



## Kod termochemiczny do obliczania parametrów spalania, wybuchu i detonacji nieidealnych układów wysokoenergetycznych\*

Sebastian GRYS, Waldemar A. TRZCIŃSKI

*Wojskowa Akademia Techniczna, Wydział Nowych Technologii i Chemii  
ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa*

**Streszczenie.** W pracy przedstawiono kod termochemiczny ZMWNI do wyznaczania równowagowego stanu reagującego, nieidealnego układu heterogenicznego. Wykonano obliczenia równowagowe i nierównowagowe parametrów wybuchu, spalania i detonacji. Dla wybranych materiałów wyznaczono izentropy rozprężania produktów i energię detonacji. W obliczeniach nierównowagowych zakładano obojętność chemiczną jednego ze składników mieszaniny wybuchowej, a także brak wymiany ciepła między składnikiem i produktami detonacji. Na zakończenie porównano obliczone wybrane charakterystyki detonacyjne z danymi doświadczalnymi.

**Słowa kluczowe:** materiały wysokoenergetyczne, spalanie, wybuch, detonacja, kody termochemiczne

### 1. WSTĘP

Skuteczne, teoretyczne obliczenie parametrów detonacji oraz równowagowego składu produktów reakcji w oparciu o fizyczno-chemiczne właściwości materiału wysokoenergetycznego, takich jak jego skład atomowy, entalpia tworzenia i gęstość, stało się możliwe dzięki podejściu termodynamicznemu uwzględniającemu:

\* Artykuł był prezentowany na VIII Międzynarodowej Konferencji Uzbrojeniowej nt. „Naukowe aspekty techniki uzbrojenia i bezpieczeństwa”, Pułtusk, 6-8 października 2010 r.

- matematyczny model idealnej detonacji,
- zasadę ekstremum funkcji charakterystycznych sformułowaną przez Gibbsa,
- termodynamiczne równania stanu gazów rzeczywistych (produktów detonacji) w szerokim zakresie ciśnienia i temperatury.

Współcześnie opracowano i szeroko wykorzystuje się wiele metod numerycznych i programów (tzw. kodów termochemicznych) do wykonywania termodynamicznych obliczeń parametrów detonacji skondensowanych materiałów wybuchowych, na przykład FORTRAN BKW [1], ARPEGE [2], RUBY [3], TIGER [4], CHEETAH [5], EXPLO5 [6], MWEQ [7], BARUT-X [8]. Chociaż w wielu ośrodkach badawczych na świecie opracowano kody termochemiczne, to dostęp do nich jest utrudniony, ponadto jakkolwiek ingerencja w kod nie jest możliwa ze względu na fakt, że są one udostępniane w postaci skompilowanej. Dlatego w Zakładzie Materiałów Wybuchowych WAT podjęto decyzję o opracowaniu własnego kodu numerycznego o nazwie ZMWNI.

W pracy [9] dokonano przeglądu termodynamicznych metod określania równowagi układów chemicznych, które zastosowane w kodach termochemicznych pozwalają wyznaczyć parametry przemian przebiegających w materiałach wysokoenergetycznych. Na tej podstawie w pracy [10] zaproponowano metodę wyznaczania stanów równowagowych i nierównowagowych wieloskładnikowych układów heterogenicznych i zastosowano ją do obliczania parametrów spalania i detonacji idealnych mieszanin wybuchowych.

W pracy [11] przedstawiono metodę obliczania stanu równowagowego reagujących, nieidealnych składników oraz sposoby wykorzystania tej metody do obliczania parametrów spalania, wybuchu i detonacji materiałów wybuchowych. Zaproponowano także procedury wyznaczania izentropii JWŁ oraz energii detonacji na podstawie wyników obliczeń termochemicznych. Oprócz metody obliczeń równowagowych omówiono sposób wykonania obliczeń nierównowagowych, w których zakłada się obojętność chemiczną jednego lub kilku ze składników mieszaniny oraz brak wymiany ciepła między składnikiem i produktami reakcji.

W pracy przedstawiono nowy kod termochemiczny o nazwie ZMWNI, który umożliwia obliczenie parametrów spalania, wybuchu i detonacji skondensowanych materiałów wysokoenergetycznych, a także wyznaczanie krzywej rozprężania produktów detonacji w postaci izentropii JWŁ (Jones–Wilkins–Lee) [12] oraz energii detonacji [13]. Oprócz wyznaczania stanów równowagowych reagujących nieidealnych układów heterogenicznych pozwala również na określenie stanów nierównowagowych („zamrożone” składy lub różne temperatury składników).

Do określenia składu równowagowego i nierównowagowego mieszaniny produktów przemiany w kodzie ZMWNI wykorzystano metodę minimalizacji potencjału chemicznego, w której skład produktów uzyskuje się poprzez rozwiązywanie układu równań liniowych oraz zastosowanie metody najszybszego spadku [11, 14].

Do opisu właściwości fizycznych gazów zastosowano równanie stanu BKW (Becker, Kistiakowski, Wilson). Fazy skondensowane opisano równaniem stanu OLD stosowanym w kodach termochemicznych TIGER i CHEETACH.

Wyznaczając stan równowagowy dla przemian spalania, wybuchu w stałej objętości czy detonacji, uwzględniono warunki fizyczne odpowiednie dla danej przemiany. Warunki te zostały opisane w dalszej części pracy.

W pracy wykonano równowagowe i nierównowagowe obliczenia dla materiałów wysokoenergetycznych, porównano uzyskane wyniki z danymi otrzymanymi z kodu CHEETAH i danymi eksperymentalnymi oraz pokazano nowe możliwości programu (obliczanie adiabatycznej temperatury spalania, izentropii JWŁ czy energii detonacji).

## **2. OPIS PROGRAMU**

Program ZMWNI pozwala na obliczenie składu mieszaniny substancji biorących udział w przemianach chemicznych i termodynamicznych. Program umożliwia wykonanie obliczeń dla następujących przypadków:

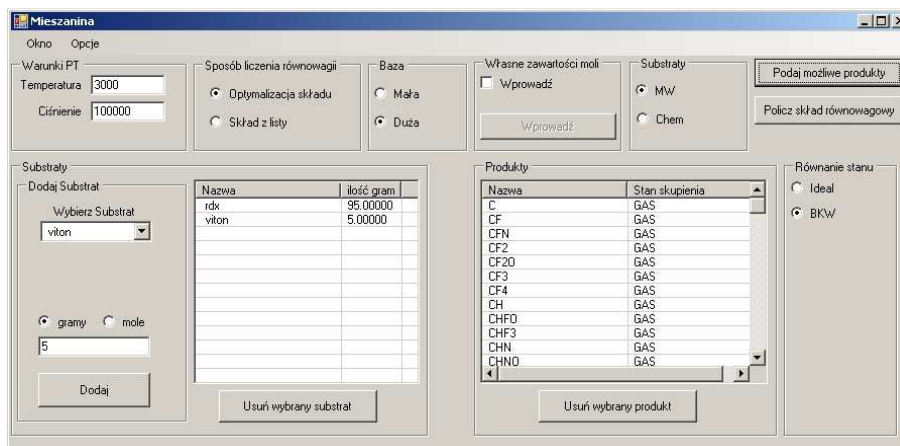
- stan układu dla określonych wartości ciśnienia i temperatury ( $p$ ,  $T$ ) lub objętości i temperatury ( $v$ ,  $T$ ), przemiana wzdłuż izolinii (izobara, izochora, izoterma, izentropa) dla określonego drugiego parametru termodynamicznego
- wybuch w stałej objętości
- spalanie pod stałym ciśnieniem
- detonacja.

