11e SESSION D'ETUDE
SUR
LES TECHNIQUES DE SAUTAGE

THERMOCHIMIE DES EXPLOSIFS

Roger Favreau, Collège militaire royal de Saint-Jean

LA THERMOCHIMIE DES EXPLOSIFS

R.F. Favreau (1)

N. Tienkamp (2)

Pour présentation à la 11e Session d'Etude sur les Techniques de Sautage, Département des Mines de l'Université Laval et SEEQ, Québec, 8 - 9 décembre 1988.

(1) Professeur de Physique, Collège Militaire Royal de St.Jean; Expert Conseil, ETI.

(2) Spécialiste Technique, Explosives Technologies Internatinal, North Bay, Ont.

R E S U M E

La communication explique le rôle joué par la thermochimie lors d'un sautage, ainsi que les principes de base de celle-ci qui permettent de calculer la courbe de pression p (v) des gases de l'explosif en fonction de leur volume durant leur expansion suite à la détonation.

La courbe p (v), en conjunction avec les propriétés élastiques du roc et la géométrie du plan de sautage, est utilisée dans les simulations de coup de tir afin de prédir la qualité des résultats du sautage.

La communication présente des exemples de calcul de thermochimie, ainsi que des exemples de l'usage de la courbe p (v) dans les simulations de sautage.

THERMOCHIMIE DES EXPLOSIFS

R.F. FAVREAU

N. TIENKAMP

(I) AVANT-PROPOS:

Du point de vue de l'usagé, l'aspect le plus spectaculaire d'un explosif se manifeste lors de l'explosion de celui-ci produisant beaucoup de bruit, de vibrations, de fumée, de poussière et de roc qui éclate et est projeté. Lors de la manutention de l'explosif, soit durant le transport des explosifs ou leur chargement dans les trous de mine, ceux-ci semblent assez inoffensifs, leur poids étant probablement l'aspect qui importe le plus car le chargement d'un tir peut représenter la manutention de centaines de kilogrammes de matériel.

Pourtant, entre la phase chargement et la phase explosion dans le roc, il se passe des phénomènes très intéressants. Ceux-ci se rattachent à la thermochimie des explosifs, et ils jouent un rôle clef pour décider de la qualité des résultats d'un sautage à l'explosif. Il est vrai que le coût d'un explosif dépend princi-

palement des ingrédients chimiques qui le constituent. Par contre, les résultats du dynamitage dépendent de l'effet combiné de deux aspects clefs, soient la thermochimie de l'explosif durant l'explosion, et les aractéristiques élastiques du roc (Module de Young Y, Coefficient de Poisson s, densité du roc d, et résistance dynamique du roc en tession S_T). En somme, la performance d'un explosif durant l'explosion ne dépend pas des ingrédients originaux, mais plutôt de la thermochimie des gases produient; ainsi un explosif est mieux caractérisé par sa thermochimie que par les ingrédients chimiques qui le constituent. Le but de la communication est d'expliquer la thermochimie d'un explosif, et comment celle-ci ensemble avec les propriétés élastiques du roc décident de la qualité d'un sautage

(II) CHANGEMENTS THERMOCHIMIQUES LORS DE L'EXPLOSION:

La conversion de l'explosif, à partir des ingrédients chimiques qui le constituent avant l'explosion, en gases qui agissent sur le roc durant l'éclatement, se fait en deux étapes, soit:

La Zone de Détonation: Il se propage dans la colonne d'explosif (voir fig. 1) un front de détonation dont la vitesse est V, la Vitesse de Détonation. Derrière celui-ci, il existe une Zone de Détonation dans laquelle les ingrédients chimiques originaux sont convertis en gases de détonation à pression P_d et température T_d; la conversion est presque instantanée, ne durant qu'environ 5 - 10 microsecondes dans le cas des explosifs sensibles. La matière dans la Zone de Détonation est poussée vers l'avant, de sorte que sa densité excède la densité originale d_x de l'explosif.

La Zone des Gases d'Explosion: A l'arrière de la Zone de Détonation, la densité de la matière retombe à sa valeur originale, et la pression et température passent de P_d et T_d aux valeurs P_e et T_e qui s'appellent la Pression d'Explosion et la Température d'Explosion. En moyenne, P_e est environ la moitié de P_d et c'est P_e qui effectivement débute l'action des gases d'explosion sur le roc environnant. P_e pour les explosifs commerciaux varie entre environ 20 Kb et 60 Kb.

La Zone d'Expansion des Gases: A mesure que le roc cède sous la haute pression P_e, le volume des gases augmente et leur pression p (v) et température T (v) diminuent. p(v) et T (v) s'appellent la pression et température des gases en expansion, et leurs valeurs dépendent du volume spécifique v qui augmente lors de l'expansion des gases, où v est le volume par gm. de gas d'explosion.

Ainsi l'action sur le roc d'un explosif donné dépend entièrement des valeurs de p (v) durant l'expansion ainsi que de la résistance du roc à cette pression. La fig.2 montre deux exemples de la baisse de p (v) durant l'expansion; comme on voit, la courbe de p (v) varie entre deux explosifs dont les densités et les ingrédients chimiques originaux différent. Par contre, pour un roc donné c'est uniquement l'allure de p (v) qui décide de la fragmentation et déplacement du roc. Si les ingrédients chimiques de deux explosifs différent, mais leurs courbes p (v) sont identiques, alors pour ce roc donné les résultats du sautage seront les mêmes.

