 성립한다. Fig. 2는 화학반응이 일어나는 반응대(Reaction zone)에서의 온도, 압력, 밀도, 반응완성도(Fraction reacted)의 변화를 개략적으로 보여주고 있다. 온도의 경우 폭발이 진행되는 방향으로 폭굉 전면에서부터 서서히 온도가 증가하여 최고점에 다다른 후 서서히 감소하는 경향을 보인다. 반면 압력의 경우 폭굉전면에서는 폭굉 충격파의 영향으로 발생한 높은 압력이 반응대에서 급속히 감소하게 된다. 폭약의 밀도도 폭굉 전면에서 높다가 반응대에서 서서히 감소하는 경향을 나타낸다. 폭약에 따라 반응대의 크기는 다르며 TNT나 RDX, PETN 등은 0.2-0.3 cm 정도의 매우 짧은 반응대를 가진다. 다이너마이트의 경우 0.6 cm의 반응대를 가지며 ANFO는 2 cm 이상의 반응대를

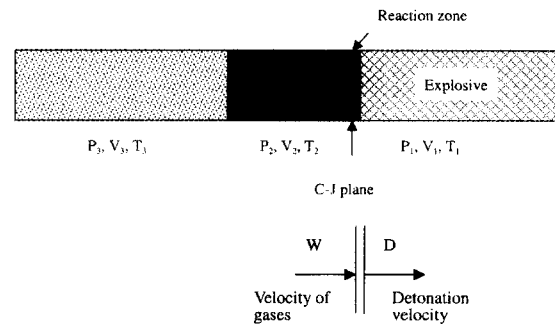


Fig. 1. Explosion process in high explosive.

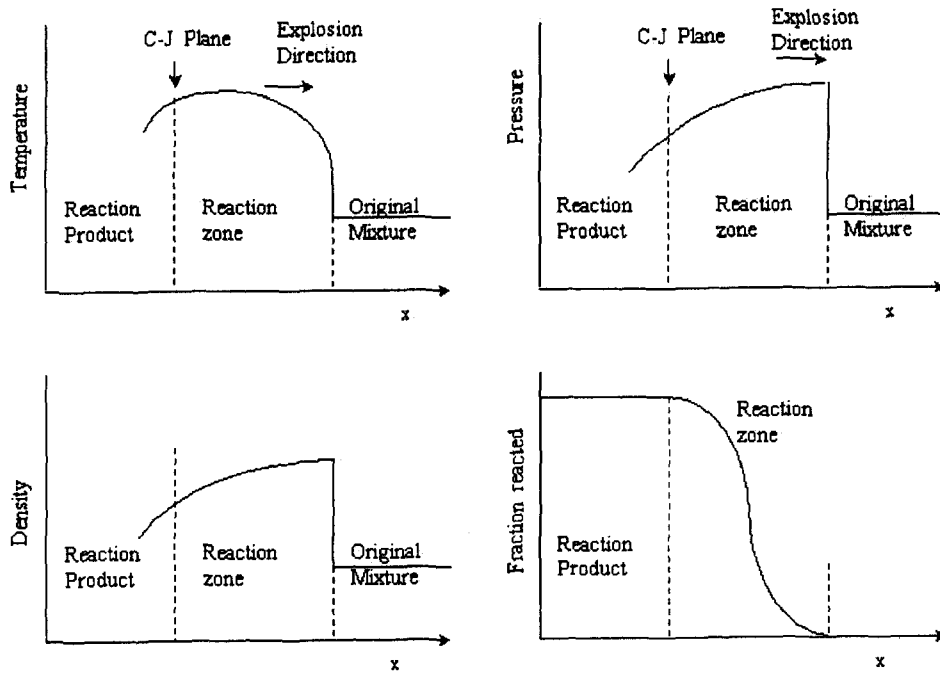


Fig. 2. Variation of temperature, pressure, density and fraction reacted in reaction zone (after Rinehart and Pearson, 1963).

