



고에너지 물질의 핫 스팟 기반 충격파-폭굉 천이 현상에 대한 멀티스케일 해석 Part A - 고에너지 물질의 반응속도식 추출

A Hot Spot Based Shock to Detonation Transition Simulation using Multi-Scale Approach Part A – Extraction of Chemical Kinetics of Energetic Material –

저자 (Authors)	김유천, 여재익 Yoocheon Kim, Jai-ick Yoh
출처 (Source)	한국연소학회지 23(4) , 2018.12, 23-28 (6 pages) Journal of The Korean Society of Combustion 23(4) , 2018.12, 23-28 (6 pages)
발행처 (Publisher)	한국연소학회 The Korean Society Of Combustion
URL	http://www.dbpia.co.kr/Article/NODE07585072
APA Style	김유천, 여재익 (2018). 고에너지 물질의 핫 스팟 기반 충격파-폭굉 천이 현상에 대한 멀티스케일 해석 Part A. 한국연소학회지, 23(4), 23-28.
이용정보 (Accessed)	서울대학교 147.46.241.*** 2019/01/17 17:29 (KST)

저작권 안내

DBpia에서 제공되는 모든 저작물의 저작권은 원저작자에게 있으며, 누리미디어는 각 저작물의 내용을 보증하거나 책임을 지지 않습니다. 그리고 DBpia에서 제공되는 저작물은 DBpia와 구독계약을 체결한 기관소속 이용자 혹은 해당 저작물의 개별 구매자가 비영리적으로만 이용할 수 있습니다. 그러므로 이에 위반하여 DBpia에서 제공되는 저작물을 복제, 전송 등의 방법으로 무단 이용하는 경우 관련 법령에 따라 민, 형사상의 책임을 질 수 있습니다.

Copyright Information

Copyright of all literary works provided by DBpia belongs to the copyright holder(s) and Nurimedia does not guarantee contents of the literary work or assume responsibility for the same. In addition, the literary works provided by DBpia may only be used by the users affiliated to the institutions which executed a subscription agreement with DBpia or the individual purchasers of the literary work(s) for non-commercial purposes. Therefore, any person who illegally uses the literary works provided by DBpia by means of reproduction or transmission shall assume civil and criminal responsibility according to applicable laws and regulations.

고에너지 물질의 핫 스팟 기반 충격파-폭굉 천이 현상에 대한 멀티스케일 해석.

Part A: 고에너지 물질의 반응속도식 추출

김유천* · 여재익**

*서울대학교 기계항공공학부

A Hot Spot Based Shock to Detonation Transition Simulation using Multi-Scale Approach Part A: Extraction of Chemical Kinetics of Energetic Material

Yoocheon Kim* and Jai-ick Yoh**

*Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Seoul National University, Korea

(Received 1 August 2018, Received in revised form 17 October 2018, Accepted 26 October 2018)

ABSTRACT

Empirical and phenomenological hydrodynamic reactive flow models, such as Ignition and Growth and Johnson-Tang-Forest, have been effective in predicting shock initiation and detonation characteristics of various energetic substances. These models utilize the compression and pressure properties of the reacting mixture for quantifying their reaction rates. However, it has long been known that shock initiation of detonation is controlled by local reaction sites called ‘hot spots.’ In this study, a hot spot model based on the temperature-dependent Arrhenius reaction rate is developed. The complex reaction process of target explosive is addressed by conducting the Differential Scanning Calorimetry (DSC) while the rate of reaction is determined using the Friedman isoconversional method.

Key Words : Energetic material, Kinetics, Friedman isoconversional method, Hot spot model, Differential scanning calorimetry

1. 서론

Ignition and Growth[1]와 Johnson-Tang-Forest[2]와 같은 경험식 기반의 반응성 유동 모델은 고체 폭발물의 충격에 의한 점화 및 폭발 특성을 예측하는데 주로 사용되어 왔다. 이 모델은 반응율을 정량화하기 위해 반응 혼합물의 압축도 및 압력을 변수로서 활용한다. 그러나 고체 폭발물의 충격에 의한 점화