(III) CALCUL DE LA THERMOCHIMIE D'UN EXPLOSIF:

Par la Thermochimie d'un explosif nous voulons dire la façon que les ingrédients chimiques originaux de cet explosif, ainsi que sa densité, décident l'allure de la courbe p (v). Les calculs pour obtenir p (v) à partir des ingrédients de l'explosif et sa densité dans le trou de mine sont très laborieux dans le cas des explosifs commerciaux en usage; ainsi ils se font à l'aide de gros programmes sur ordinateur, dont la Fig.3 présente certains exemples. Voici un résumé des principes à la base de ces programmes:

(i) Balance Chimique: Il faut que les atomes tel H, O, N originallement présents dans les ingrédients chimiques originaux se retrouvent dans les gases d'explosion. Seulement leurs combinaisons en différents genres de molécules sont altérées. Ainsi la première tâche d'un programme de thermochimie est d'assurer, au moyen de nombreuses équations de conservation des espèces atomiques, que le nombre de chaque genre d'atomes présent dans les molécules des ingrédients chimiques originaux soit retrouvé dans les molécules des gases d'explosion. Un exemple est montré à la Fig.4. En pratique, le programme solutionne une vingtaine d'équations simultanées du genre de celles de la Fig.4,

(ii) Equilibre Chimique: Cela n'est pas suffisant d'assurer dans les calculs qu'il y aie balance des atomes entre espèces chimiques avant et après leur conversion lors de l'explosion; il faut aussi que les proportions des différents genres de molécules qu'on retrouve après la conversion soient en

équilibre. Or cet équilibre chimique dépend de la température T des gases d'explosion. Il existe, pour chaque réaction chimique qui joue un rôle dans la thermochimie des explosifs commerciaux, une équation d'équilibre qui tient compte de la température T; un exemple est présenté à la Fig.5. Comme dans les explosifs commerciaux on retrouve de nombreux ingrédients chimiques originaux, alors il y a un grand nombre de réactions possibles. Ainsi le programme doit tenir compte de toutes celles-ci, ce qui veut dire un grand nombre d'équation simultanées du genre de celles de la Fig.5 . Celles-ci s'ajoutent aux équations de balance des espèces de la partie (i), ce qui fait un très gros programme.

(iii) Conservation d'Energie: En plus des équations de Balance Chimique et celles d'Equilibre Chimique, il faut que l'énergie du système soit conservé durant les réactions chimiques et l'expansion des gases. La source primaire d'énergie est l'énergie chimique Q dégagée par la transformation des genres de molécules présents avant l'explosion aux genres de molécules qui constituent les gases d'explosion. Cette énergie est convertie de deux façons, soit en travail W fait par les gases sur le roc durant l'expansion et en chaleur C des gases eux-mêmes; ainsi

$$Q = W + C$$

et cette relation doit être maintenue à chaque moment durant la formation des gases et leur expansion. La Fig.6 indique comment on calcul W et C.

(iv) Equation d'Etat: Finallement, en plus des équations énumérées aux parties (III) (i), (ii) et (iii), une dernière condition doit être respectée par l'ensemble des gases suite à leur création et durant toute l'expansion, soit l'équation d'état. De plus, on ne peut pas utiliser l'équation simple d'un gas idéal, car la densité et la pression des gases d'explosion sont trop fortes. Il faut utiliser une forme de l'équation d'état plus élaborée qui tient compte du volume incompressible des molécules elles-mêmes. Il existe plusieurs formes d'équation d'état acceptables, telle celle de Cook

$$p\,(v - \alpha) = n\,R\,T$$

où p est la pression, v le volume spécifique, α le covolume (qui tient compte du volume incompressible des molécules), T la température et n et R sont définis à la Fig.7. On peut démontrer que les différentes formes d'équation d'état utilisées dans les programmes de thermochimie présentés à la Fig.3 sont en fait équivalentes. Afin qu'une équation d'état soit acceptable pour le calcul précis de la thermochimie des explosifs courants, il faut qu'elle inclus un traitement rigoureux des produits d'explosion non gaseux tel le Al_2O_3 que l'on retrouve après la détonation d'un explosif qui contient de l'Aluminium.

(v) Solution du Problème: Ainsi, le calcul de la Thermochimie d'un explosif de composition chimique donnée requiert la solution d'un grand nombre d'équations simultanées, soient celles de Balance Chimique, d'Equilibre Chimique, de Conservation d'Energie, et l'Equation d'Etat. Ceci est un processus

laborieux, surtout que le nombre d'équations est toujours inférieur de un au nombre d'équations disponibles. On surmonte ce problème par la méthode des devinettes, habituellement appliquée à la température T; i.e, on devine la valeur de T, on fait la solution des équations simultanées, ce qui permet de calculer T. Ensuite on compare la valeur de T devinée avec la valeur de T calculée et on répète le processus jusqu'à ce que T calculé et T deviné concordent à une certaine précision. Ceci s'appelle la méthode itérative, et c'est la répétition itérative des calculs qui fait que le programme requiert un très gros ordinateur. De plus, il faut faire le calcul à chacun de T_d et T_e ainsi qu'à une quinzaine de valeurs du volume spécifique v qui augmente durant l'expansion. Le résultat est la courbe de p (v), dont la Fig.2 donne des exemples. La courbe p (v) dépend de la composition initiale des ingrédients chimiques et de la densité initiale de l'explosif. Les calculs de P_d et T_d requièrent d'autres conditions en plus de celles des parties (III) (i) à (iv), soient les équations qui définissent une détonation; ces calculs additionnels fournissent une valeur théorique de la Vitesse de Détonation. En pratique, les calculs de thermochimie les plus utiles pour prédire la qualité d'un coup de tir au moyen de simulations de sautage sont ceux qui donnent la courbe p (v) à partir des conditions P_e et T_e à l'arrière de la Zone de Détonation.