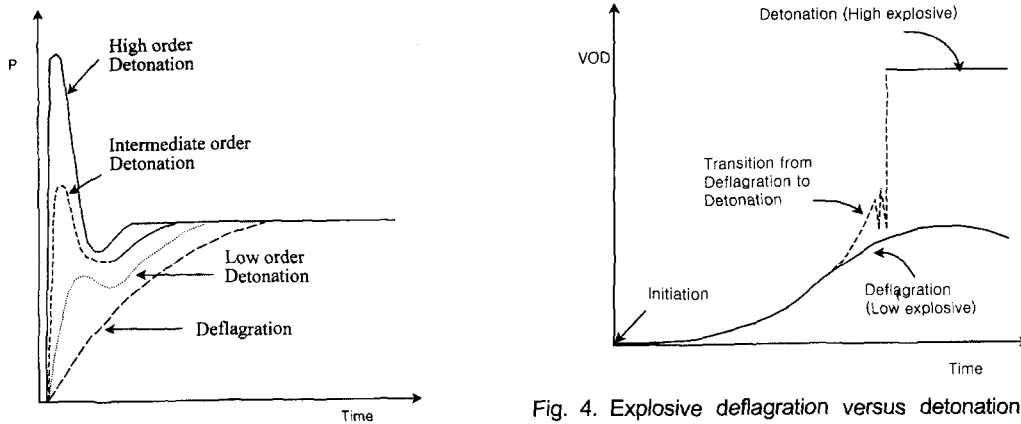


Fig. 3. Pressure-time profile for explosive reactions.

Fig. 4. Explosive deflagration versus detonation and transition from deflagration to detonation (Cook, 1958)

가진다(Rinehart and Pearson, 1963).

Fig. 3은 화학성분이 같은 폭약에서 폭연 또는 폭굉이 발생할 때 시간에 따른 압력의 변화를 보여주고 있다. 폭굉의 경우 매우 짧은 시간 내에 압력이 최고점에 도달한 후 일정 수준의 압력으로 감소되는 패턴을 보이며 폭연의 경우 압력의 증가가 서서히 일어난다. 폭굉의 정도에 따라 최고 압력에는 차이가 나지만 최종적인 압력은

동일하다. Fig. 4는 시간에 따른 폭굉속도의 변화를 보여주고 있다. 폭연의 경우 화학반응의 속도가 낮지만 폭굉에서는 충격파의 발생과 함께 폭발의 진행속도가 매우 빠르게 나타남을 보여주고 있다.

폭발시 발생하는 폭굉속도는 어느 정도 정확하게 측정이 가능하지만 온도, 압력, 발생가스등은 정확히 측정할 수 없기 때문에 열역학이론에 기초하여 수학적으로 계산

하여야 한다. 온도, 압력, 속도, 부피 사이의 관계는 폭발 충격과 전후에서의 에너지, 모멘텀, 질량 보존의 법칙을 적용하여 유도할 수 있다.

2.2 발생열과 발생가스의 계산

폭발과정의 이론적 해석에서 중요한 사항은 폭발시 발생하는 열과 발생가스이다. 발생가스의 총량을 통해 발파 공 내 가스에 의한 팽창에너지를 결정하게 되는데 발생하는 가스의 종류는 산소공급의 균형여부에 따라 달라지게 된다. 따라서 폭약의 성분으로부터 반응식을 완성하는 것이 우선되어야 하며 반응식의 완성 후 발생열을 계산하게 된다. 발생열과 발생가스의 계산순서는 다음과 같다 (Stelloh, 1961).

2.2.1 폭약 구성 원소의 몰 수 계산

폭약의 반응식을 완성하기 위해서는 우선 폭약의 화학 조성으로부터 구성원소의 몰 수를 계산하여야 한다. 다음 Table 1은 AN(NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>) 94%, 연료유(CH<sub>4</sub>) 6%의 비율로 혼합된 100g의 ANFO에서의 구성원소의 몰 수를 계산하는 것을 보여준다.