Program został napisany w języku Visual Basic 2005 z wykorzystaniem platformy Microsoft Visual Studio. Każdy wariant obliczeń ma swoje własne okno, w którym użytkownik wprowadza dane niezbędne do dokonania obliczeń. Na rys. 1 przedstawiono jedno z okien służące do obliczeń stanu równowagowego mieszaniny substancji dla punktu ciśnienie-temperatura ( $p$ ,  $T$ ). Okno zawiera następujące sekcje:

- Warunki – sekcja, w której wprowadza się parametry, dla których mają być wykonane obliczenia.
- Substraty – wprowadzenie danych substancji biorących udział w przemianie termochemicznej.
- Produkty – lista potencjalnych produktów wyselekcjonowanych z bazy danych. Użytkownik sam dokonuje wyboru produktów.

Sposób liczenia równowagi – opcja ta określa, czy dla listy w sekcji „Produkty” ma zostać użyte narzędzie optymalizacji składu czy nie. W przypadku wyboru opcji „Optymalizacja składu” zastosowane zostaną odpowiednie procedury w programie i wyznaczony zostanie skład mieszaniny odpowiadający minimum energii Gibbsa przy założeniu obecności niektórych substancji z listy.

Narzędzie optymalizacji pozwala na określenie, które substancje spośród przewidywanych rzeczywiście znajdą się w mieszaninie równowagowej. Opcja „Skład z listy” powoduje bezpośrednie obliczenie równowagi dla podanych substancji bez optymalizacji składu.



Rys. 1. Przykład okna z danymi wejściowymi

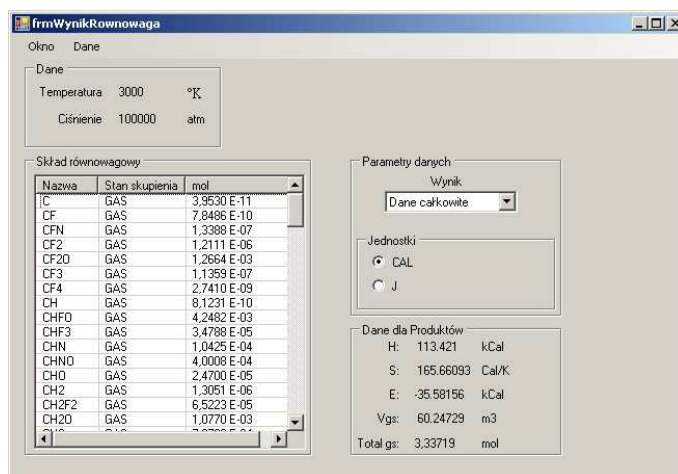
Fig. 1. Exemplary window with input data

Baza – baza danych dla substratów podzielona została na dwa zestawy: bazę małą i dużą. Baza mała uwzględnia najczęściej występujące trwałe produkty przemian materiałów wysokoenergetycznych i odpowiada zestawowi BKWC [5]. Baza duża odpowiada zestawowi BKWS [15] i obejmuje znaczenie więcej substancji w postaci gazowej, stałej i ciekłej oraz dodatkowo zestaw substancji nietrwałych, takich jak rodniki, przejściowe produkty przemian.

Własne zawartości moli – w metodach obliczeń termochemicznych istotna jest możliwość określenia takiego punktu początkowego, aby obliczenia były szybko zbieżne. Program zawiera kilka procedur wewnętrznych, dzięki którym możliwy jest dobór punktu startowego. Jeśli jednak użytkownik pragnie sam zdefiniować punkt startowy, może skorzystać z tej opcji i wprowadzić początkowe ilości moli produktów.

Równanie stanu – pozwala na określenie, czy obliczenia mają być dokonywane w oparciu o równanie stanu gazu idealnego (opcja *Ideal*) lub równania stanu produktów gazowych BKW oraz produktów skondensowanych OLD (opcja *BKW*).

Przykładowe okno z wynikami obliczeń wykonanych dla flegmatyzowanego heksogenu przedstawiono na rys. 2. Okno zawiera sekcję „Dane” przedstawiającą punkt, dla którego miały zostać wykonane obliczenia.



Rys. 2. Przykładowe okno z danymi wyjściowymi

Fig. 2. Exemplary window with output data

W sekcji „Skład równowagowy” przedstawiono listę produktów wraz z równowagowymi wartościami ilości moli.

W sekcji „Dane dla produktów” podawane są wartości entalpii ( $H$ ) tworzenia produktów w podanych warunkach, entropii ( $S$ ) tworzenia produktów w podanych warunkach, energii wewnętrznej ( $E$ ) tworzenia produktów w podanych warunkach, objętości składników gazowych ( $V_{gs}$ ) i ilości produktów gazowych ( $Total\ gs$ ) odniesione do jednostki mieszaniny wejściowej, przy czym jednostkę tę (gram lub mol) określa użytkownik. W sekcji „Parametry danych” znajdują się elementy kontrolujące sposób wyświetlania danych. W polu rozwijanym znajdują się trzy opcje „Dane całkowite”, „Na kilogram MW” oraz „Na mol MW”. W zależności od wybranej opcji przedstawione zostaną dane obliczone dla całkowitej ilości substancji będących substratami, odniesione do kilograma lub mola mieszaniny wybuchowej. Przyciski opcji „CAL” oraz „J” pozwalają na prezentację wyników w kaloriach lub dżulach.

### 3. PRZYKŁADY OBLICZEŃ RÓWNOWAGOWYCH PARAMETRÓW WYBUCHU, PALENIA I DETONACJI DLA MATERIAŁÓW WYBUCHOWYCH

#### 3.1. Wybuch w stałej objętości

Warunkiem, jaki musi spełniać układ dla modelu wybuchu w stałej objętości (warunki adiabatyczne) jest brak zmiany energii wewnętrznej. Dla zadanej objętości nieznanym parametrem jest temperatura.

Obliczenia ograniczają się do poszukiwania takiej temperatury i takiego składu produktów, przy których spełniona jest zasada zachowania energii wewnętrznej układu, a potencjał termodynamiczny osiąga minimum.

W tabelach 1 i 2 przedstawiono wyniki obliczeń wybuchu w stałej objętości dla heksogenu i porównano je z wynikami uzyskanymi z kodu CHEETAH. W obu przypadkach zastosowano bazę danych BKWC. Obliczenia wykonano dla gęstości ładowania  $0,625 \text{ g/cm}^3$ .

Z przedstawionych danych wynika, że różnice pomiędzy wartościami obliczonymi w obu programach są nie większe niż 0,2%.