는 본래 ‘핫 스팟 (hot spot)’이라 불리는 국부적인 반응 지점에 의해 발생하고 이로 인해 발생하는 충격파는 매우 복잡한 구조를 가지고 있다. 실제 현상을 기반으로 하는 데토네이션 모델은 고체 폭발물의 물리적, 화학적 반응과정을 정확하게 모사하는 데 있어 필수적이다. 그러한 의미에서 핫 스팟 모델은 충격파에 의한 핫 스팟의 점화, 주위의 고체 폭발물로의 핫 스팟의 성장 그리고 핫 스팟의 중첩에 의한 데토네이션으로의 천이현상을 모사할 수 있게 한다. 지금까지의 경험식 기반의 데토네이션 모델은 이러한 실제 현상에 대한 모사를 고려하지 않았으며 고체 폭발물의 각 입자에 대한 열 분해반응은 전체적으로 봤을 때 핫 스팟의 형성과 반응과정을 나타내는 가장 기본적인 화학적 과정이다.

† Corresponding Author, jjyoh@snu.ac.kr

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

기존의 문헌에 따르면 일반적으로 one-step 화학 반응식을 기반으로 하는 핫 스팟 모델은 핫 스팟의 복잡한 점화 반응 과정을 설명하기에는 부족하기 때문에 시뮬레이션의 결과를 향상시키기 위해 복잡한 화학반응식이 선호되었다[3]. 본 연구에서는 Firedman 등전환 화학 반응식을 열 기반 분해반응 모델로서 채택하였으며 Differential scanning calorimetry(이하 DSC)를 사용하여 실험적으로 추출되었다. 고에너지 물질의 화학 반응식을 나타내는 데 있어 주로 사용되는 세 가지의 대표적인 방법은 다음과 같다. 첫 번째 방법은 수백 개 이상의 세부 화학반응을 전부 고려하는 매우 상세한 방법이다[4]. 고에너지 물질 대부분의 실제 화학반응은 매우 복잡한 세부 화학반응을 가지며, 단일 화학반응 과정으로는 기술할 수 없다. 그러나 이러한 화학반응식의 경우 계산 시간을 매우 많이 소모하며 따라서 효율적인 계산이 불가능하다. 두 번째 방법은 멀티스텝 화학반응식으로서 전체 화학 반응과정을 대표하는 몇 가지의 화학 반응 단계로 나타낸다[5]. 이 방법의 경우 정확성과 계산 효율성을 동시에 확보하지만 정확도 측면에서는 첫 번째 방법보다 크게 떨어진다. 마지막으로 Friedman 등전환 방법[6]을 이용하는 방법은 전체 화학반응 동안 화학반응의 진행률에 따라 변화하는 활성화 에너지와 Pre-exponential factor를 활용해 화학반응 과정을 나타낸다. 이 화학반응식은 몇 가지의 화학 반응으로 나타내지 않고, 매우 많은 숫자의 Arrhenius factor, 즉 활성화 에너지와 Pre-exponential factor를 전체 화학반응의 진행도에 따라 변화하는 값으로서 나타낸다. 이 방법을 통해 추출된 화학반응속도식은 계산에 사용되는 화학종 변수는 한 개로서 단일 스텝 화학반응식 형태를 갖지만 실제 계산에 사용되는 Arrhenius factor는 반응 진행도에 따라 수많은 쌍을 갖는다. 이로 인해 반응성 유동을 시뮬레이션 하는데 있어 계산의 정확도뿐만 아니라 계산의 효율성을 동시에 획득할 수 있는 장점이 있다[3].

본 연구에서 대상으로 하는 고에너지 물질은 95% cyclotetramethylene-tetranitramine (HMX)와 5% Estane binder로 구성되어 있다. 프레스 후의 초기 밀도는 1.82 g/cc이며 본 논문에서는 대상 물질을 95% HMX로 지칭하도록 하겠다.

본 논문에서는 고에너지 물질의 핫 스팟 기반 충격파-폭굉 천이 현상에 대한 멀티스케일 해석 첫 번째 파트로서 대상 고에너지 물질의 반응속도식을 실험적, 이론적으로 추출해내는 과정을 보고하고자 한다. 두 번째 파트에서는 추출된 반응속도식을 기반으로 멀티스케일 핫 스팟 모델을 개발하고 검증문제를 통해 타당성을 검토한 후 충격파-폭굉 천이 현상에 대한 시뮬레이션을 수행하고자 한다.