AN이 94%이고 연료유가 6% 이므로

$$C_o = 7.1276 \times 0.06 = 0.4277$$

$$H_o = 4.997 \times 0.94 + 14.255 \times 0.06 = 5.55$$

$$N_o = 2.498 \times 0.94 = 2.348$$

$$O_o = 3.748 \times 0.94 = 3.523$$

2.2.2 폭발 반응식의 완성

Table 2 에서 보는 것과 같이 C, H, N, O의 조성에 따라 발생할 수 있는 반응식을 구성한다. 이때 별표로 표시된 자유 탄소 C가 관련되는 반응식은 고려하지 않는다. 반응에 관계되는 분자들을 포함하는 물질수지식 (Material balance equation)을 구성하게 되는데 ANFO와 같이 H, N, O, C로 구성되는 폭약의 경우 물질수지식은 다음과 같이 구성된다.

$$H_o - 2(H_2) - 2(H_2O) - 3(NH_3) - 4(CH_4) - 4(CH_3OH) - 2(CH_2O_2) - (OH) - (H) = 0 \tag{1}$$

$$N_o - 2(N_2) - (NH_3) - (NO) - (N) = 0 \tag{2}$$

$$O_o - 2(CO_2) - (CO) - (H_2O) - (CH_3OH) - 2(CH_2O_2) - 2(O_2) - (OH) - (NO) - (O) = 0 \tag{3}$$

$$C_o - (CO_2) - (CO) - (CH_4) - (CH_3OH) - (CH_2O_2) = 0 \tag{4}$$

반응식으로부터 H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>를 기본 분자로 다른 분자들을 이들 기본분자의 함수로 표현한다. 이들이 기본분자로 사용되는 이유는 이들 분자들은 발생량이 비교적 많고 간단하면서도 4개의 기본원자를 포함하고 또한 상호 독립적이기 때문에 다른 분자들을 표현하는데 유리하기 때문이다.

$$(H_2O) = K_2(H_2)(CO_2)/(CO) \tag{5}$$

$$(NH_3) = (F/K_9)(N_2)^{1/2}(H_2)^{3/2} \tag{6}$$

$$(CH_4) = K_6F^2(H_2)^2(CO)^2/(CO_2) \tag{7}$$

$$(CH_3OH) = (F^2/K_{11})(H_2)^2(CO) \tag{8}$$

$$(CH_2O_2) = K_{12}F(H_2)(CO_2) \tag{9}$$

$$(O_2) = (K_5/F)(CO_2)^2/(CO)^2 \tag{10}$$

$$(OH) = (K_8/F^{1/2})(H_2)^{1/2}(CO_2)/(CO) \tag{11}$$

$$(NO) = (K_8/F^{1/2})(N_2)^{1/2}(CO_2)/(CO) \tag{12}$$

$$(H) = (K_1/F^{1/2})(H_2)^{1/2} \tag{13}$$

$$(N) = (K_3/F^{1/2})(N_2)^{1/2} \tag{14}$$

$$(O) = (K_{14}/F)(CO_2)/(CO) \tag{15}$$

여기서 K<sub>i</sub>는 평형상수(Equilibrium constant)이고 F는 Fugacity 이다. Fugacity는 이상적인 가스에 대한 해를 실제 가스에 대해 보정하기 위해 도입하는 변수이다. 위 식들을 단순화하기 위해 새로운 변수 x<sub>1</sub>, x<sub>2</sub>, x<sub>3</sub>, x<sub>4</sub>를 도입한다.

$$x_1 = (H_2)F^{1/2} \tag{16}$$

$$x_2 = (N_2)^{1/2} \tag{17}$$

$$x_3 = (CO_2)/(CO)F^{1/2} \tag{18}$$

Table 1. Calculation of mole numbers of the basic atoms in ANFO

Name	%	Formula	Molecular weight	Number of gram atoms/100g			
				C <sub>o</sub>	H <sub>o</sub>	N <sub>o</sub>	O <sub>o</sub>
AN	94	NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	80.05	-	4.997	2.498	3.748
FO	6	CH <sub>4</sub>	16	7.1276	14.255	-	-