(IV) UTILISATION DE LA COURBE P(V) POUR SIMULER UN SAUTAGE:

La courbe p (v) caractérise uniquement un explosif. La qualité des résultats d'un sautage, par contre, dépend et de la forme de p (v) et des propriétés élastiques du roc, ainsi que de la géométrie du sautage. Le but de calculer la thermochimie de chaque explosif est d'obtenir p (v) afin de l'utiliser dans les simulations de sautage. Celles-ci ont été expliquées lors de plusieurs communications (par exemples références 2, 3, 4, 5). Nous faisons maintenant un aperçu rapide de l'utilisation la plus courante de la courbe p (v) dans les simulations de coup de tir:

(a) Evaluation des Différents Explosifs:

Une simulation peut combiner p (v) de l'explosif à la réaction élastique du roc afin de simuler des paramètres d'évaluation de l'explosif tels les suivants:

W_{ef} = le travail utile fait par un explosif dans un roc donné, en Kbcc/gm. d'explosif.

B = la Brisance de l'explosif dans un roc donné, i.e. l'énergie transférée par l'explosif au roc sous forme d'onde de choc, aussi en Kbcc/gm. d'explosif.

Pour un explosif donné, W_{ef} et B varient d'un genre de roc à un autre; la Fig.8 présente des exemples.

(b) Simulation du Volume d'Excavation:
Une simulation plus poussée que celle de la partie (a) permet d'obtenir en trois dimensions et à partir de la courbe p (v) le volume maximum auquel on peut s'attendre lors du sautage d'un sautage d'un explosif donné dans un roc donné, selon un plan de sautage donné. La Fig.9 montre des exemples.

(c) Simulation du Déplacement du Roc Fragmenté:
Une simulation complète permet d'obtenir, en trois dimensions et à partir de la courbe p (v), la forme du tas de roc fragmenté et déplacé par l'explosion d'un explosif donné dans un roc donné, selon un plan de sautage donné. La Fig.10 montre des exemples.

CONCLUSION: La communication a expliquée les grandes lignes des calculs de la thermochimie d'un explosif au moyen desquels on obtient sa courbe p (v). Cette courbe caractérise un explosif. Le but de la connaitre est de l'utiliser pour faire des simulations de sautage dans différents rocs et selon différents plans de sautage. La combinaison du p (v) de l'explosif avec les propriétés élastiques du roc et la géométrie du sautage permet de prédire la qualité attendue des résultats du coup de tir, tel le volume d'excavation, la fragmentation et le déplacement du roc. Ceci permet d'optimiser sur ordinateur la qualité du sautage en relation aux coûts de celui-ci. Ce

genre d'optimisation n'est pas possible sans la connaissance de la courbe p (v) tel qu'on l'obtient au moyen de calculs de la thermochimie de l'explosif. Ainsi la courbe p (v), plus que la composition chimique de l'explosif, caractérise celui-ci du point de vue performance lors d'un sautage dans un roc donné.

REFERENCES:

(1) M.A. Cook, "The Science of High Explosives", Reinhold Publishing Corp., New York, 1958.

(2) R.F. Favreau, "Generation of Strain Waves in Rock by an Explosion in a Spherical Cavity", J. of Geophysical Research, 74, 4267, 1969.

(3) R.F. Favreau, "Blasting Simulations - Present and Future", Annual Meeting of the CIM, Ottawa, avril 1984.

(4) D. Tellier, "La Simulation sur Ordinateur Optimise les Sautages", Génie Construction, février 1981.

(5) Favreau, Labine, Wilson, Caufield, "Modified Vertical Retreat Mining Method at Inco's Stobie Mine", Annual Meeting of the CIM, Ottawa, avril 1984.

