



EUDetCode - Mot förbättrade prestandamodeller för sprängämnen och krut

MAGNUS BERGH OCH RASMUS WEDBERG

Magnus Bergh och Rasmus Wedberg

EUDetCode - Mot förbättrade prestandamodeller för sprängämnen och krut

Titel	EUDetCode - Mot förbättrade prestandamodeller för sprängämnen och krut
Title	EUDetCode – Toward Enhanced Performance Models for Explosives and Propellants
Rapportnr/Report no	FOI-R--5254--SE
Månad/Month	januari
Utgivningsår/Year	2022
Antal sidor/Pages	25
ISSN	1650-1942
Uppdragsgivare/Client	Försvarsmakten
Forskningsområde	Vapen, Skydd och säkerhet
FoT-område	Vapen och skydd
Projektnr/Project no	E60936
Godkänd av/Approved by	Henric Östmark
Ansvarig avdelning	Vapen, skydd och säkerhet

Detta verk är skyddat enligt lagen (1960:729) om upphovsrätt till litterära och konstnärliga verk, vilket bl.a. innebär att citering är tillåten i enlighet med vad som anges i 22 § i nämnd lag. För att använda verket på ett sätt som inte medges direkt av svensk lag krävs särskild överenskommelse.

This work is protected by the Swedish Act on Copyright in Literary and Artistic Works (1960:729). Citation is permitted in accordance with article 22 in said act. Any form of use that goes beyond what is permitted by Swedish copyright law, requires the written permission of FOI.

Sammanfattning

Denna rapport redovisar ett förberedande arbete med målet att beskriva motivet samt peka på några grundläggande vetenskapliga utmaningar för en ny europeisk termokemisk kod. Det inledande avsnittet syftar till att förklara varför denna typ av beräkningsprogram är en viktig byggsten för en forskningsorganisation som studerar vapenverkan, framdrivning och skyddsteknik. Därefter presenteras en inledande studie av några etablerade tillståndsekvationer samt exempel på hur mer detaljerade fysikaliska modeller kan nyttjas för att förutsäga tillståndsdata i täta heta gaser. Avslutningsvis demonstreras vilken betydelse kondenserade tillstånd i spränggaserna (t.ex. grafit, diamant och aluminium) kan ha för det termodynamiska tillståndet.

Nyckelord: Termokemisk kod, detonationskod, tillståndsekvation, molekylodynamik, sprängämnen, krut, Termokemi, detonation, explosivämne.

Summary

This report describes the background for, and highlights a few scientific challenges related to, the development of a new European thermochemical code. In the introduction, we describe why this type a computational resource is a key component in applied research with focus on weapons effects, propulsion and protection technology. In the next section, a few well-established equations of state are discussed and compared followed by an example of how molecular-based models may be used to predict thermodynamic states in hot dense fluids. Finally, we demonstrate and discuss the importance of including specific equations of state for condensed phases in the reaction products, specifically carbon in the form of graphite and diamond as well as aluminium.

Keywords: thermochemical code, detonation code, equation of state, molecular dynamics, explosives, propellants

Innehållsförteckning

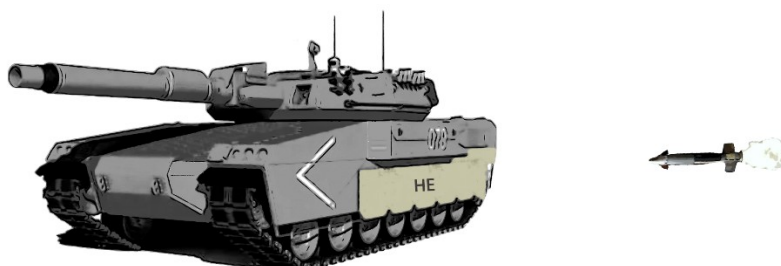
1	Inledning	7
1.1	Nya system, nya modeller	7
1.2	Exempel: Prestandaberäkningar för riktad sprängverkan	8
1.3	EUDetCode	9
2	Tillståndsekvationer för täta fluider	11
3	Tillståndsekvationer för kondenserade produkter	17
4	Sammanfattning	24
5	Referenser.....	25