2. 반응속도식 추출

2.1. DSC 실험 셋업

DSC 실험은 Mettler Toledo 사의 DSC 3+ 기기로 수행되었으며, 40 μL 의 알루미늄 팬이 사용되었다. 밀폐된 알루미늄 팬은 고에너지 물질의 발열 반응에 의해 생성된 압력을 견디는 데 사용되었다. 개방형 팬을 사용할 경우 고에너지 물질의 기화가 분해반응보다 빠르게 일어나기 때문에[7] 발열 화학 반응을 관찰하기 위해 밀폐형 팬을 사용하였다. 또한, 실험 전반에 걸쳐 80 mL/min의 질소 유량을 유지하여 질소 분위기에서 실험이 수행되었으며 이는 고에너지 물질의 주변 대기와의 반응을 비활성 시켜주는 역할을 한다. 고에너지 물질은 시료의 자기 발열현상을 방지하기 위해 가열률 실험 조건에서 시료 질량과 가열률의 곱을 1 $\text{mg}^\circ\text{C}/\text{min}$ 이하로 유지하였다. 사용된 시료의 질량의 범위는 0.2~1.7 mg이며, 0.5, 1.0, 2.0 및 4.0 $^\circ\text{C}/\text{min}$ 의 4가지 일정 가열률이 35 $^\circ\text{C}$ 와 600 $^\circ\text{C}$ 사이의 온도범위에서 사용되었다.

2.2. DSC 실험결과 및 반응속도식 추출

DSC는 매우 적은 양의 샘플을 사용하여 수행되는 열량 측정실험이다. 샘플 팬과 기준 팬이 열이 가해지는 가열로에 놓여지며, 둘 다 동일한 가열온도 및 가열률로 가열된다. 샘플 팬에는 고에너지 물질 시료가 담겨있고 기준 팬에는 시료가 담겨져 있지 않다. 이 경우, 샘플 팬과 기준 팬 사이의 온도에 따른 발열량의 차이는 샘플의 화학 반응에 의해 발생되며 생성된 에너지의 차이는 열적 평형에 의해 두 팬 사이에서 열 에너지의 흐름을 발생시킨다. 이러한 열 에너지 전달량이 DSC 신호로서 측정된다. 일반적인 DSC 신호는 Fig. 1과 같은 형태를 띠며 DSC 실험결과로부터 반응 생성물질의 질량 분율 λ 및 반응 속도 $d\lambda$

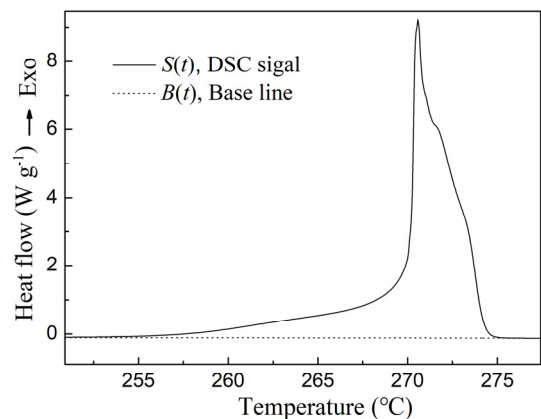


Fig. 1. DSC signal and baseline.

dt 가 식 (1)-(3)으로부터 도출된다[8].

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{S(t) - B(t)}{\int_{t_0}^{t_{end}} [S(t) - B(t)] dt} \quad (1)$$

$$\lambda(t) = \frac{\int_{t_0}^t [S(t) - B(t)] dt}{\int_{t_0}^{t_{end}} [S(t) - B(t)] dt} \quad (0 < \lambda < 1) \quad (2)$$