Table 2. List of reactions and definitions of equilibrium constants

1	$H \leftrightarrow \frac{1}{2}H_2$	$K_1 = \frac{(H)}{(H_2)^{1/2}} F^{1/2}$
2	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	$K_2 = \frac{(CO)(H_2O)}{(CO_2)(H_2)}$
3	$N \leftrightarrow \frac{1}{2}N_2$	$K_3 = \frac{(N)}{(N_2)^{1/2}} F^{1/2}$
4*	$2CO \leftrightarrow CO_2 + C$	$K_4 = \frac{(CO)^2}{(CO_2)} F$
5	$O_2 + 2CO \leftrightarrow 2CO_2$	$K_5 = \frac{(O_2)(CO)^2}{(CO_2)^2} F$
6	$CH_4 + CO_2 \leftrightarrow 2CO + 2H_2$	$K_6 = \frac{(CH_4)(CO_2)}{(CO_2)^2(H_2)^2} F^{-2}$
7	$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + \frac{1}{2}H_2$	$K_7 = \frac{(CO)(OH)}{(CO_2)(H_2)^{1/2}} F^{1/2}$
8	$NO + CO \leftrightarrow CO_2 + \frac{1}{2}N_2$	$K_8 = \frac{(CO)(NO)}{(CO_2)(N_2)^{1/2}} F^{1/2}$
9	$\frac{1}{2}N_2 + \frac{3}{2}H_2 \leftrightarrow NH_3$	$K_9 = \frac{(N_2)^{1/2}(H_2)^{3/2}}{(NH_3)} F$
10*	$HNC \leftrightarrow C + \frac{1}{2}N_2 + \frac{1}{2}H_2$	$K_{10} = \frac{(HCN)}{(N_2)^{1/2}(H_2)^{1/2}}$
11	$CO + 2H_2 \leftrightarrow CH_3OH$	$K_{11} = \frac{(CO)(H_2)^2}{(CH_3OH)} F^2$
12	$CH_2O_2 \leftrightarrow H_2 + CO_2$	$K_{12} = \frac{(CH_2O_2)}{(H_2)(CO_2)} F^{-1}$
13	$CH_2O \leftrightarrow H_2 + CO$	$K_{13} = \frac{(CH_2O)}{(CO)(H_2)} F^{-1}$
14	$O + CO \leftrightarrow CO_2$	$K_{14} = \frac{(O)(CO)}{(CO_2)} F$
15*	$C_2H_4 \leftrightarrow 2C + 2H_2$	$K_{15} = \frac{(C_2H_4)}{(H_2)^2} F^{-1}$
16*	$C_2H_6 \leftrightarrow 2C + 3H_2$	$K_{16} = \frac{(C_2H_6)}{(H_2)^3} F^{-2}$
17*	$C_2H_5OH \leftrightarrow C + CO + 3H_2$	$K_{17} = \frac{(C_2H_5OH)}{(CO)(H_2)^3} F^{-3}$

$$x_4 = (\text{CO})F^{1/2} \quad (19)$$

반응에 관여하는 모든 분자들은 다음과 같이 이들 4개 변수의 함수로 표시할 수 있다.

$$(\text{H}_2) = r_1 x_1 \quad r_1 = F^{-0.5} \quad (20)$$

$$(\text{N}_2) = r_2 x_2^2 \quad r_2 = 1 \quad (21)$$

$$(\text{CO}_2) = r_3 x_3 x_4 \quad r_3 = 1 \quad (22)$$

$$(\text{CO}) = r_4 x_4 \quad r_4 = F^{-0.5} \quad (23)$$

$$(\text{H}_2\text{O}) = r_5 x_1 x_3 \quad r_5 = K_2 \quad (24)$$

$$(\text{NH}_3) = r_6 x_1^{3/2} x_2 \quad r_6 = F^{1/4}/K_9 \quad (25)$$

$$(\text{CH}_4) = r_7 x_1^2 x_4 / x_3 \quad r_7 = K_6 \quad (26)$$

$$(\text{CH}_3\text{OH}) = r_8 x_1^2 x_4 \quad r_8 = F^{0.5}/K_{14} \quad (27)$$

$$(\text{CH}_2\text{O}_2) = r_9 x_1 x_3 x_4 \quad r_9 = K_{12}F^{0.5} \quad (28)$$