1 Inledning

Denna rapport redovisar ett förberedande arbete med målet att beskriva motiv och några grundläggande vetenskapliga utmaningar för en modern termokemisk beräkningskod. Det inledande avsnittet syftar till att förklara varför denna typ av beräkningsprogram är en viktig byggsten för en forskningsorganisation som studerar vapenverkan, framdrivning och skyddsteknik. Vi inkluderar också en sammanfattning av det europeiska samarbetsprojekt (genom *European Defence Agency*) som syftar till att utveckla en ny gemensam termokemisk beräkningskod för forskning och utveckling på försvarsområdet. I andra avsnittet presenteras en inledande studie av några etablerade tillståndsekvationer samt exempel på hur detaljerade fysikaliska modeller kan nyttjas för att förutsäga tillståndsdata i täta heta gaser. Det tredje avsnittet visar vilken betydelse kondenserade tillstånd (t.ex. grafit, diamant och aluminium) i spränggaserna kan ha för det termodynamiska tillståndet.

1.1 Nya system, nya modeller

Växelverkan mellan dagens vapen- och skyddssystem ökar i komplexitet. Sensorer och algoritmer för autonoma eller semi-autonoma system tillför en ny dimension som kan påverka hela kedjan från strategi och design av plattformar till verkansformer och utformning av stridsdelar och skyddskomponenter. Vidare har energetiska material, i form av sprängämnen och krut, ofta en avgörande roll för utfallet i denna växelverkan. Sprängämnen används idag inte bara i vapen, utan återfinns inte sällan i både aktiva och reaktiva skyddssystem och tilläggsskydd på markplattformar.



Figur 1. Exempel på scenario där prestandan för en rad olika energetiska material är avgörande för utfallet.

Figur 1 illustrerar hur ett förlopp som leder till växelverkan mellan vapen och skyddssystem kan se ut på markarenan. Den inkommande pansarvärnsrobotens räckvidd och hastighet bestäms till stor del av drivdelens krutprestanda. Stridsvagnen kan vara utrustad med aktivt skyddssystem av *hardkill*-typ med motverkansdel som drivs av sprängämne, typiskt via luftstötstång eller splitter. Robotens stridsdel innehåller en eller flera RSV-laddningar där strålens längd och hastighet, och därmed penetrationsförmåga, bland annat begränsas av sprängämnets prestanda. Om RSV-strålen når plattformens reaktiva tilläggsskydd kommer panelerna i det reaktiva skyddet att accelereras av ett sprängämne med egenskaper anpassade för att optimera skyddsförmågan. Om även stridsvagnens grundskydd perforeras kommer fragment från reststrålen och sekundärsplitter med hög hastighet och temperatur att spridas i vagnen. Detta behöver dock inte leda till utslagning. Om fragment träffar spräng- eller drivämnen i medhavd ammunition ökar emellertid risken för fullständig utslagning drastiskt. Om stridsvagnen avfyrar pilprojektil kommer kanonkrutets prestanda vara en viktig parameter för räckvidd och penetrationsförmåga. Exempelen ovan är tänkta att belysa vikten av att kunna förutsäga energetiska materials prestanda i olika system.

Olika typer av energetiska system nyttjar olika delar av den energi som frigörs från det energetiska materialet. Ett RSV-vapen är typiskt beroende av den energi som frigörs under de första mikrosekunderna efter detonation i ett sprängämne medan granater och vissa aktiva och reaktiva skydd nyttjar en större del av den deponerade energin. I system med

metalliserade sprängämnen, exempelvis undervattensvapen, nyttjas väsentligen hela den frigjorda energin. En relevant prestandamodell måste således ge en god beskrivning av när energin frigörs i systemet och hur trycket varierar under den expansion av spränggaserna som följer efter en detonation. Under utskjutning är trycket som byggs upp under krutförbränningen lägre än vid en detonation, men även här är prestanda beroende av krutgasernas arbetsförmåga.

Analyser av växelverkans- och framdrivningsförlopp görs typiskt i flera steg. På plattformsnivå nyttjas någon typ av värderingsverktyg. För att t.ex. modellera ett enskilt växelverkansförlopp, som kan generera underlag till värdering, krävs dock en fenomenbaserad beräkningsmodell, vanligen s.k. hydrokod eller strömningsmekanisk kod. En hydrokod i sin tur nyttjar vanligen en modell med parametrar unika för varje energetiskt material. Denna delmodell, ofta benämnd som *termokemisk beräkningskod* eller *detonationskod*, är en central komponent i växelverkansanalys då den beskriver vilken respons som erhålls efter initiering.