$$B(t) = [1 - \lambda(t)](a_1 + b_1 t) + \lambda(t)(a_2 + b_2 t) \quad (3)$$

여기서, $S(t)$ 는 DSC 시그널의 시간에 따른 함수를 나타내며, $B(t)$ 는 DSC 시그널의 크기를 결정하기 위한 기준선 함수를 나타낸다. 기준선은 다음과 같은 과정을 통해 결정된다. DSC 시그널 $S(t)$ 의 반응 시작점과 반응 종료점을 먼저 분석자가 설정을 한다. 반응 시작점과 반응 종료점은 양의 값을 가지는 Heat flow가 관측되기 시작하는 지점과 사라지는 지점으로 정한다. 이 두 지점에서 $S(t)$ 함수의 접선을 각각 $a_1 + b_1 t$ 과 $a_2 + b_2 t$ 로써 구한다. 그리고 이 두 접선을 하나의 방정식으로 연결시키기 위해 고에너지 물질의 반응 질량 분율 λ 을 통해 식 (3)과 같이 중첩시킨다. λ 는 반응시작점에서 0의 값 그리고 반응종료점에서 1의 값을 가지므로 기준선 함수 $B(t)$ 는 식 (3)에 따라 반응시작점에서는 $a_1 + b_1 t$ 의 형상을 띄고 반응종료점에서는 $a_2 + b_2 t$ 의 형상을 나타내며 중간지점에서는 두 접선이 동일한 분율로 혼합된 Sigmoid 형상을 나타낸다. 고에너지 물질 반응 질량 분율 λ 는 식 (2)를 통해 계산된다. 시간 t 에서의 질량 분율 λ 는 시간 t 까지 방출된 열에너지를 반응이 종료되는 시점까지 방출된 열에너지의 총량으로 나누어 구한다. 마찬가지로 원리로 반응 속도 $d\lambda/dt$ 는 시간 t 에서의 순간적인 열 흐름을 화학 반응 과정 동안 방출된 에너지의 총량으로 나누어 구한다.

95% HMX의 DSC 실험결과를 Fig. 2에 나타내었다. DSC 측정결과를 보면 95% HMX의 DSC 신호는 가열률이 증가함에 따라 발열반응의 피크 값이 높아지는 것을 확인할 수 있으며 또한 더 높은 온도에서 반응이 시작되어 더 높은 온도에서 반응이 종결되는 것을 확인할 수 있다. 95% HMX의 반응열 (Q)는 각각의 가열률 실험에서의 DSC 신호로부터 식 (4)를 이용하여 계산되었으며 모든 가열률 실험에서의 평균값을 사용하여 계산하였다. 각 가열률 실험에서 반응열 Q 에 대한 최대 편차는 8%이며 열분석 학계에서 10% 이내의 값을 갖는 경우 신뢰도를 갖는다고 받아들여지고 있다[9].

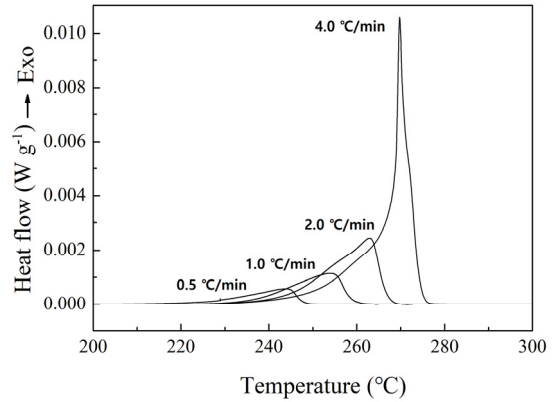


Fig. 2. DSC signals with four constant heating rates.

Table 1. Reproducibility of DSC experiments

	Error (%)			
	0.5	1.0	2.0	4.0
Heating rate (°C/min)	0.5	1.0	2.0	4.0
Peak Temp. (°C)	0.46	0.23	0.26	0.18
Norm. peak Height (W/g)	13.41	3.10	3.25	3.49
Heat of reaction (J/g)	7.63	2.23	9.24	2.54

$$Q = \int_{t_0}^{t_{end}} [S(t) - B(t)] dt \quad (4)$$

이러한 기준으로부터 계산된 95% HMX의 반응열은 $Q = 1293.6$ J/g이다. 이 값은 혼합물로서의 95% HMX의 단위 질량 당 방출되는 에너지를 나타낸다. DSC 실험에 대한 반복성과 신뢰도를 확인하기 위해 각 가열률 경우에 대해 3번의 반복실험을 수행하였으며 이를 Table 1에 나타내었다.

본 연구에서는 반응 속도식으로서 식 (5)와 같은 Friedman이 제안한 형태의 Arrhenius 방정식을 사용하였다[6].

$$\frac{d\lambda}{dt} = [A_\lambda f(\lambda)] \exp\left(\frac{-E_\lambda}{RT}\right) \quad (5)$$

여기서 R , t , T , 는 각각 일반 기체상수, 시간, 온도를 나타내며 A_λ 그리고 E_λ 는 순간 생성물 질량 분율에 따른 pre-exponential factor, 활성화 에너지를 나타낸다. 함수 $f(\lambda)$ 는 반응물의 생성물질의 질량분율에 대한 영향을 나타내는 함수이다. 식 (5)의 양변에 자연로그를 취하면 다음과 같은 형태를 나타낸다.