$$(\text{O}_2) = r_{10} x_3^2 \quad r_{10} = K_5 \quad (29)$$

$$(\text{OH}) = r_{11} x_1^{1/2} x_3 \quad r_{11} = K_7/F^{1/4} \quad (30)$$

$$(\text{NO}) = r_{12} x_2 x_3 \quad r_{12} = K_8 \quad (31)$$

$$(\text{H}) = r_{13} x_1^{1/2} \quad r_{13} = K_1/F^{3/4} \quad (32)$$

$$(\text{N}) = r_{14} x_2 \quad r_{14} = K_3/F^{1/2} \quad (33)$$

$$(\text{O}) = r_{15} x_3 \quad r_{15} = K_{14}/F^{1/2} \quad (34)$$

따라서 식 (1)-(4)에 표시된 물질수지식들은  $x_1, x_2, x_3, x_4$ 의 함수인  $f_1(x_i), f_2(x_i), f_3(x_i), f_4(x_i)$  로 표시된다

$$f_1(x_1, x_2, x_3, x_4) = f_1(x_i) = 0 \quad (35)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3, x_4) = f_2(x_i) = 0 \quad (36)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3, x_4) = f_3(x_i) = 0 \quad (37)$$

$$f_4(x_1, x_2, x_3, x_4) = f_4(x_i) = 0 \quad (38)$$

해를 구하기 위해 먼저 초기값  $x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0$  를 가정한다.

$$f_1(x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0) = f_1(x_i^0) = R_1 \quad (39)$$

$$f_2(x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0) = f_2(x_i^0) = R_2 \quad (40)$$

$$f_3(x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0) = f_3(x_i^0) = R_3 \quad (41)$$

$$f_4(x_1^0, x_2^0, x_3^0, x_4^0) = f_4(x_i^0) = R_4 \quad (42)$$

식 (1)-(4)를 이용하여  $R_1, R_2, R_3, R_4$ 를 계산하게 되는데 물질수지식을 완성하기 위해서는  $R_1, R_2, R_3, R_4$ 가 모두 0이 되게 하는  $x_1, x_2, x_3, x_4$ 를 구해야 한다. 이를 위해 테일러 확장공식을 이용하여 위 식들을 다음과 같이 확장한다. 함수  $f_1$ 의 경우

$$f_1(x_i^0 + \Delta x_i) = f_1(x_i^0) + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_3} \Delta x_3 + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_4} \Delta x_4 + \dots = 0 \quad (43)$$

로 표시되고  $f_2, f_3, f_4$ 에 대해서도 동일하게 적용한 후 일차미분 이외의 항들을 무시하면 다음 식들을 얻을 수 있다.

$$\frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_3} \Delta x_3 + \frac{\partial f_1(x_i^0)}{\partial x_4} \Delta x_4 = -R_1 \quad (44)$$

$$\frac{\partial f_2(x_i^0)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_2(x_i^0)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial f_2(x_i^0)}{\partial x_3} \Delta x_3 + \frac{\partial f_2(x_i^0)}{\partial x_4} \Delta x_4 = -R_2 \quad (45)$$

$$\frac{\partial f_3(x_i^0)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_3(x_i^0)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial f_3(x_i^0)}{\partial x_3} \Delta x_3 + \frac{\partial f_3(x_i^0)}{\partial x_4} \Delta x_4 = -R_3 \quad (46)$$

$$\frac{\partial f_4(x_i^0)}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_4(x_i^0)}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial f_4(x_i^0)}{\partial x_3} \Delta x_3 + \frac{\partial f_4(x_i^0)}{\partial x_4} \Delta x_4 = -R_4 \quad (47)$$

$f_i(x)$ 의  $x_i$ 에 대한 미분항들은 계산할 수 있기 때문에 위 식들은 가우스 소거법이나 Crout 법 등으로 풀 수 있게 되며  $\Delta x_i$  값이 충분히 작아질 때까지 반복 계산하여 해를 구하게 된다.  $x_1, x_2, x_3, x_4$ 를 구하면 나머지 반응 분자들을 계산하며 각 분자의 몰수  $n_i$ 와 이들의 합  $n$ 을 계산한다.