1.2 Exempel: Prestandaberäkningar för riktad sprängverkan

I syfte att demonstrera hur en termokemisk kod kan användas, beräknar vi prestandan för 3 olika sprängämnen med stigande brisans: Comp-B, LX-14 och CL-20. Beräkningarna utförs i det termokemiska programmet Cheetah 2.0[1] som kan förväntas ge en rimlig noggrannhet för nära ideala sprängämnen utan speciella tillsatser som metallpartiklar eller mer ovanliga ämnen. Allt som behöver anges som ingångsdata är ingående ämnen samt densitet. Programmet innehåller en databas över kemisk sammansättning och bildningsvärme för reaktanter och produkter, samt parametrar för aktuella tillståndsekvationer som styr förhållandet mellan tryck, volym och temperatur.

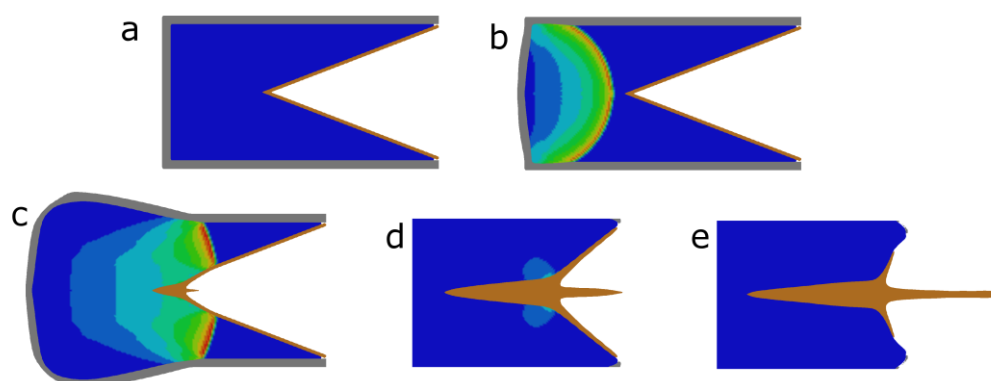
Tabell 1. Beräknade prestandaparametrar för 3 olika sprängämnen.

sprängämne	densitet (g/cm ³)	D (m/s)	P _{CJ} (GPa)
Comp-B	1,712	7890	0.265
LX-14	1,835	8800	0,370
CL-20	1,950	9520	0,425

Tabell 1 sammanfattar densitet (ingångsdata), detonationshastighet D (resultat) samt detonationstryck P_{CJ} (resultat) för de 3 olika sprängämnena. Här kan noteras att de beräknade detonationshastigheterna för de två första sprängämnena har ett fel på under 0.5% (jämfört med experimentella värden från LLNL Explosives Handbook) medan värdet för CL-20 avviker med runt 7% från experiment. Detta skulle kunna bero på att CL-20 inte inkluderats i parameterkalibreringarna som nyttjas i Cheetah 2.0.

För att kunna utföra beräkningar av vapenprestanda i en hydrokod krävs även parametrar till den tillståndsekvation som beskriver hur spränggasernas tryck och temperatur varierar under volymexpansion. Dessa utgörs i detta fall av ytterligare 6 parametrar som det termokemiska programmet beräknar genom anpassning till olika expansionstillstånd efter detonationen.

De prestandaparametrar som beräknats kan nu nyttjas i hydrokod för att simulera till exempel strålbildningsprocessen i en RSV-laddning. I övre vänstra delen av Figur 2 visas en försöksladdning med aluminiumhölje (grått), sprängämne (blått med tryck enligt färggradering) samt RSV-inlägg av koppar (orange). Den andra bilden (b) visar trycket i sprängämnet 5 μ s efter initiering i en punkt längst bak på centrumaxeln. Detonationsfronten har då nästan nått fram till inläggets topp. I tredje bilden (c) har inlägget börjat pressas ihop mot centrumaxeln och i fjärde och femte bilden (d och e) visas hur strålen kastas ut med hög hastighet åt höger.