Tabela 1. Porównanie wartości parametrów i funkcji termodynamicznych uzyskanych z kodów ZMWNI (wiersz górny) oraz CHEETAH (wiersz dolny) dla wybuchu ładunku heksogenu w stałej objętości (obliczenia równowagowe)

Table 1. Comparison of values of thermodynamic parameters and functions obtained from ZMWNI code (top row) and CHEETAH code (bottom row) for explosion of RDX charge in a constant volume (equilibrium calculations)

| Ciśnienie | Objętość właściwa          | Temperatura | Entalpia | Energia | Entropia  | Objętość właściwa produktów gazowych |
|-----------|----------------------------|-------------|----------|---------|-----------|--------------------------------------|
| [atm]     | [ $\text{cm}^3/\text{g}$ ] | [K]         | [cal/g]  | [cal/g] | [cal/K/g] | [ $\text{cm}^3/\text{g}$ ]           |
| 15801     | 1,6                        | 2823,2      | 611,99   | 0       | 1,860     | 1,6                                  |
| 15806     | 1,6                        | 2823,7      | 612,45   | 0       | 1,863     | 1,6                                  |

Tabela 2. Porównanie składów gazowych produktów wybuchu heksogenu uzyskanych z kodów ZMWNI oraz CHEETAH dla wybuchu w stałej objętości (obliczenia równowagowe)

Table 2. Comparison of compositions of the gaseous explosion products of RDX obtained from ZMWNI and CHEETAH codes for the constant volume explosion (equilibrium calculations)

| Substancja                    | Ilości moli |           | Substancja                     | Ilości moli |           |
|-------------------------------|-------------|-----------|--------------------------------|-------------|-----------|
|                               | CHEETAH     | ZMWNI     |                                | CHEETAH     | ZMWNI     |
| CO                            | 4,239E+00   | 4,239E+00 | CH <sub>2</sub> O              | 8,217E-03   | 8,209E-03 |
| N <sub>2</sub>                | 1,465E+00   | 1,465E+00 | CH <sub>3</sub>                | 6,111E-03   | 6,102E-03 |
| H <sub>2</sub>                | 1,243E+00   | 1,243E+00 | C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>  | 5,538E-03   | 5,529E-03 |
| H <sub>2</sub> O              | 6,002E-01   | 6,002E-01 | C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 4,850E-03   | 4,846E-03 |
| CO <sub>2</sub>               | 5,690E-01   | 5,690E-01 | CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub> | 4,655E-03   | 4,650E-03 |
| CH <sub>4</sub>               | 2,541E-01   | 2,541E-01 | CHNO                           | 2,751E-03   | 2,748E-03 |
| NH <sub>3</sub>               | 4,167E-02   | 4,165E-02 | H                              | 1,833E-03   | 1,830E-03 |
| CHN                           | 2,586E-02   | 2,584E-02 | CHO                            | 1,213E-03   | 1,211E-03 |
| C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> | 1,271E-02   | 1,270E-02 | CH <sub>3</sub> OH             | 1,159E-03   | 1,157E-03 |

### 3.2. Spalanie adiabatyczne

W przypadku adiabatycznego spalania przy stałym ciśnieniu entalpia układu przed przemianą i po niej powinna pozostać stała. Dla zadanego ciśnienia, podobnie jak dla wybuchu w stałej objętości, obliczenia polegają na poszukiwaniu minimum potencjału termodynamicznego. W ten sposób wyznaczona może być tzw. temperatura adiabatycznego spalania, wykorzystywana często do scharakteryzowania materiału energetycznego.

W tabelach 3 i 4 przedstawiono wyniki obliczeń równowagowych dla mieszanin politetrafluoroetyleny (PTFE) z proszkiem magnezu. Obliczenia wykonano dla ciśnienia 1 atm. Wykorzystano bazę danych BKWS zawierającą związki fluoru i magnezu.

Podobnie jak w poprzednich przypadkach, różnica pomiędzy wartościami obliczonymi za pomocą kodów CHEETAH i ZMWNI jest niewielka i nie przekracza 0,2%.

Bardzo często w modelowaniu numerycznym procesów spalania mieszanin składników stałych wykorzystywana jest tzw. temperatura adiabatycznego spalania. Na rys. 3 przedstawiono przykładową zależność temperatury adiabatycznego spalania mieszanin PTFE z Mg lub Al w zakresie zawartości składnika metalicznego 0-60%. Obliczenia wykonano za pomocą kodu ZMWNI.

Tabela 3. Porównanie wartości parametrów i funkcji termodynamicznych uzyskanych z kodów ZMWNI (wiersz górny) oraz CHEETAH (wiersz dolny) dla spalania adiabatycznego mieszaniny 70% PTFE i 30% Mg

Table 3. Comparison of values of thermodynamic parameters and functions obtained from ZMWNI code (top row) and CHEETAH code (bottom row) for the adiabatic combustion of the mixture of PTFE/Mg 70/30

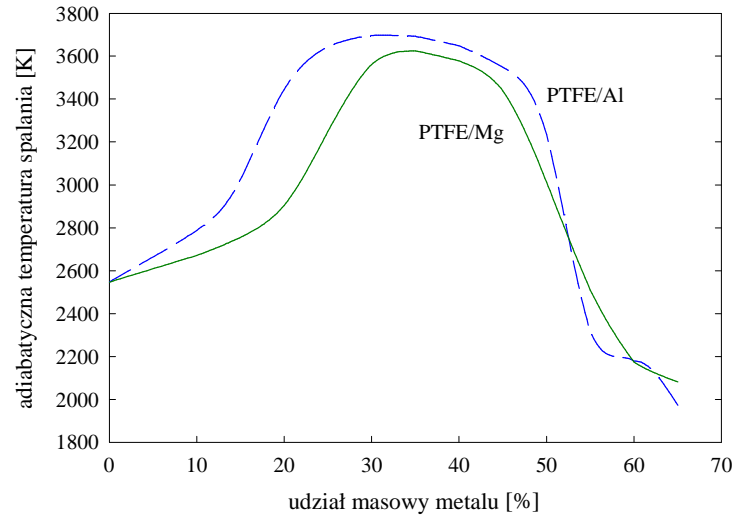
| Ciśnienie | Objętość właściwa    | Temperatura | Entalpia | Energia | Entropia  | Objętość właściwa produktów gazowych |
|-----------|----------------------|-------------|----------|---------|-----------|--------------------------------------|
| [atm]     | [cm <sup>3</sup> /g] | [K]         | [cal/g]  | [cal/g] | [cal/K/g] | [cm <sup>3</sup> /g]                 |
| 1         | 4919,29              | 3696,69     | 0        | -119,11 | 1,595     | 4919,12                              |
| 1         | 4919,30              | 3696,70     | 0        | -119,12 | 1,595     | 4919,26                              |

Tabela 4. Porównanie składów stałego (C) i gazowych produktów reakcji uzyskanych z kodów ZMWNI oraz CHEETAH dla spalania adiabatycznego 70 % PTFE i 30% Mg