### 2.2.3 발생열 계산

위에서 얻어진 반응생성물을 사용하여 반응열량  $Q_2$ 를 계산한다.

$$Q_2 = \text{반응 생성생물의 생성열의 합} - \text{폭약의 생성열 합} \quad (48)$$

### 2.2.4 온도증가 계산

반응 생성물의 열용량의 평균값 ( $\bar{C}_v$ ) 으로 반응후의

온도 ( $T_2$ )를 계산한다.

$$T_2 = \frac{Q_2 + T_1 \bar{C}_v \beta}{\beta \bar{C}_v - \frac{1}{2} nR} \quad (49)$$

여기서  $Q_2$ 는 반응열로서 식 (48)에서 계산되며  $n$ 은 반응후 생성가스의 몰수,  $T_1$ 은 반응전의 온도,  $R$ 은 가스 상수이며  $\beta$ 와  $\bar{C}_v$ 는 다음과 같다.

$$\beta = \frac{nR + C_v}{C_v} - \left( \frac{\partial \alpha}{\partial V} \right) \quad (50)$$

$$\bar{C}_v = \frac{\sum n_i C_{vi}}{\sum n_i} \quad (51)$$

여기서  $n_i$ 는 각 생성가스의 몰수 이고  $\alpha$ 는 co-volume 으로 이상적인 가스의 상태방정식  $Pv = nRT$ 를 보정하기 위해 도입된 변수이다. 여기서도  $C_v$ 가 온도의 함수로 변하는 값이기 때문에 계산되는 온도에 변화가 없을 때까지 반복계산을 수행하여 최종적인 해를 구하게 된다. Co-volume을 포함하는 상태방정식은 다음과 같다.

$$P(v - \alpha) = nRT \quad (52)$$

**2.2.5 압력과 속도 계산**

반복계산을 통해 얻은 온도를 사용하여 온도의 함수로 주어지는 값들을 최종적으로 구한 다음 압력 ( $P_2$ )와 폭발 속도(VOD)를 다음과 같이 계산한다.

$$P_2 = \frac{nRT_2}{(v_2 - \alpha)} \quad (53)$$

$$VOD^2 = \frac{v_1^2 p \beta}{(v_2 - \alpha)} \quad (54)$$

여기서  $v_1$ 과  $v_2$ 는 폭발반응 전후의 Specific volume 을 나타낸다 (Fig. 1 참고).

**3. 폭발성능 계산 프로그램 개요**

위에서 설명한 것과 같은 과정으로 폭약의 성능에 영향을 미치는 요소들을 계산하기 위해 포트란 프로그램을 작성하였으며 흐름도는 Fig. 5에 나타나있다.

a. Input Data : 초기 온도, 밀도와 폭약을 구성하는 H, N, O, C의 함량,  $x_1, x_2, x_3, x_4$ 의 초기값과 온도,

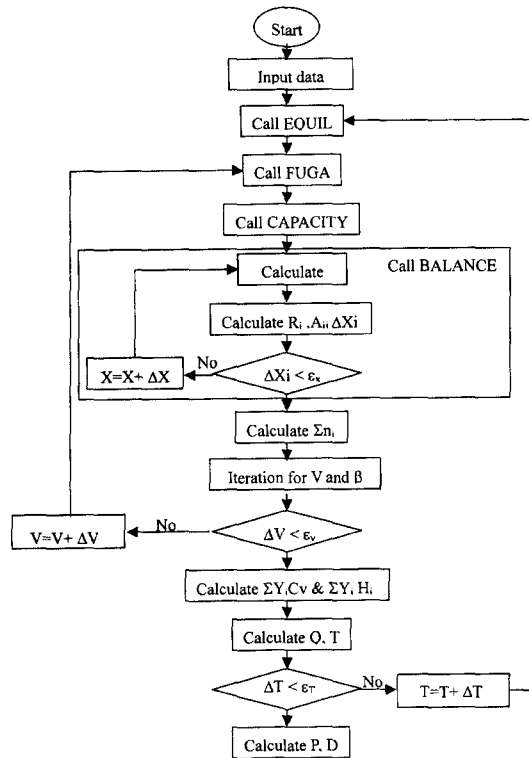


Fig. 5. Flow-chart of the FORTRAN program

부피,  $x_i$ 의 수렴을 판단하기 위한 각각의 오차범위( $\epsilon_p, \epsilon_v, \epsilon_x$ )등이 입력된다.