Figur 2. Hydrokodsberäkning av strålbildningsförloppet i en RSV-laddning. Färgskalan i sprängämnet visar trycket från 0 (blått) till detonationstryck (ca. 30 GPa).

Den prestanda som kan erhållas från en RSV-laddning är beroende av prestandan i sprängämnet. För att demonstrera detta utför vi simuleringar av strålbildningen från laddningen illustrerad i Figur 2 med de 3 olika sprängämnena från Tabell 1. Resultatet visas i Figur 3. Comp-B, som generellt inte används i RSV-tillämpningar, ger en spetshastighet på mellan 6000 och 7000 m/s, vilket kan betraktas som relativt lågt. LX-14 resulterar i en spetshastighet strax över 8000 m/s och det synnerligen högpresterande sprängämnet CL-20 strax över 9000 m/s vilket är högt, i synnerhet för en centruminitierad laddning som denna. Hög hastighet är viktigt för strålens penetrationsförmåga och därmed vapnets prestanda.



Figur 3. Simulerad strålbildning med tre olika sprängämnen med stigande prestanda. Bilderna visar strålens profil 90 μ s efter initiering och färgskalan visar hastigheten (cm/ μ s).

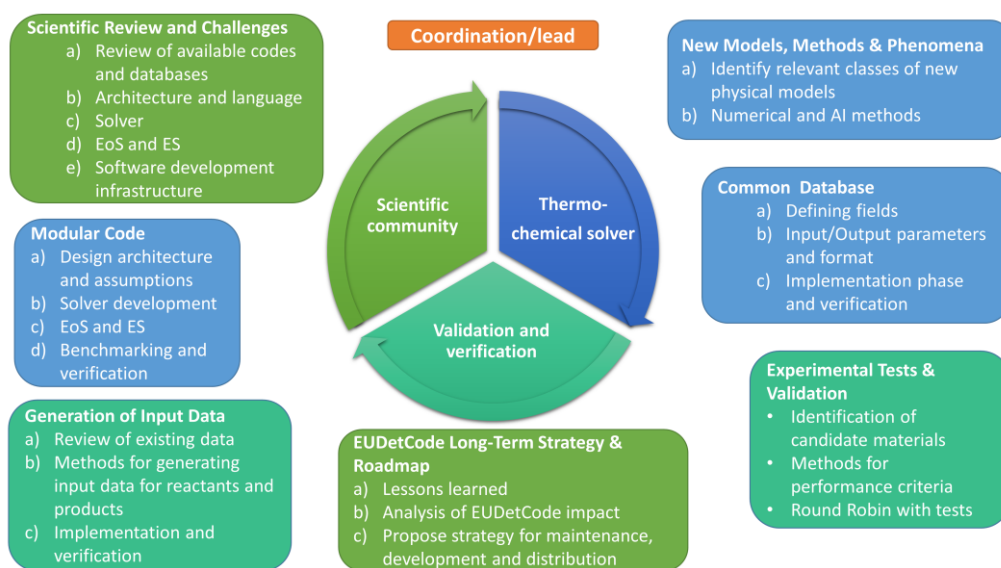
Det bör tilläggas att en laddning med en optimerad geometri för ett visst sprängämne inte nödvändigtvis är optimal för ett annat sprängämne. Den jämförelse som presenteras här är således inte relevant för verkliga system utan visar endast att en god kännedom om ett sprängämnes prestanda är av stor vikt för tillämpningen riktad sprängverkan. Sprängämnet utgör ”motorn” i en rad energetiska system båda på vapen och skyddssidan och en modern termokemisk beräkningskod är en central komponent i analys och design av sådana system.

1.3 EUDetCode

FOI, i likhet med ett flertal andra aktörer inom försvarssfären världen över, har nyttjat ett amerikanskt beräkningsprogram benämnt *Cheetah 2.0* för prestandaberäkningar avseende energetiska material. Dock har inga uppdateringar delgivits Sverige sedan slutet av 90-talet och version 2.0 kan idag betraktas som föråldrad. Senare versioner inkluderar bland annat nya tillståndsekvationer med tydligare fysikalisk förankring, förbättrade kalibreringar och högre noggrannhet för icke-ideala (t.ex. plastbaserade) sprängämnen samt möjligheten att koppla ihop den termokemiska modellen med hydrokod för att följa tidsberoende förlopp såsom reaktionskinetik i spränggaserna och efterförbränning av metallpartiklar.