Table 4. Comparison of compositions of solid (C) and gaseous explosion products of the mixture of PTFE/Mg 70/30 obtained from ZMWNI and CHEETAH codes for the adiabatic combustion

| Substancja                     | Ilości moli |           | Substancja                    | Ilości moli |           |
|--------------------------------|-------------|-----------|-------------------------------|-------------|-----------|
|                                | CHEETAH     | ZMWI      |                               | CHEETAH     | ZMWI      |
| F <sub>2</sub> Mg              | 5,643E-01   | 5,643E-01 | Mg                            | 6,156E-03   | 6,156E-03 |
| F                              | 1,667E-01   | 1,667E-01 | C <sub>2</sub> F <sub>2</sub> | 3,756E-05   | 3,755E-05 |
| CF <sub>2</sub>                | 1,746E-02   | 1,746E-02 | C <sub>2</sub>                | 3,794E-03   | 3,794E-03 |
| CF                             | 4,986E-02   | 4,986E-02 | F <sub>2</sub>                | 1,525E-06   | 1,524E-06 |
| FMg                            | 6,752E-02   | 6,752E-02 | C <sub>5</sub>                | 3,511E-04   | 3,511E-04 |
| CF <sub>3</sub>                | 4,801E-05   | 4,799E-05 | C <sub>2</sub> F <sub>4</sub> | 1,526E-08   | 1,524E-08 |
| CF <sub>4</sub>                | 1,799E-06   | 1,798E-06 | C <sub>4</sub>                | 1,613E-04   | 1,613E-04 |
| C <sub>3</sub>                 | 2,752E-02   | 2,753E-02 | C <sub>2</sub> F <sub>6</sub> | 9,943E-13   | 9,929E-13 |
| F <sub>4</sub> Mg <sub>2</sub> | 3,297E-05   | 3,296E-05 | C                             | 4,733E-01   | 4,726E-01 |





Rys. 3. Zależność temperatury spalania adiabatycznego od udziału wagowego metalu w mieszaninie PTFE/metal

Fig. 3. Dependence of the temperature of adiabatic combustion on weight contents of metal ingredient for PTFE/metal mixtures

### 3.3. Parametry detonacji i izentropy rozprężania

Do określenia parametrów detonacji wykorzystuje się związki dla idealnej detonacji. Z prawa zachowania masy i pędu uzyskuje się zależność łączącą prędkość detonacji z ciśnieniem i objętością właściwą na froncie fali detonacyjnej (prosta Rayleigha)

$$\frac{D^2}{v_1^2} = -\frac{p_2 - p_1}{v_2 - v_1} \quad (1)$$

gdzie  $p_1, v_1$  to ciśnienie i objętość właściwa mieszaniny wyjściowej,  $p_2, v_2$  to ciśnienie i objętość właściwa reagującej mieszaniny na froncie fali zaś  $D$  jest prędkością propagacji fali.

Powyższy związek uzupełnia równanie adiabaty detonacyjnej łączącej  $p_2$  i  $v_2$  (zasada zachowania energii). Zgodnie z hipotezą Chapmana–Jougueta stacjonarnej detonacji odpowiadają parametry stanu w punkcie styczności prostej Rayleigha do adiabaty detonacyjnej. W punkcie tym prędkość detonacji  $D$  jako funkcja  $p_2$  osiąga wartość minimalną. Warunek ten jest wykorzystywany do wyznaczenia ciśnienia detonacji i zestawu produktów reakcji odpowiadającego minimum potencjału termodynamicznego.

Po określeniu parametrów  $p_2$  i  $v_2$  pozostałe parametry detonacji określane są na podstawie znanych relacji obowiązujących w punkcie Chapmana–Jougueta (C-J).

W tabelach 5-7 przedstawiono wyniki obliczeń równowagowych dla heksogenu o gęstości  $1,63 \text{ g/cm}^3$ .

Tak jak w poprzednich przypadkach, różnice pomiędzy wartościami obliczonymi dla obu programów pozostają małe (poniżej 1,5%).

Po określeniu parametrów detonacji materiału skondensowanego możliwe jest obliczenie izentropy rozprężania produktów gazowych. W kolejnych punktach na izentropie spełniony musi być warunek stałej entropii, czyli  $S = \text{const}$ .

Wykonano obliczenia izentropy rozprężania produktów detonacji heksogenu od ciśnienia w punkcie CJ do ciśnienia atmosferycznego. Założono, że skład produktów ulega zamrożeniu, jeśli ich temperatura obniży się do 1800 K. Taka wartość temperatury zamrożenia składu wynika z rozważań teoretycznych i badań eksperymentalnych prezentowanych w pracy [16].

Tabela 5. Porównanie wartości parametrów detonacji heksogenu uzyskanych z kodów ZMWNI oraz CHEETAH

Table 5. Comparison of values of detonation parameters for RDX obtained from ZMWNI and CHEETAH codes

| Prędkość detonacji | Prędkość masowa | Wykładnik izentropy | Program |
|--------------------|-----------------|---------------------|---------|
| [m/s]              | [m/s]           |                     |         |
| 8267               | 2004            | 3,125               | ZMWNI   |
| 8266               | 2005            | 3,123               | CHEETAH |

Tabela 6. Porównanie wartości parametrów i funkcji stanu w warunkach detonacji heksogenu uzyskanych z kodów ZMWNI (wiersz górny) oraz CHEETAH (wiersz dolny)

Table 6. Comparison of values of thermodynamic parameters and functions obtained from ZMWNI code (top row) and CHEETAH code (bottom row) for detonation of RDX

| Ciśnienie | Objętość właściwa    | Temperatura | Entalpia | Energia | Entropia  | Objętość właściwa produktów gazowych |
|-----------|----------------------|-------------|----------|---------|-----------|--------------------------------------|
| [atm]     | [cm <sup>3</sup> /g] | [K]         | [cal/g]  | [cal/g] | [cal/K/g] | [cm <sup>3</sup> /g]                 |
| 266513,7  | 0,465                | 4259,9      | 3546,33  | 546,65  | 1,73      | 0,465                                |
| 266578,7  | 0,465                | 4259,2      | 3546,64  | 546,52  | 1,73      | 0,465                                |

Tabela 7. Porównanie ilości moli stałego (C) i gazowych produktów detonacji heksogenu uzyskanych z kodów ZMWNI oraz CHEETAH

Table 7. Comparison of compositions of solid (C) and gaseous detonation products of RDX obtained from ZMWNI and CHEETAH codes

| Substancja                     | Ilości moli |          | Substancja                    | Ilości moli |          |
|--------------------------------|-------------|----------|-------------------------------|-------------|----------|
|                                | CHEETAH     | ZMWNI    |                               | CHEETAH     | ZMWNI    |
| N <sub>2</sub>                 | 2,84E+00    | 2,84E+00 | CNN                           | 6,12E-11    | 6,15E-11 |
| CO <sub>2</sub>                | 1,98E+00    | 1,98E+00 | N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1,68E-11    | 1,68E-11 |
| H <sub>2</sub> O               | 1,09E+00    | 1,09E+00 | C <sub>3</sub> O <sub>2</sub> | 7,16E-12    | 7,21E-12 |
| CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub> | 4,22E-01    | 4,22E-01 | C <sub>3</sub>                | 1,06E-12    | 1,07E-12 |
| NH <sub>3</sub>                | 2,97E-01    | 2,97E-01 | N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> | 7,50E-15    | 7,49E-15 |
| CH <sub>4</sub>                | 1,97E-01    | 1,97E-01 | C <sub>4</sub>                | 6,78E-21    | 6,87E-21 |
| C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>  | 1,45E-01    | 1,45E-01 | C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> | 1,95E-27    | 1,98E-27 |
| H <sub>2</sub>                 | 8,93E-02    | 8,95E-02 | C <sub>5</sub>                | 4,75E-30    | 4,84E-30 |
| CO                             | 4,47E-02    | 4,48E-02 | C                             | 4,86E-03    | 4,89E-03 |

Wyniki obliczania izentropii rozprężania przedstawiono tabeli 8. Różnice pomiędzy wartościami obliczonymi w ZMWNI i CHEETAH nie przekraczają 0,1%.