b. EQUIL 서브루틴 : Table 2 에 있는  $K_i$  값을 계산한다.  $K_i$ 가 온도의 함수이므로 반복계산 중에 온도의 변화가 있으면  $K_i$  값을 다시 계산하기 위해 EQUIL 서브루틴으로 되돌아 오게 된다.

c. FUGA 서브루틴 : Fugacity와 Co-volume  $\alpha$ 를 계산하는 서브루틴이다. 온도와 부피의 변화에 따라 fugacity 와  $\alpha$ 는 변화한다.

d. CAPACITY 서브루틴 : 열용량을 계산한다.

e. BALANCE 서브루틴 : 폭발 반응식을 완성하기 위해 Crout 법으로  $x_i$  가 수렴할 때까지 반복계산한다.  $x_i$  를 구한 다음 반응에 관계되는 나머지 분자들의 구성을 계산하여 평균 열용량을 구한다. 여기서  $R_i$ 는 식 (2.39)-(2.42)의  $R_1, R_2, R_3, R_4$ 를 나타내고  $A_{ij}$ 는 Crout 법을 이용하여 방정식을 풀 때 필요한 변수들을 나타낸다.

f. 부피와  $\beta$ 에 대한 반복계산 : 폭발 반응에서 계산되는 발생물질의 부피를 계산한다. 계산되는 부피의 변화가 없을 때까지 반복계산을 수행한다. 계산되는 부피에 변화가

있을 경우 FUGA 서브루틴에서 fugacity 와 열용량을 다시 계산하고 폭발 반응식을 다시 구한다.

g. 반응열과 온도증가의 계산 : 계산된 발생물질의 함량으로부터 반응열을 계산하고 발생가스의 부피와 평균 열용량을 사용하여 온도증가를 계산한다. 계산되는 온도에 변화가 크면 계산에서 얻어진 온도를 초기값으로 하여 새로운 반복계산을 실시한다.

h. 압력과 폭발속도의 계산 : 온도, 부피, 반응생성물의 계산이 수렴한 후 이들을 이용하여 폭발압력과 폭발속도를 계산한다.

본 프로그램을 사용하여 니트로글리세린과 배합비가 다른 두 종류의 ANFO의 폭발에너지를 계산하였다. Table 3은 94% AN과 6% 연료유로 구성되는 ANFO의 계산

예를 보여주고 있으며 Table 4는 TIGER 코드, BKW 코드, NITRODYNE 코드 등 상용 코드 (Persson et al., 1994)를 이용하여 니트로글리세린과 ANFO에 대해 계산한 결과와 본 프로그램의 결과를 비교하고 있다. Table 3과 4에서 볼 수 있듯이 기존의 코드들과 유사한 결과를 보여줌을 알 수 있다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 고성능 폭약의 폭발시 발생하는 온도, 압력, 가스의 부피, VOD를 계산하는 프로그램을 개발하였으며 이를 NG 와 ANFO에 적용하여 보았다. 본 프로그램은 구성성분이 C, H, N, O인 폭약의 폭발에너지를 계산하는 것이다. 대부분의 고성능 폭약의 기본조성이

Table 3. Comparison between the calculated results with different computer codes for NG (Persson et al., 1994)

Explosives	BKW	TIGER	NITRODYNE	FORTTRAN program
Density (g/cc)	1.59	1.59	1.59	1.59
Pressure (Kbar)	247	214	109	214
VOD (m/sec)	7699	7500		7649
Temperature (K)	3217	4476	4932	4526
Products (mole/kg)				
CO <sub>2</sub>	13.2	13.06	13.21	12.8
CO	0.02	0.15		0.25
CH <sub>4</sub>				
NO	0.22	0.79		0.74
N <sub>2</sub>	6.5	6.19	6.61	6.2
NH <sub>3</sub>		0.03		
O <sub>2</sub>	1.0	0.81	1.1	0.5
H <sub>2</sub> O	11.01	10.96	11.01	9.8
H <sub>2</sub>		0.01		0.013