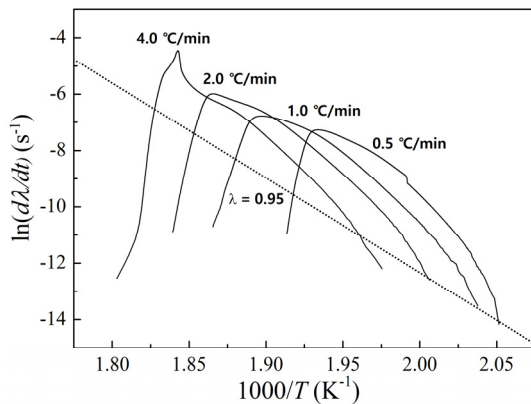


Fig. 3. Friedman analysis of 95% HMX.

$$\ln \frac{d\lambda}{dt} = \ln[A_\lambda f(\lambda)] - \frac{E_\lambda}{RT} \quad (6)$$

식 (6)을 이용하여 $-E_\lambda/R$ 을 기울기로 하고 $\ln[A_\lambda f(\lambda)]$ 를 수직축과의 절편으로 하는 Arrhenius plot을 도시할 수 있다. 식 (1)~(3)을 이용해 Arrhenius plot을 나타내면 Fig. 3과 같다. 이를 Friedman 분석이라고 하며 Friedman 분석을 통해 대상 물질의 반응속도 상수들을 도출해낼 수 있다. Fig. 3은 95% HMX에 대한 Friedman 분석 결과를 나타낸다. 여기서 각각의 가열률에 대한 분석결과는 DSC 실험값으로부터 도출된 결과를 이용해 도출되었다. 여기서 각 DSC 결과의 동일한 생성물 질량분율 상태를 연결하는 직선이 그려짐을 확인할 수 있다. 이 직선들의 기울기와 수직축과의 절편은 특정 생성물질량분율에서의 활성화 에너지와 pre-exponential factor를 나타낸다. 예를 들어, Fig. 3에 표기된 직선은 $\lambda = 0.95$ 에 해당하는 직선을 나타낸다. 이 과정을 따라 $\lambda = 0$ (미 반응)에서 $\lambda = 1$ (반응 종료)까지 반응 진행에 해당하는 반응속도 변수를 추출할 수 있다. 본 연구에서는 프리드만 분석법에서 0.99의 높은 상관 계수를 나타냈으며, 이는 Friedman 분석을 통해 도출된 반응속도 변수의 높은 신뢰도를 나타낸다.

Friedman 분석을 통해 도출된 반응속도변수는 실제 DSC 실험이 수행되지 않은 높은 온도영역에도 적용될 수 있다[8]. 그 이유는 다음과 같다. Friedman 분석은 다양한 가열률 DSC 실험을 통해 도출된 각 DSC 시그널의 동일한 생성물 질량분율 지점을 연결하는 직선이 더 높거나 낮은 가열률에서 수행된 다른 DSC 시그널의 동일한 생성물 질량분율 지점을 통과한다고 가정한다. Fig. 3을 보면 4.0 °C/min 보다 높은 가열률을 통해 이루어진 DSC 실험결과를 “Case H”라고 했을 때 “Case H”는 4.0 °C/min 실험결과보다 그래프의 왼쪽 즉 더 높은 온도영역 분포될 것임

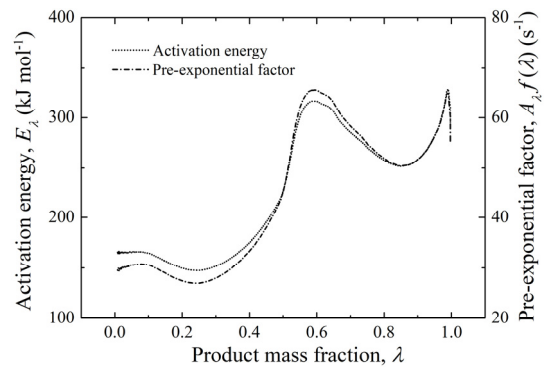


Fig. 4. Activation energy and pre-exponential factor parametrized by the progress of reaction λ .