FIG 1: DETONATION & EXPLOSION

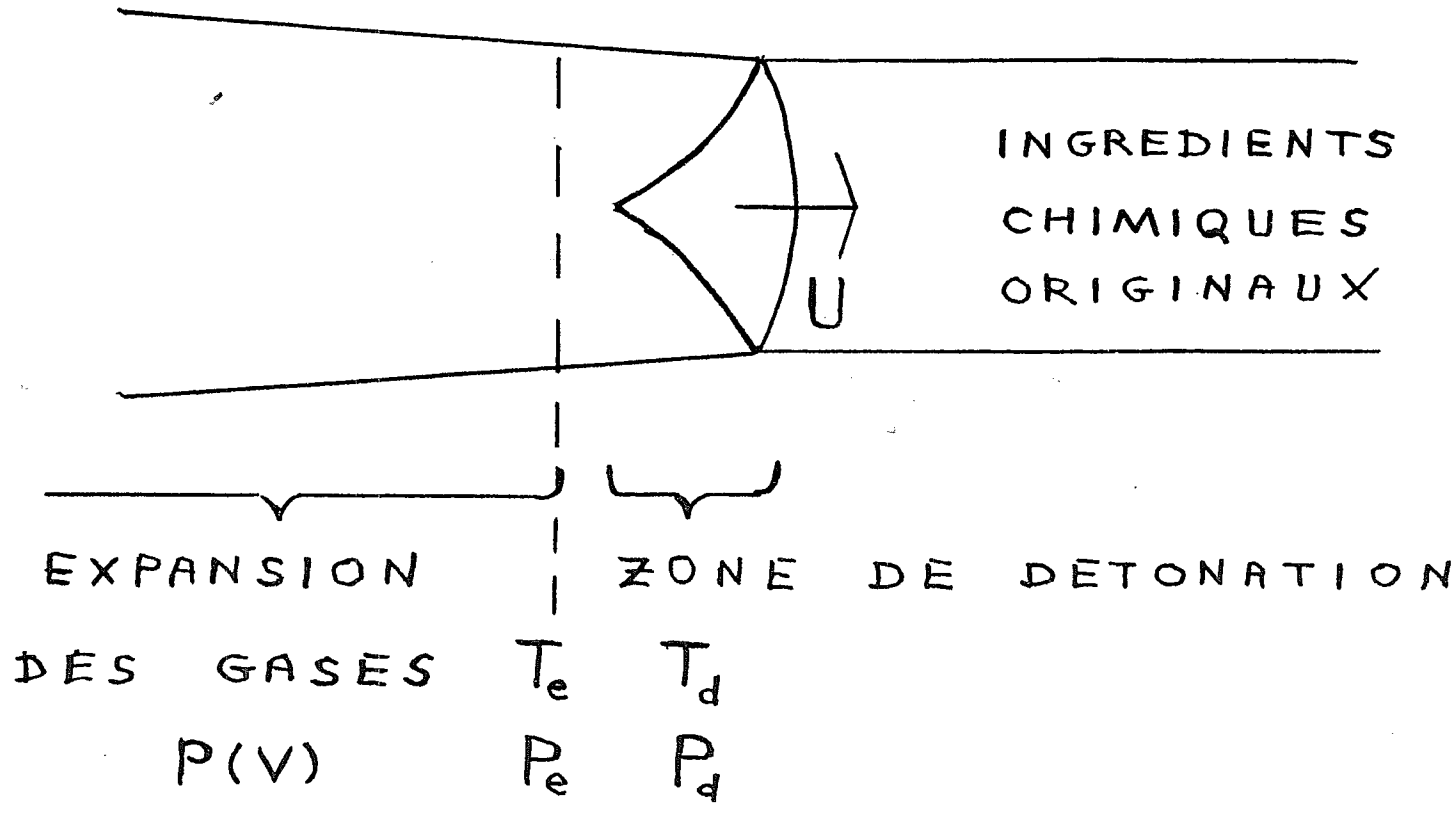


FIG. 2: COURBES P(V)