Tabela 8. Porównanie wartości ciśnienia obliczonych w wybranych punktach izentropii rozprężania produktów detonacji heksogenu za pomocą kodów ZMWNI oraz CHEETAH

Table 8. Comparison of pressure values in chosen points of the isentrope of RDX detonation products calculated by the use of ZMWNI and CHEETAH codes

| $v/v_0$ | $p$ [atm] |           |
|---------|-----------|-----------|
|         | CHEETAH   | ZMWNI     |
| 0,76    | 266578,70 | 266513,70 |
| 1,00    | 115748,20 | 115775,30 |
| 2,20    | 13637,60  | 13642,10  |
| 2,41    | 10951,60  | 10943,00  |
| 4,10    | 3379,60   | 3380,70   |
| 6,50    | 1408,30   | 1408,80   |
| 10,00   | 675,50    | 675,70    |
| 20,00   | 231,10    | 231,10    |
| 40,00   | 85,30     | 85,30     |
| 80,00   | 32,60     | 32,60     |
| 160,00  | 12,60     | 12,60     |

Do rozwiązywania problemów związanych z oddziaływaniem wybuchu na otaczający ośrodek (rozlot produktów detonacji w powietrzu, wybuch w wodzie lub gruncie, odbicie fal detonacyjnych od przegród, miotanie mas, rozrywanie skorup pocisków, formowanie strumienia kumulacyjnego) konieczna jest znajomość równania stanu produktów detonacji skondensowanego materiału wybuchowego. Powszechnie używanym równaniem stanu tego typu jest równanie zaproponowane przez Jonesa, Wilkinsa i Lee (JWL) [12].

Równanie to konstruuje się poprzez rozwinięcie energii wewnętrznej w szereg Taylora wokół izentropy na płaszczyźnie  $(v, p)$  o następującej postaci

$$p_s = Ae^{-R_1V} + Be^{-R_2V} + CV^{(-1-\omega)} \quad (2)$$

gdzie  $V = v/v_0$ .

Stałe  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  i  $\omega$  wyznacza się najczęściej w sposób empiryczny. Jedną z podstawowych metod ich wyznaczania jest test cylindryczny, opisany szczegółowo w pracy [17]. Istnieje również możliwość określenia tych stałych na podstawie izentropy rozprężania otrzymanej z obliczeń termochemicznych. Ten sposób zastosowany został w kodzie CHEETAH oraz w kodzie ZMWNI.

W algorytmie wyznaczania stałych równania JWL, za pomocą kodu ZMWNI, założono, że w punkcie Chapmana–Jougueta (CJ) krzywa JWL oraz krzywa stałej entropii otrzymana z obliczeń termochemicznych przyjmują te same wartości i ich pochodne są sobie równe.

Ten warunek oznacza, że wykładnik izentropy, zdefiniowany w sposób następujący

$$\gamma \equiv -\left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln v}\right)_s = -\frac{v}{p}\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_s \quad (3)$$

przyjmuje takie same wartości w punkcie CJ dla obu krzywych. Sposób wyznaczenia stałych w programie ZMWNI dla równania JWL opisano dokładnie w pracy [11]

Na podstawie obliczonych wartości ciśnienia i objętości właściwej wzdłuż izentropy wyznaczono współczynniki równania JWL dla produktów detonacji heksogenu. Wartości współczynników określone w programie ZMWNI i w kodzie CHEETAH podano w tabeli 9. Na rys. 4 i 5 porównano przebiegi izentrop rozprężania produktów detonacji otrzymanych z kodów termochemicznych ZMWNI i CHEETAH oraz izentrop JWL uzyskanych na ich podstawie.

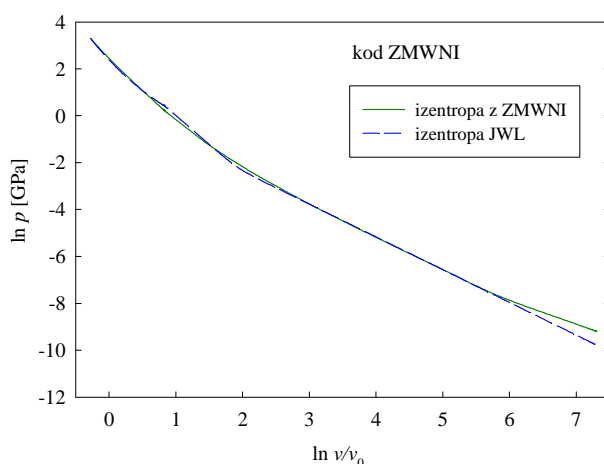
Metody wyznaczania współczynników JWL zastosowane w obu kodach były różne. W kodzie CHEETAH nie stawia się warunków równości funkcji aproksymowanej i aproksymującej oraz ich pochodnych w punkcie CJ. Jednakże w wynikach zarówno z kodu ZMWNI, jak i z kodu CHEETAH obserwuje się podobne, duże różnice w przebiegu obliczonych izentrop i ich aproksymacji za pomocą równania JWL.

Dotyczy to zwłaszcza średnich ciśnień rzędu 1000 atm, gdzie różnice dochodzą do 15% oraz małych ciśnień rzędu kilku atmosfer, gdy różnica w ciśnieniu osiąga nawet 45%. Może to świadczyć o nieadekwatności postaci izentropy JWŁ do przebiegu krzywej rozprężania produktów uzyskanej z obliczeń termochemicznych i odpowiadającej wartości entropii w punkcie CJ.

Tabela 9. Zestawienie współczynników równania JWŁ obliczonych za pomocą kodów ZMWNI (wiersz górny) oraz CHEETAH (wiersz dolny) dla produktów detonacji heksogenu

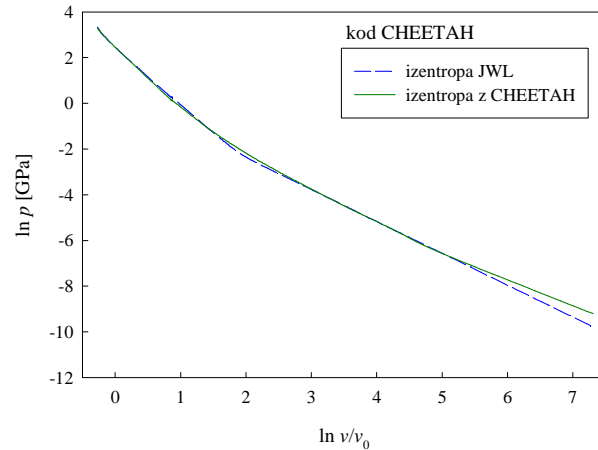
Table 9. JWŁ coefficients for the RDX detonation products calculated using ZMWNI (top row) and CHETAH (bottom row) codes

| A [GPa]  | B [GPa]  | C [GPa]  | $R_1$    | $R_2$    | $\omega$ |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 989,0848 | 11,11902 | 1,514244 | 5,166874 | 1,045774 | 0,396143 |
| 828,1    | 10,527   | 1,499    | 4,844    | 1,066    | 0,395    |