Ett initiativ till kodutveckling har därför inletts som ett samarbete under *European Defence Agency (EDA)* benämnt *EUDetCode*. Visionen är att ett välorganiserat samarbete ska samla fragmenterad kunskap och resurser och därmed möjliggöra utvecklandet av en modern termokemisk kod med en omfattande databas för inparametrar och tillståndsdatabas. En sådan förmåga skulle utgöra en viktig investering för framtiden och stärka forsknings- och teknikutvecklingen på försvarsområdet i både Sverige och Europa.

Efter en relativt lång beredningsprocess där FOI haft en ledande roll, kan nu projektstart ske under våren 2022. Dock har ett visst förberedande arbete redan påbörjats då uppgiften är komplicerad och inbegriper vetenskaplig utvärdering, matematiska modeller, programmering, kalibrering av parametrar samt försök. Inom projektet Energetiska system har vi under 2021 påbörjat insamlandet av relevant litteratur samt studier av en termokemisk undervisningskod. FOI kommer att leda ett arbetspaket med rubriken *Nya modeller* och fokusera särskilt på tillståndsekvationer. Dessa beskriver tryck som funktion av volym och temperatur för olika gasblandningar och är av central betydelse för en termokemisk kods förmåga att förutsäga prestanda. Vidare behövs särskilda tillståndsekvationer för att kunna inkludera metallpartiklars förbränning under expansionsfasen. Detta är ett utmanande arbete som kräver metodutveckling både på modell- och experimentsidan och därmed ett lämpligt område för samverkan med andra europeiska aktörer. Figur 4 visar en schematisk bild över de sju arbetspaketen i EDA-projektet EUDetCode. FOI kommer att leda *New models, Methods and Phenomena*, och delta i ett flertal andra, bland annat *Modular Code*, där programmeringen kommer att utföras. Projektet löper över 5 år.



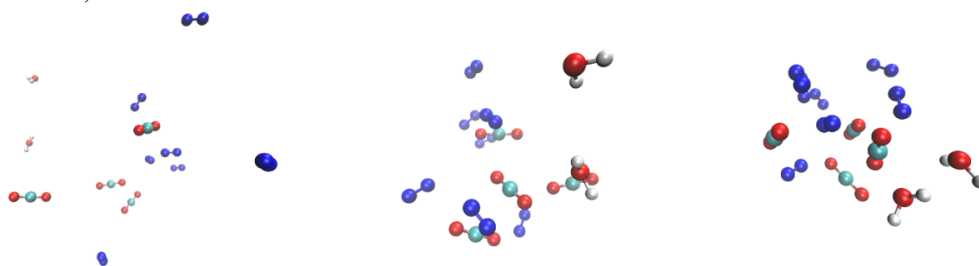
Figur 4. Schematisk bild av arbetspaketen i EDA-projektet EUDetCode.

2 Tillståndsekvationer för täta fluider

Med tillståndsekvationer menas vanligen en eller en uppsättning matematiska relationer som beskriver hur trycket i någon form av materia beror av volym och temperatur (eller energi). Den vanligaste formen av tillståndsekvation är den ideala gaslagen,

$$P = \frac{nRT}{V},$$

där P är trycket, V är volymen, T är temperaturen, n mängden gas i mol och R är den allmänna gaskonstanten. Vi kan notera från formeln ovan att om volymen minskas vid konstant temperatur (isoterm kompression) kommer trycket att öka. Om kompressionen inte är isoterm utan följer ett förlopp där temperaturen ökar, såsom i stötvågskompression, kommer trycket att öka mer för samma volymförändring än i det isoterma fallet. Man behöver således känna till vilken typ av förlopp det rör sig om för att kunna beräkna tryckförändringen. Ideala gaslagen förutsätter vidare att den sammanlagda volymen hos gasmolekylerna är avsevärt mindre än gasens volym samt att eventuella krafter som verkar mellan molekylerna är försumbara. Detta är typiskt uppfyllt för låga tryck och upp till några hundra atmosfärers tryck (tiotals MPa). Figur 5 visar en gasblandning av kväve, koldioxid, och vatten vid tre olika tätheter.