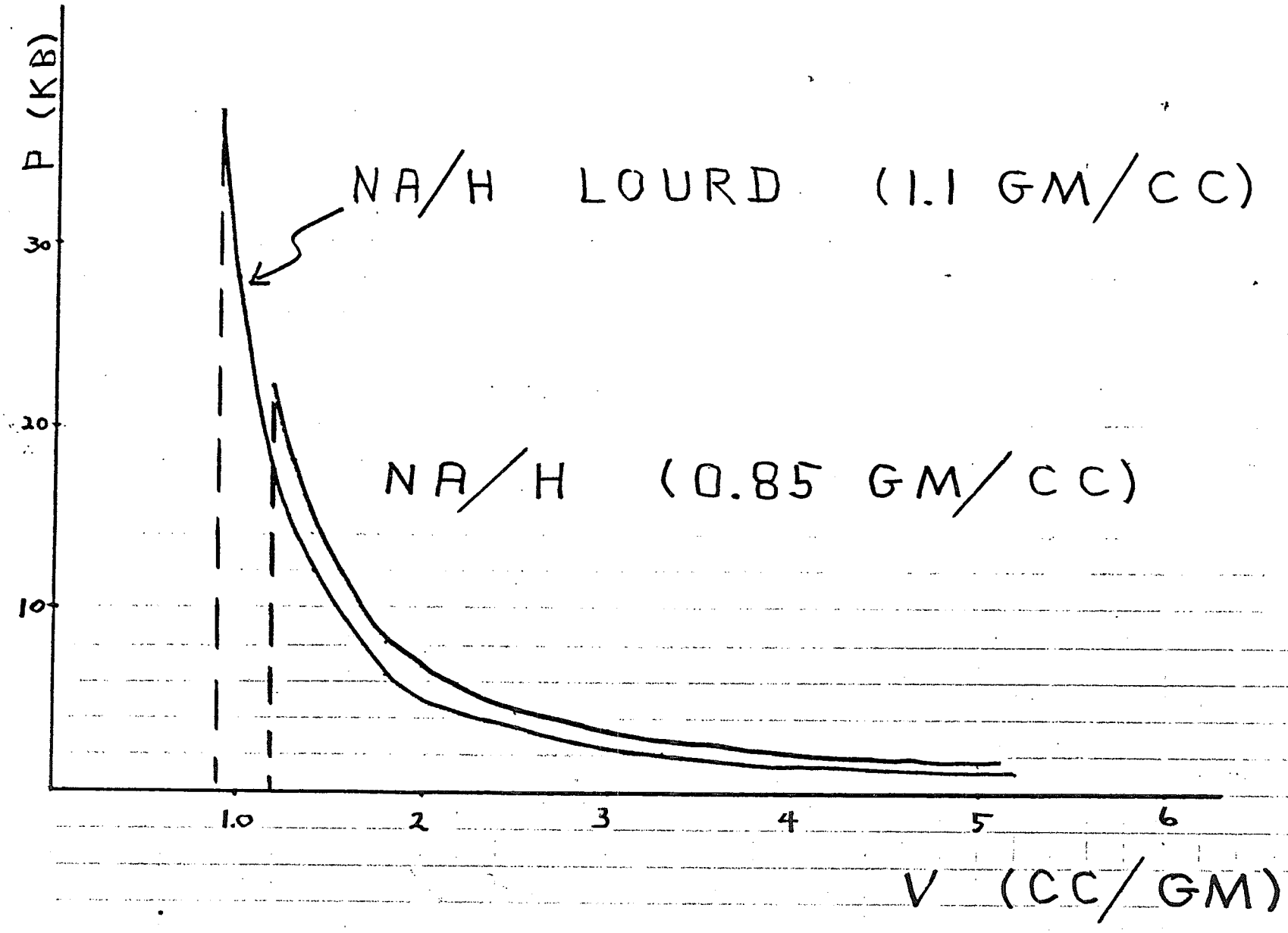


FIG. 3: EXEMPLES DE PROGRAMMES DE THERMOCHIMIE

TIGER

HT - 65

COOK

THERMO

Voir Référence (1)

FIG. 4: EXEMPLES DE REACTIONS CHIMIQUES

$$2 \quad H_2O \longrightarrow O_2 + 2 \quad H_2$$

$$C + O_2 \longrightarrow C \; O_2$$

FIG. 5: EXEMPLE D'EQUILIBRE CHIMIQUE

$$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$$

SELON $K_5(T) = \dfrac{(CO)\ (H_2O)}{(CO_2)\ (H_2)}$

OU	$K_5 =$	0.603	A T =	1000 °K
		1.175		1200
		1.892		1400
		2.704		1600
		3.570		1800
		4.458		2000
		5.348		2200
		6.223		2400
		7.074		2600
		7.896		2800
		8.685		3000

FIG. 6: CONSERVATION D'ENERGIE

$$Q = W + C$$

OU

Q = ENERGIE CHIMIQUE

W = TRAVAIL = $\int p\,(v)\,d\,v$

C = CHALEUR = $\overline{c}\;T$

p = PRESSION

v = VOLUME SPECIFIQUE

$\overline{c}$ = CHALEUR "

T = TEMPERATURE

FIG. 7: EQUATION D'ETAT

$$p\,(v - \alpha) = n\,R\,T$$

OU

p = PRESSION

v = VOLUME SPECIFIQUE

α = COVOLUME

n = NOMBRE DE MOLES DE GAS

R = CONSTANTE DES GASES

T = TEMPERATURE

FIG. 8: EVALUATION DES EXPLOSIFS DANS DIFFERENTS ROCS

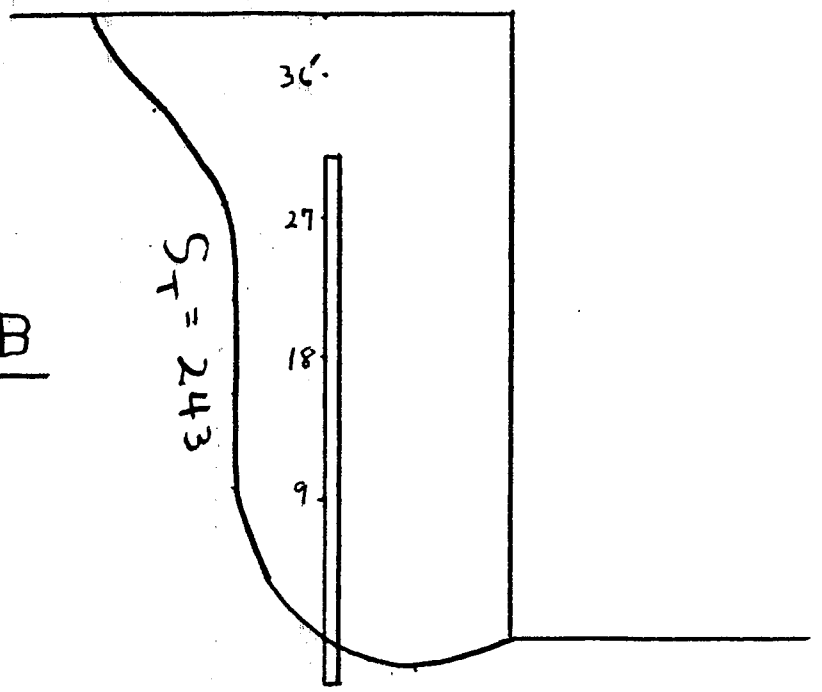
EXPLOSIF	W_{ef} (1)		BRISANCE (1)	
	Y = 200	Y = 500	Y = 200	Y = 500 Kb
NA/H	21.6	21.6	4.23	2.27
NA/H LOURD	21.1	20.6	6.40	3.80
NA/H/AL 5%	24.7	24.6	4.45	2 39