Table 4. Comparison between calculated results with different computer codes for ANFO (94% AN) (Persson et al., 1994)

Explosives	BKW (AN94.55%+FO5.45%)	TIGER (AN94.5%+FO5.5%)	NITRODYNE (AN94.55%+FO5.45%)	FORTTRAN program (AN94%+FO6%)
Density (g/cc)	0.9	0.9	0.9	0.9
Pressure (Kbar)	74	64	23	49
VOD (m/sec)	5531	5156		4638
Temperature (K)	2286	2856	2844	2753
Products (mole/kg)				
CO <sub>2</sub>	3.82	3.81	3.82	3.72
CO		0.07	0.02	0.55
CH <sub>4</sub>				
NO		0.02		
N <sub>2</sub>	11.81	11.78	11.81	11.7
NH <sub>3</sub>		0.02		0.01
O <sub>2</sub>				
H <sub>2</sub> O	27.77	27.72	27.77	27.2
H <sub>2</sub>		0.06	0.01	0.53



C, H, N, O 이므로 다른 폭약에 대해서도 동일한 방식으로 폭발에너지를 계산할 수 있다. 본 프로그램을 이용하여 ANFO가 AN 94%와 FO 6%로 구성되는 경우에 대해서 그리고 니트로글리세린의 폭발시 폭발생성물과 폭발속도, 폭발 압력, 발생온도 등을 계산하였으며 이 결과는 Table 3과 4에 나타내었다. 기존의 상용 프로그램인 TIGER, BKW, NITRODYNE 등과 비교한 결과 본 프로그램을 통한 계산이 유사한 값을 나타냄을 알 수 있었다.

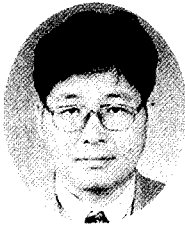
본 프로그램에서는 입자크기, 직경의 변화, 반응속도 등의 영향은 계산에서 고려하지 않는다. 또한 계산시 적용되는 여러가지 가정들 예를 들면 adiabatic 반응의 가정, 완전 밀폐, 이상적인 폭약의 혼합과 실제 상황에서의 물의 영향, 폭약밀도의 차이, 기타 작업자에 의한 오차 등에 의해 프로그램을 통해 계산되는 이론값들은 현장에서 얻어지는 측정치와는 차이를 보일 것이지만 폭약의 상대적인 비교나 폭약성분의 최적화를 위해 사용될 수

있을 것이다.

## 참 고 문 헌

1. Cook, M.A., 1958, The science of high explosives, ACS Monograph No. 139, Reinhold Pu. Co.
2. Franklin, J.A. and Dusseault, M.B., 1989, Rock engineering, McGraw-Hill Inc., New York.
3. Persson, P.A., Holmberg, R., and Lee, J., 1994, Rock blasting and explosives engineering, CRC press, Tokyo.
4. Rinehart, J.S. and Pearson, J., 1963, Explosive working of metals, A Pergamon Press Book, New York
5. Richard, A.D., 1969, Factors in selecting and applying commercial explosives and blasting agents, US Department of the Interior.
6. Stelloh, R.T., 1961, Explosive performance parameters: A digital computer solution and error analysis, MS thesis, Mining Engineering of University of Missouri-Rolla.

## 권 상 기



1987년 서울대학교 공과대학 자원공학과, 공학사

1989년 서울대학교 공과대학 자원공학과, 공학석사

1996년 미국 Missouri-Rolla 대학교 Mining Engineering, 공학박사

Tel : 042-868-2632

E-mail : swonsk@nanum.kaeri.re.kr

현 재 한국원자력연구소 고준위 폐기물 처분기술개발팀,  
Post-Dr.