Rys. 4. Logarytmiczna zależność ciśnienia od objętości względnej wzdłuż izentropy produktów detonacji heksogenu: linia przerywana oznacza zależność obliczoną z równania JWŁ, linia ciągła odpowiada zależności z kodu ZMWNI, na podstawie której wyznaczono współczynniki JWŁ

Fig. 4. Logarithmic dependence of a pressure on a relative volume on the isentrope of RDX detonation products obtained from ZMWNI code (solid line) and the JWŁ isentrope (dotted line) determined on the basis of the first one



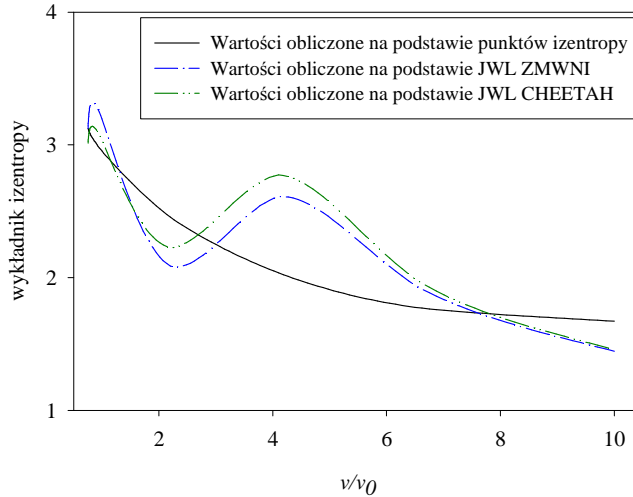
Rys. 5. Logarytmiczna zależność ciśnienia od objętości względnej wzdłuż izentropy produktów detonacji heksogenu: linia przerywana oznacza zależność obliczoną z równania JWL, linia ciągła odpowiada zależności z kodu CHEETAH, na podstawie której wyznaczono współczynniki JWL

Fig. 5. Logarithmic dependence of a pressure on a relative volume on the isentrope of RDX detonation products obtained from CHEETAH code (solid line) and the JWL isentrope (dotted line) determined on the basis of the first one

Jak wcześniej stwierdzono, równanie stanu JWL jest powszechnie stosowane w symulacji komputerowej zjawisk wybuchowych. Wynika to z jego stosunkowo prostej postaci i łatwości aplikacji w procedurach numerycznych. Jednakże zauważone wyżej różnice w przebiegu krzywej uzyskanej z obliczeń termochemicznych i aproksymującej każą dokładniej przyjrzeć się przebiegowi izentropy JWL. W tym celu zbadano zmianę wykładnika izentropy (3) w funkcji objętości produktów detonacji. W przypadku izentropy JWL jego wartość obliczano z zależności uzyskanej z (3) po zróżniczkowaniu funkcji (2). Zależność uzyskaną z kodu ZMWNI interpolowano funkcjami sklejanymi (wielomiany trzeciego stopnia) i na ich podstawie obliczano wykładnik izentropy ze wzoru (3). Wyniki obliczeń przedstawiono na rys. 6.

Na rysunku pominięto krzywą obliczoną na podstawie izentropy uzyskanej z programu CHEETAH, gdyż w skali rysunku pokrywa się z krzywą wyznaczoną w programie ZMWNI. Przebieg krzywych uzyskanych z równania JWL różni się zdecydowanie od zależności wykładnika izentropy wyznaczonego bezpośrednio z punktów obliczonych za pomocą kodów termochemicznych. Różnica ta wynika z faktu, że izentropa JWL opisywana jest funkcją składającą się z 3 członów.

Należy zwrócić uwagę, że duża zmienność wykładnika izentropy wraz ze wzrostem objętości produktów detonacji może mieć istotny wpływ na wyniki modelowania procesów gazodynamicznych, gdyż od wartości wykładnika zależy prędkość propagacji dźwięku w produktach.



Rys. 6. Zależności wykładnika izentropy od względnej objętości produktów detonacji heksogenu uzyskane różnymi metodami

Fig. 6. Dependence of a isentrop exponent on a relative volume of the RDX detonation products obtained by different methods

Wyznaczenie przebiegu izentropy rozprężania produktów detonacji umożliwia obliczenie tzw. energii detonacji. Energię detonacji definiuje się jako maksymalną pracę ekspansji produktów detonacji, wykonaną w czasie ich rozprężania od punktu CJ do objętości nieskończonej, pomniejszoną o energię kompresji materiału wybuchowego [13]. Energia detonacji składa się z dwu składników. Składnik termiczny definiujemy jako ciepło odbierane przez schładzanie pod stałym ciśnieniem produktów detonacji do temperatury początkowej. Składnik mechaniczny – jako pracę rozprężania produktów detonacji od ciśnienia detonacji do ciśnienia początkowego. Sposób wyznaczania energii detonacji oraz jej składników w kodzie ZMWNI opisano w pracy [11].

Po wyznaczeniu współczynników równania JWL można stosunkowo łatwo obliczyć mechaniczny i termiczny składnik energii detonacji oraz całkowitą energię detonacji. Porównanie otrzymanych wyników dla trotylu (TNT) o gęstości  $1,59 \text{ g/cm}^3$  i RDX o gęstości  $1,63 \text{ g/cm}^3$  przedstawiono w tabeli 10.

Różnice pomiędzy wartościami uzyskanymi z kodu ZMWNI i CHEETAH wynikają z przyjętej metody obliczania współczynników JWL. W przypadku składnika termicznego, do określenia którego nie wykorzystuje się krzywej JWL, lecz obliczone wartości ciśnienia i temperatury dla ciśnienia atmosferycznego, wartości pozostają w dobrej zgodności. W przypadku składnika, który obliczany jest na podstawie równania JWL różnice dochodzą do 4%.

Tabela 10. Zestawienie wartości energii detonacji oraz jej składników, termicznego ( $Q_h$ ) oraz mechanicznego ( $W$ ), obliczonych za pomocą kodów ZMWNI oraz CHEETAH

Table 10. Values of the detonation energy and its thermal ( $Q_h$ ) and mechanical ( $W$ ) components calculated by using ZMWNI and CHEETAH codes

| Materiał wybuchowy | $Q_h$<br>[kJ/cm <sup>3</sup> ] | $W$<br>[kJ/cm <sup>3</sup> ] | $E_0$<br>[kJ/cm <sup>3</sup> ] | Program |
|--------------------|--------------------------------|------------------------------|--------------------------------|---------|
| RDX                | 0,0                            | 9,4170                       | 9,4170                         | ZMWNI   |
|                    | 0,0                            | 9,3570                       | 9,3570                         | CHEETAH |
| TNT                | 0,0945                         | 6,8173                       | 6,9118                         | ZMWNI   |
|                    | 0,0950                         | 7,0740                       | 7,1690                         | CHEETAH |

#### 4. NIERÓWNOWAGOWE OBLICZENIA TERMODYNAMICZNE

Program ZMWNI posiada opcję obliczeń nierównowagowych w dwu wariantach

- inercyjność chemiczna cząstek stałych przy równowadze termicznej produktów przemiany oraz cząstek
- brak równowagi termicznej produktów przemiany z inercyjnymi cząstkami stałymi.