(1) EN KILOBAR - CC/GM D'EXPLOSIF

FIG. 9 : SIMULATON DE VOLUME D'EXCAVATION

(A) NA/H

Y = 200 KB



(B) NA/H LOURD

Y = 200

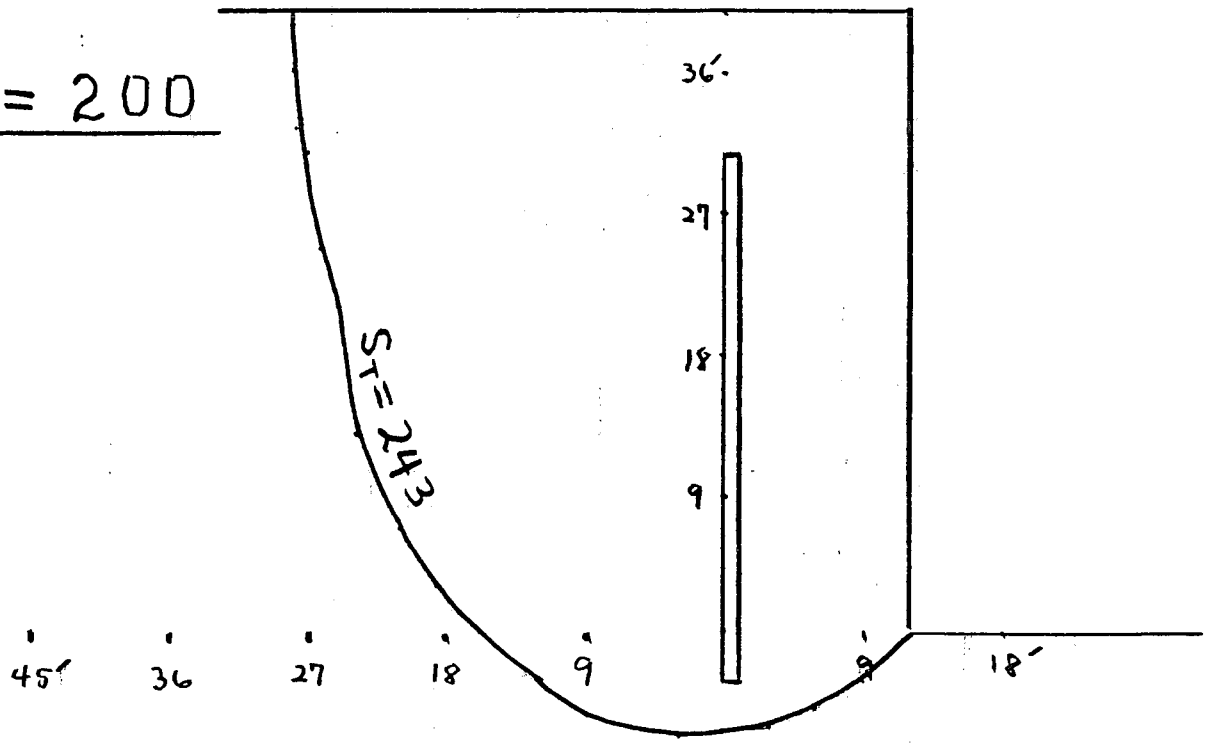
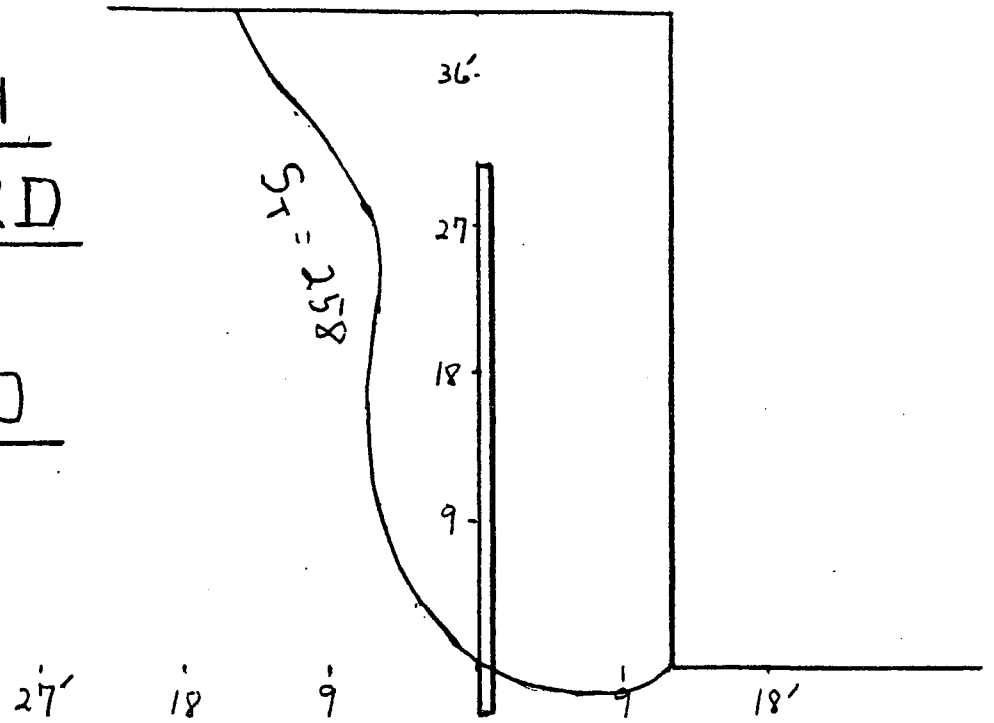