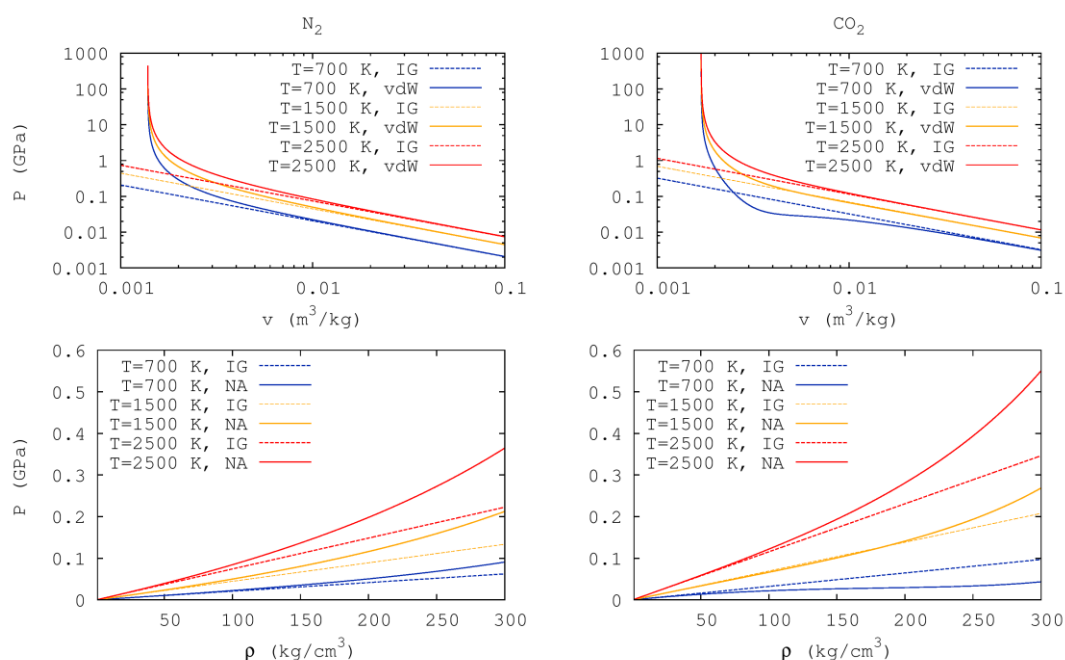


Figur 5. En gasblandning av kväve (blå), koldioxid (turkos/röd) och vatten (röd/vit) vid tre olika tätheter: 75 kg/m³ (vänster), 500 kg/m³ (mitten) och 1320 kg/m³ (höger). De molekylära strukturerna är genererade med programmet Packmol [2] och visualiserade med VMD [3].

Fallet till vänster motsvarar en gasblandning som komprimerats med en faktor 75 till densiteten 75 kg/m³. Vid temperaturen 1500 K (relevant vid förbränning av energetiska material) är då trycket ca. 40 MPa. Som vi ska se längre fram så utgör detta termodynamiska tillstånd en ungefärlig gräns där den ideala gaslagen inte längre gäller. För att ge en god beskrivning för tätare tillstånd, som illustreras i mitten och till höger i Figur 5, krävs andra tillståndsekvationer som på något sätt tar hänsyn till den elektrostatiske växelverkan som sker mellan molekylerna. En av de mer välkända tillståndsekvationerna för täta tillstånd är van der Waals tillståndsekvation som kan skrivas på formen

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2}$$

där v är den specifika volymen (volym per viktenhet). Konstanterna a och b motsvarar attraktion och repulsion mellan molekyler.



Figur 6. Tryck vid tre konstanta temperaturer som funktion av specifik volym (övre) och densitet (undre) för kvävgas (vänster) och koldioxid (höger).