을 예측할 수 있다. 마찬가지로 0.5 °C/min보다 낮은 가열률로 수행된 실험결과를 “Case L”이라고 할 때 “Case L”은 0.5 °C/min의 DSC 결과보다 그래프의 오른쪽에 분포할 것임을 예측할 수 있다. 그리고 Friedman 분석을 통해 실제 실험값으로부터 도출된 직선은 “Case H”와 “Case L”이 분포한 온도영역을 지나가며 “Case H”와 “Case L”의 동일한 생성물 질량분율지점을 통과하게 된다. 즉, 실제 수행된 DSC 실험으로부터 도출된 직선은 실험이 실제로 수행되지 않은 다른 가열률과 온도영역을 통과한다. 이는 높은 상관계수가 보장될수록 타당한 가정이다. 이러한 이유로 본 연구에서는 DSC 실험이 수행된 온도영역뿐만 아니라 더 높은 온도 영역에서도 도출된 반응속도식 변수가 적용될 수 있을것이라 가정하였다.

생성물 질량분율 λ 에 따라 변화하는 활성화 에너지와 pre-exponential factor를 Fig. 4에 나타내었다. 이는 추출된 반응속도식이 각각의 반응 진행도에 따라 변화하는 반응속도 변수를 활용함으로써 one-step과 같은 단순한 형태의 반응속도식이 아닌 전체 화학반응 과정을 반응 시작점부터 종료지점까지 상세하게 기술할 수 있는 모델이라는 것을 나타낸다.

3. 반응속도식 검증문제

설명된 방법에 따라 추출된 반응속도식과 반응속도 변수를 검증하기 위해 Fig. 4에 제시된 반응속도 변수를 사용하여 DSC 실험결과를 수치적으로 재현하였다. 온도와 생성물질량분율에 대한 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{dT}{dt} = \dot{w} \quad (7)$$

$$\frac{d\lambda}{dt} = [A_\lambda f(\lambda)] \exp\left(\frac{-E_\lambda}{RT}\right) \quad (8)$$

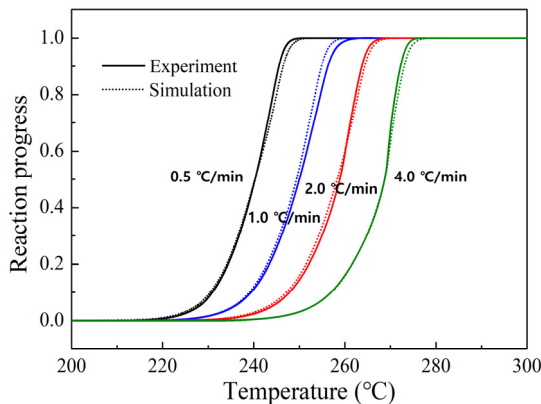


Fig. 5. Reaction progress comparison between experiment and simulation.

여기서 w 는 가열률을 나타낸다. DSC 실험에서는 수 밀리그램 정도의 샘플을 사용하고 이에 따른 화학반응열을 즉각적으로 주변의 기준 물질로 방출한다 [8]. 따라서 생성된 화학반응열은 샘플의 온도를 올리는 데 사용되지 않으며 화학반응 과정은 생성된 화학반응열의 영향을 받지 않는다. 따라서 식 (7)에서 화학반응에 의해 생성된 열은 무시되었다. 식 (8)의 반응속도변수로는 Fig. 4의 반응 진행도에 따라 변화하는 반응속도변수가 사용되었다.

DSC 실험과 시뮬레이션의 생성물 질량분율을 Fig. 5에 나타내었다. 도출된 계산결과는 실험 값과 잘 일치하며, 추출된 반응속도식과 반응속도변수는 95% HMX의 반응 진행을 설명하는 데 적합함을 나타낸다.

DSC를 통해 도출된 반응속도식은 생성물의 매 질량분율 별 변화하는 활성화 에너지와 빈도인자를 사용함으로써 화학반응과정을 매우 정밀하게 모사하는 장점을 갖는다. 기존에 주로 활용되었던 고에너지 물질의 화학반응식에 대한 모사의 경우 [3] 화학반응현상을 양의 정수 값을 갖는 n 단계로 가정한다면 $n+1$ 개의 계산해야 하는 화학종 변수가 생긴다. 즉 n 의 값이 커질수록 계산시간은 크게 증가하게 된다. 그러나 본 연구를 통해 도출된 반응속도식의 경우 형태상으로는 1단계의 화학반응식 형태를 가정하지만 그 화학반응식 안에서 질량분율에 따른 화학반응과정을 매우 정밀하게 모사하기 때문에 화학종 변수는 단 2개이지만 정확한 계산과 빠른 계산 시간이라는 장점을 갖는다.