FIG. 9 (SUITE)

(C) NA/H

LOURD

Y = 500



(D) NA/H

Y = 500

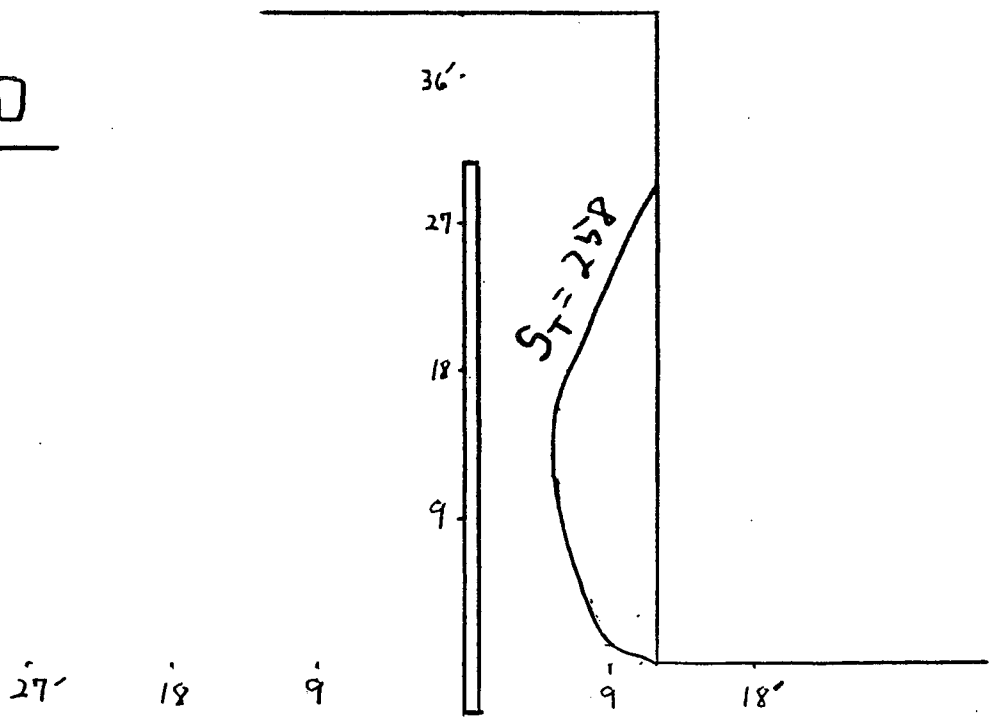


FIG. 10(A): PROJECTION SIMULEE DU ROC — NA/H