Figur 6 visar en jämförelse av tryck som funktion av specifik volym (övre) och densitet (undre) för kvävgas (vänster) och koldioxid (höger). För varje temperatur, 700 K, 1500 K och 2500 K, jämförs det tryck som erhålls ifrån ideala gaslagen samt van der Waals (övre bilderna) och *Noble-Abels* (undre bilderna) tillståndsekvation. I de övre graferna används en logaritmisk skala som visar tryckberoendet över ett stort spann medan de undre graferna visar trycket på en linjär skala upp till densiteten 300 kg/m³. De övre graferna visar hur trycket ökar när volymen minskar, samt hur van der Waals tillståndsekvation avviker ifrån den ideala gaslagen för höga tryck (20-40 MPa). Detta beror på parametern b som kan sägas motsvara den volym som molekylerna upptar (kovolym). När den inneslutna gasens volym närmar sig denna molekylära volym kommer nämnaren $v-b$ i tillståndsekvationen att närma sig noll och trycket ökar då kraftigt för att gå mot oändligheten vid $v=b$. Detta är emellertid inte fysikaliskt korrekt då det är känt att materia kan komprimeras betydligt mer än så. Vi kan därför förvänta oss att van der Waals tillståndsekvation ger rimliga tryck upp till området kring 1 GPa (10 kbar) där van der Waals ekvation förutsäger att trycket skall stiga snabbt. Grovt kan vi säga att tillämpningar inom innerballistik rör sig upp till detta område, varför van der Waals ekvation är tillräcklig. Ofta används en förenklad version av van der Waals ekvation benämnd *Noble-Abels* tillståndsekvation, där termen a har försumrats. För sprängämnen däremot krävs en tillståndsekvation för betydligt högre tryck – detonationstrycket för ett typiskt sprängämne är 20-30 GPa. För att kunna beskriva den dramatiska tryckökning som sker när ett sprängämne komprimeras och förbränns under detonation krävs en lämplig matematisk funktion som beskriver denna snabba ökning. Inte sällan används exponentialfunktioner. Den vanligaste tillståndsekvationen i termokemiska detonationskoder är Becker-Kistiakowsky-Wilson (BKW) [4]. Den kan uttryckas som

$$P = \frac{RT}{v_g} (1 + x e^{\beta x})$$

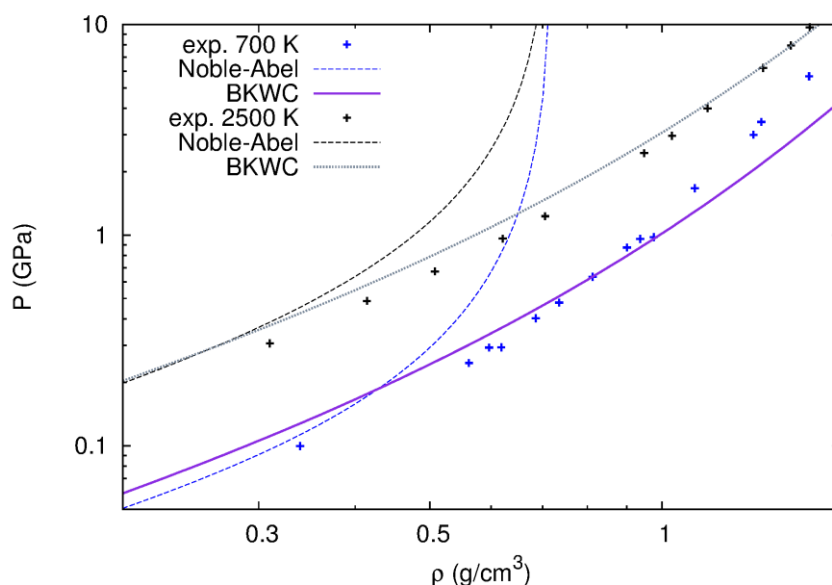
där

$$x = \frac{\kappa k}{v_g (T + \theta)^\alpha}$$

och

$$k = \sum_{i=1}^n x_i k_i.$$

Här är v_g molvolymen och β , α , κ samt θ konstanter som kalibreras mot experiment eller mer detaljerade beräkningar. Konstanten k motsvarar den totala molekylära volymen (kovolymen) och beräknas genom att summera produkten av molekylär volym och molfraktion för varje molekyllag i gasblandningen. Faktorn $(1 + \kappa e^{\beta x})$ ovan kan ses som en korrektion till den ideala gaslagen som beskriver det ytterligare bidrag som är försumbart upp till tryck i MPa-området men blir signifikant för höga tryck.