이러한 계산목적에서의 활용도 측면에서의 장점을 바탕으로 본 연구에서는 추출된 95% HMX의 화학반응모델을 활용해 대상물질의 Hot spot에 의한 충격파-폭굉 천이현상을 멀티스케일 접근법을 통해 해석하고자 한다. 이에 대한 연구는 본연구의 Part B: 핫 스팟 기반 멀티스케일 해석에서 보고하고자 한다.

4. 결론

본 연구를 통해 멀티스케일 핫 스팟 기반의 충격파-폭굉 천이현상 해석코드에 적용될 대상 고에너지 물질의 반응속도식을 추출하였다. 본 연구에서 대상으로 삼은 고에너지 물질은 국방과학연구소에서 자체적으로 개발된 고에너지 물질로서 어떠한 논문이나 문헌에도 반응속도식에 대해 보고된 바가 없는 미지의 물질이다. 따라서 본 연구를 통해 제시된 반응속도식 추출과정을 통해 미지의 고에너지 물질에 대한 열적 반응속도식을 규명하였다는 의미가 있다. 또한 제안된 방법론을 이용할 경우 대상 고에너지 물질의 충격파-폭굉 천이현상을 온도 즉 열에너지 기반으로 실제 물리적인 현상에 충실하게 해석할 수 있다는 점에서 학술적으로 뛰어난 가치를 지니고 있다고 할 수 있으며 제안된 반응속도모델은 수치적으로 뛰어난 정확도와 계산 효율성을 겸비한 모델로서 그 의미가 크다고 할 수 있다.

후기

본 연구는 (주)한화 Zr-Ni계 지연관 성능해석 연구의 지원을 받아 수행되었으며, 국방과학연구소의 지원을 받은 고품화약의 폭발성능 및 운용안정성 정밀해석 SW 개발(핵심 SW 응용연구)을 통해 수행되었습니다.

References

- [1] E.L. Lee, C.M. Tarver, Phenomenological Model of Shock Initiation in Heterogeneous Explosives, *Phys. Fluids*, 23 (1980) 2362-2372.
- [2] J.N. Johnson, P.K. Tang, C.A. Forest, Shock-Wave Initiation of Heterogeneous Reactive Solids, *J. Appl. Phys.*, 57 (1985) 4323-4334.
- [3] Y. Kim, J. Park, J.J. Yoh, Isoconversional Method for Extracting Reaction Kinetics of Aluminized Cyclotrimethylene-Trinitramine for Propulsion, *J. Propul. Power*, 32 (2016) 777-784.
- [4] C.F. Melius, *Chemistry and Physics of Energetic Materials*, Springer Netherlands, Dordrecht, 1990, 51-78.
- [5] A.K. Burnham, R.K. Weese, A.P. Wemhoff, J.L. Maienschein, A Historical and Current Perspective on Predicting Thermal Cookoff Behavior, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 89 (2007) 407-415.
- [6] H.L. Friedman, Kinetics of Thermal Degradation of Char-Forming Plastics from Thermogravimetry, Application to a Phenolic Plastic, *J. Polym. Sci.*

- Pol. Sym., 6 (1963) 183-195.
- [7] C. Owens, A. Nissen, P.C. Souers, LLNL Explosives Reference Guide, Lawrence Livermore National Laboratory, 2003, LLNL Report No. UCRL-WEB-145045.
- [8] B. Roduit, P. Folly, B. Berger, J. Mathieu, A. Sarbach, H. Andres, M. Ramin, B. Vogelsanger, Evaluating SADT by Advanced Kinetics-based Simulation Approach, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 93 (2008) 153-161.
- [9] S. Vyazovkin, A.K. Burnham, J.M. Criado, L.A. Perez-Maqueda, C. Popescu, N. Sbirrazzuli, ICTAC Kinetics Committee Recommendations for Performing Kinetic Computations on Thermal Analysis Data, *Thermochim. Acta*, 520 (2011) 1-19.