Pierwsza z tych opcji jest realizowana przez program CHEETAH, druga nie. Do obliczenia temperatury materiału dodatku sprężonego na czole fali detonacyjnej (druga opcja) wykorzystano równanie adiabaty uderzeniowej oraz zależności ciepła właściwego od temperatury. Szczegóły metody opisano w pracy [11]. Dla obu opcji w punkcie CJ obliczono parametry detonacji mieszaniny zawierającej NM (nitrometan), PMMA (polimetakrylan metylu), magnez oraz glin w stosunku masowym 81,6/3,6/7,5/7,5. Przyjęto, że cząstki aluminium i magnezu są obojętne chemicznie. Wyniki porównano z wynikami obliczonymi programem CHEETAH i zestawiono w postaci tabel 11 i 12. Uzyskano dobrą zgodność parametrów detonacji.



Tabela 11. Porównanie wartości parametrów detonacji mieszaniny z NM uzyskanych z kodów ZMWNI oraz CHEETAH

Table 11. Comparison of values of detonation parameters for the NM-based explosive obtained from ZMWNI and CHEETAH codes

| Prędkość detonacji | Prędkość masowa | Wykładnik izentropy | Program |
|--------------------|-----------------|---------------------|---------|
| [m/s]              | [m/s]           |                     |         |
| 6109               | 1489            | 3,102               | ZMWNI   |
| 6108               | 1489            | 3,101               | CHEETAH |

Tabela 12. Porównanie wartości parametrów i funkcji stanu w warunkach detonacji mieszaniny z NM uzyskanych z kodów ZMWNI (wiersz górny) oraz CHEETAH (wiersz dolny)

Table 12. Comparison of values of thermodynamic parameters and functions obtained from ZMWNI code (top row) and CHEETAH code (bottom row) for detonation of the NM-based explosive

| Ciśnienie | Objętość właściwa    | Temperatura | Entalpia | Energia | Entropia  | Objętość właściwa produktów gazowych |
|-----------|----------------------|-------------|----------|---------|-----------|--------------------------------------|
| [atm]     | [cm <sup>3</sup> /g] | [K]         | [cal/g]  | [cal/g] | [cal/K/g] | [cm <sup>3</sup> /g]                 |
| 104160,2  | 0,6519               | 3089,8      | 1513,41  | -130,98 | 1,792     | 0,5676                               |
| 104147,3  | 0,6519               | 3089,3      | 1512,96  | -131,21 | 1,792     | 0,5676                               |

Założenie braku wymiany ciepła między produktami detonacji i cząstkami dodatku powoduje podwyższenie temperatury i ciśnienia gazowych produktów, co powinno skutkować wyższymi parametrami detonacji. W tabelach 13 i 14 przedstawiono wyniki obliczeń dla mieszaniny z NM przy założeniu nierównowagi termicznej w punkcie CJ.

Tabela 13. Wartości parametrów detonacji mieszaniny NM dla przypadku braku równowagi termicznej

Table 13. Detonation parameters of the NM-based explosive calculated for thermal non-equilibrium between the detonation products and solid ingredient

| Prędkość detonacji | Prędkość masowa | Wykładnik izentropy |
|--------------------|-----------------|---------------------|
| [m/s]              | [m/s]           |                     |
| 6204               | 1593            | 2,9                 |

Tabela 14. Obliczone parametry i funkcje stanu w warunkach detonacji mieszaniny NM przy braku równowagi termicznej pomiędzy produktami detonacji a cząstkami stałymi

Table 14. Thermodynamic parameters and functions for detonation of the NM-based explosive calculated for thermal non-equilibrium between the detonation products and solid ingredient

| Ciśnienie | Objętość właściwa    | Temperatura produktów gazowych | Temperatura dodatku | Entalpia | Energia | Entropia  | Objętość właściwa produktów gazowych |
|-----------|----------------------|--------------------------------|---------------------|----------|---------|-----------|--------------------------------------|
| [atm]     | [cm <sup>3</sup> /g] | [K]                            | [K]                 | [cal/g]  | [cal/g] | [cal/K/g] | [cm <sup>3</sup> /g]                 |
| 113125    | 0,6407               | 3464,8                         | 369,04              | 1662,5   | -92,85  | 1,73      | 0,5785                               |

W rzeczywistym procesie detonacji zewnętrzna warstwa w cząstkach dodatku zostanie w pewnym stopniu podgrzana przez produkty reakcji. Obliczenia wykonane przy założeniu równowagi termicznej lub jej braku pozwalają oszacować parametry detonacji mieszaniny wybuchowej odpowiednio „od dołu” i „od góry”.

## 5. PORÓWNANIE WYNIKÓW OBLICZEŃ Z DANymi EKSPERYMENTALNYMI

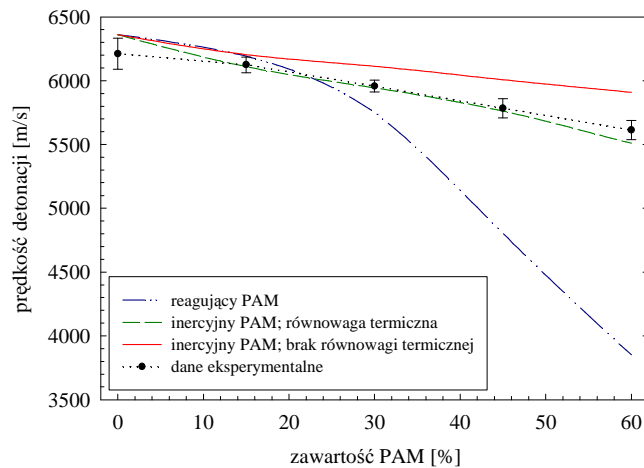
Nowe możliwości programu zademonstrowano, porównując wyniki obliczeń z danymi doświadczalnymi. W pracy [18] mierzono parametry detonacji oraz charakterystyki fal podmuchowych heterogenicznych, mieszanin termobarycznych. Ich głównymi składnikami były NM oraz stop magnezu z glinem PAM (Mg/Al ~50/50). Na podstawie zmierzonych parametrów detonacji oraz testu cylindrycznego próbowano określić model przemiany wybuchowej opisywanych mieszanin. W analizie teoretycznej rozpatrywano następujące przypadki:

- przemiana składnika stałego (PAM) w strefie reakcji fali detonacyjnej (równowaga termiczna produktów detonacji)
- brak przemiany składnika stałego (inercyjność) w strefie reakcji fali detonacyjnej oraz równowaga termiczna tego składnika i produktów detonacji
- brak przemiany składnika stałego (inercyjność) w strefie reakcji fali detonacyjnej oraz brak równowagi termicznej między tym składnikiem a produktami detonacji (podgrzanie składnika inercyjnego tylko poprzez sprężanie falą uderzeniową).

W ostatnim przypadku zastosowano model teoretyczny, w którym równanie stanu produktów uzyskano poprzez rozwinięcie energii wewnętrznej względem izentropy rozprężania JWL.

Analiza danych doświadczalnych oraz wyniki obliczeń pozwoliły autorom pracy [18] wyciągnąć wniosek, że dodatek zachowuje się jak składnik obojętny chemicznie, a przepływ ciepła z produktów detonacji do cząstek dodatku w strefie reakcji chemicznej jest niewielki.

W niniejszej pracy wykonano obliczenia termochemiczne dla trzech wymienionych przypadków, wykorzystując program ZMWNI. Policzono prędkości detonacji i porównano z wartościami zmierzonymi. Zestawianie przedstawiono w postaci wykresów na rys. 7.