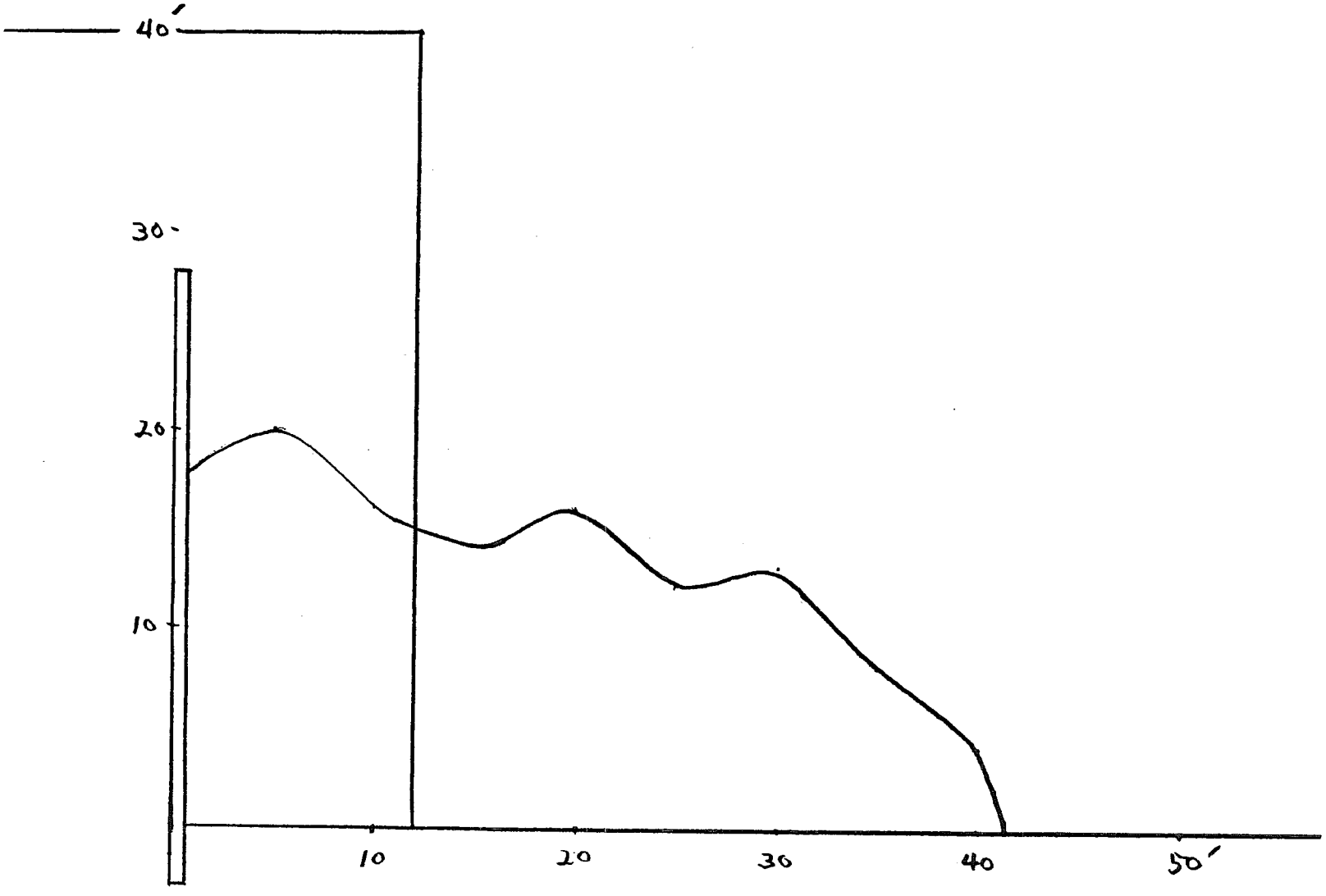
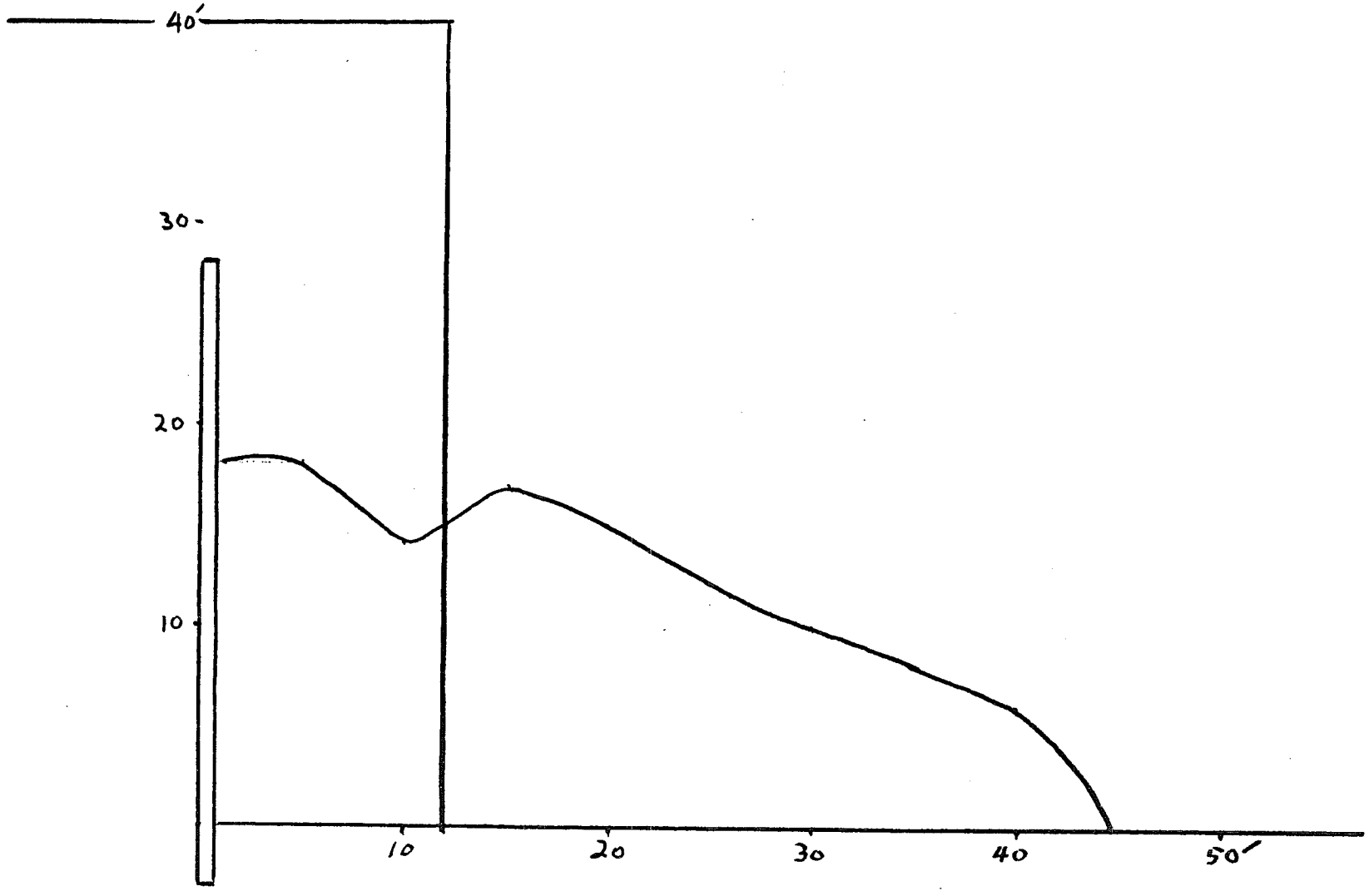



FIG. 10(B): PROJECTION SIMULEE DU ROC — NA/H LOURD