Rys. 7. Porównanie eksperymentalnych prędkości detonacji mieszanki NM z PAM z prędkościami obliczonymi w programie ZMWNI dla przypadku reaktywnego dodatku (PAM), inercyjnego dodatku z równowagą termiczną w punkcie CJ oraz z nierównowagą termiczną

Fig. 7. Comparison of experimental detonation velocities of NM/PAM mixtures with velocities calculated by using ZMWNI code with the following assumptions: reactive addition (PAM), inert addition with thermal equilibrium in the CJ point, and inert addition with thermal non-equilibrium

Interpretacja położenia krzywych na rys. 7 jest bardzo trudna, ponieważ zmierzona prędkość detonacji czystego, zagęszczonego NM (bez dodatku PAM) jest niższa o ok. 150 m od prędkości uzyskanej z obliczeń termochemicznych. Jeśli wziąć pod uwagę szybkość zmniejszania się prędkości detonacji ze wzrostem zawartości dodatku, to najbardziej zbliżona do eksperymentalnej jest krzywa otrzymana przy założeniu inercyjności cząstek PAM i braku wymiany ciepła między nimi i produktami detonacji. Fakt ten potwierdzałby wniosek wyciągnięty w pracy [18].

## 6. PODSUMOWANIE

W pracy przedstawiono program do obliczania parametrów spalania, wybuchu i detonacji materiałów wybuchowych. Program zawiera również procedury wyznaczania izentropii JWL oraz energii detonacji na podstawie wyników obliczeń termochemicznych. Oprócz obliczeń równowagowych program umożliwia wykonanie obliczeń nierównowagowych, w których zakłada się obojętność chemiczną jednego lub kilku ze składników mieszaniny oraz brak wymiany ciepła między składnikiem i produktami reakcji. Program zweryfikowano poprzez porównanie wyników uzyskanych dla wybranych mieszanin wysokoenergetycznych z rezultatami obliczeń wykonanych za pomocą kodu opracowanego w Lawrence Livermore National Laboratory oraz z danymi doświadczalnymi.

Należy zaznaczyć, że w ostatnich latach pojawiły się normy europejskie, implementowane również w Polsce, w których zaleca się wyznaczanie parametrów wybuchu i spalania według procedur obliczeniowych wykorzystujących metody modelowania termodynamicznego. W normach tych proponuje się jednocześnie, aby aplikować te procedury w istniejących lub własnych kodach numerycznych. Prezentowany program umożliwia wykonanie obliczeń parametrów spalania, wybuchu i detonacji i jednocześnie może być dostosowany do konkretnych potrzeb wynikających z norm.

*Praca naukowa finansowana ze środków na naukę w latach 2009-2010  
jako projekt badawczy promotorski Nr O N204 011036.*

## LITERATURA

- [1] Mader Ch.J., *FORTTRAN BKW: a code computing the detonation properties of explosives*, Los Alamos Science Laboratory, Report LA-3704, 1967.
- [2] Cheret R., *The numerical study of the detonation products of an explosive substance*, French Commission of Atomic Energy, Report CEA-R-4122, 1971.
- [3] Levin H.B., Sharples R.E., *Operator's manual for RUBY*, Lawrence Livermore Laboratory, Report UCRL-6815, 1962.
- [4] Cowperthwaite M., Zwisler W.H., *Tiger computer program documentation*, Stanford Research Institute, Publication No. Z106, 1973.
- [5] Fried L.E., *CHEETAH 1.39 User's Manual*, Lawrence Livermore National Laboratory, Manuscript UCRL-MA-117541 Rev. 3, 1996.
- [6] Sućeska M., Calculation of the detonation properties of C-H-N-O explosives, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 16, 197-202, 1991.

- [7] Papliński A., Równowagowe obliczenia termochemiczne z uwzględnieniem dużej ilości składników, *Biuletyn WAT*, 42, 11, s. 123-143, 1993.
- [8] Cengiz F., Narin B., Ulas A., BARUT-X: a computer code for computing the steady-state detonation properties of condensed phase explosives, *Proceedings of 10th Seminar New Trends in Energetic Materials*, Pardubice, 2007, pp.117-127, 2007.
- [9] Grys S., Trzciński W.A., Termodynamiczne modelowanie procesów spalania i detonacji idealnych układów heterogenicznych, cz. 1. Podstawy teoretyczne i przegląd modeli, *Biuletyn WAT*, 58, 2, s. 251-274, 2009.
- [10] Grys S., Trzciński W.A., Termodynamiczne modelowanie procesów spalania i detonacji idealnych układów heterogenicznych, cz. 2. Aplikacja numeryczna, *Biuletyn WAT*, 58, 2, s. 275-296, 2009.
- [11] Grys S., Trzciński W.A., Termodynamiczne modelowanie procesów spalania, wybuchu i detonacji nieidealnych układów wysokoenergetycznych, *Biuletyn WAT*, 59, 3, s. 71-118, 2011.
- [12] Lee E.L., Horning H.C., Kury J.W., *Adiabatic expansion of high explosive detonation products*, Lawrence Livermore National Laboratory, Report UCRL-50422, 1968.
- [13] Jacobs S.J., *Energy of detonation*, United States Naval Ordnance Laboratory, Report NAVORD-4366, 1956.
- [14] White W.B., Johnson S.M., Danzig G.B., Chemical equilibrium in complex mixtures, *Journal of Chemical Physics*, 28, pp. 751-755, 1958.
- [15] Hoobs M.L., Baer M.R., Nonideal thermoequilibrium calculation using a large product species data base, *Shock Waves* 2, pp. 177-187, 1992.
- [16] Ornellas D.L., *Calorimetric determinations of the heat and products of detonation for explosives: October 1961 to April 1982*, Lawrence Livermore National Laboratory, Manuscript UCRL-52821, 1982.
- [17] Trzciński W.A., Application of a cylinder test for determining energetic characteristics of explosives, *Journal of Technical Physics*, 42, 2, pp. 165-179, 2001.
- [18] Trzciński W.A., Paszula J., Grys S., *Detonation parameters and blast wave characteristics of nitromethane mixed with particles of aluminium-magnesium alloy*, *Proceedings of 11th Seminar New Trends in Energetic Materials*, Pardubice, 2008, pp. 299-307, 2008.

## Thermodynamic Modelling of the Processes of Combustion, Explosion and Detonation of Non-Ideal High Energetic Systems

Sebastian GRYS, Waldemar A. TRZCIŃSKI

**Abstract.** In this work, the thermodynamic method is presented of resolve of the equilibrium state of a reactive non-ideal heterogeneous system. The ways are described of application of the method for determination of parameters of combustion, explosion and detonation of high energetic materials. The code called ZMWNI is presented which is numerical application of the method. The main algorithm of the code and means of its use are described. Results of calculations by the use of ZMWNI and CHEETACH codes are compared. Equilibrium calculations of parameters of combustion, explosion and detonation for some explosives are performed as well as isentropes of products expansion and detonation energy are estimated. Chemical inertness of a one of components of explosive mixture as well nonappearance of heat exchange between the component and the detonation products are assumed in the non-equilibrium calculations. At the end, some calculated detonation characteristics are compared with experimental data.

**Keywords:** high energetic materials, combustion, explosion, thermochemical codes, detonation