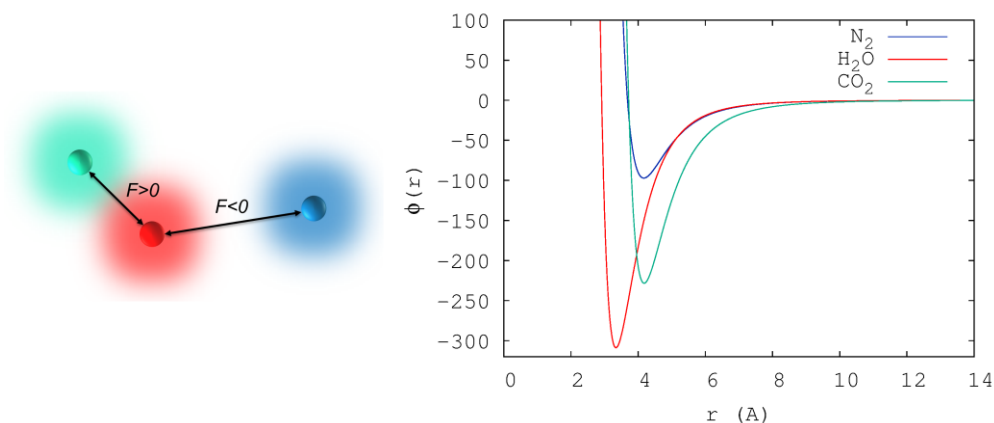
Figur 7. Tryck som funktion av densitet för kvävgas i högtrycksområdet givet av tillståndsekvationerna Noble-Abel och BKW jämfört med referensdata baserat på experimentellt uppmätt tryck [5]. Kurvorna motsvarar isotermer (temperaturen är konstant) vid 700 K och 2500 K.

Figur 7 visar en jämförelse mellan tillståndsekvationerna Noble-Abel¹, BKW samt experimentella referenstryck i densitetsområdet 0,3-1,2 g/cm³ (300-1200 kg/m³). Kurvorna visar att dessa modeller ligger nära varandra i tryck upp till en densitet av runt 0.4 g/cm³. Vid högre tryck avviker Noble-Abels modell på grund av singulariteten i tillståndsekvationen. BKW å andra sidan ger en rimlig beskrivning av trycket i hela detta område, med bäst överensstämmelse för hög temperatur och densitet. Dock kan här noteras att parametrarna för BKW i detta exempel (BKWC-biblioteket) i första hand är kalibrerade emot egenskaper för olika spränggasar som relaterar till detonation (CJ-tillståndet). En sådan kalibrering utgör en kompromiss och modellen, som i första hand är empirisk, kan förmodligen inte förväntas reproducera högtrycksegenskaper för alla enskilda relevanta gaser med hög noggrannhet.

För att med god noggrannhet kunna förutsäga prestanda för en bred klass av sprängämnen och krut har moderna termokemiska koder utvecklats i en riktning mot mer fysikaliskt baserade modeller. Som vi sett är en av svårigheterna att inkludera det bidrag som härrör ifrån elektrostatisk växelverkan mellan molekyler i en tät fluid. Ett naturligt sätt att göra detta är att beskriva denna växelverkan explicit, dvs. på något sätt inkludera matematiska samband för hur den kraft som verkar mellan molekyler varierar med avstånd och molekyllag.

¹ Van der Waals tillståndsekvation med parameter $a=0$, dvs. endast med det repulsiva bidraget. Detta är tillräckligt vid höga temperaturer såsom vid krutförbränning.

Figur 8 illustrerar principen för en potentialbaserad modell benämnd exp6 (*exponential-6*). Till vänster visas en förenklad (punktformig) modell av tre molekyler med omgivande kraftfält; CO₂ (turkos), H₂O (röd) samt N₂ (blå). CO₂ och H₂O befinner sig nära varandra och kraften mellan dem blir då repellerande medan avståndet mellan H₂O och N₂ är något längre, vilket resulterar i en attraherande kraft.



Figur 8. Vänster: Molekylär modell med krafter som verkar mellan CO₂ (turkos), H₂O (röd) och N₂ (blå). Höger: Elektrostatisk potential som funktion av avstånd mellan partiklarna i exp6-modellen.

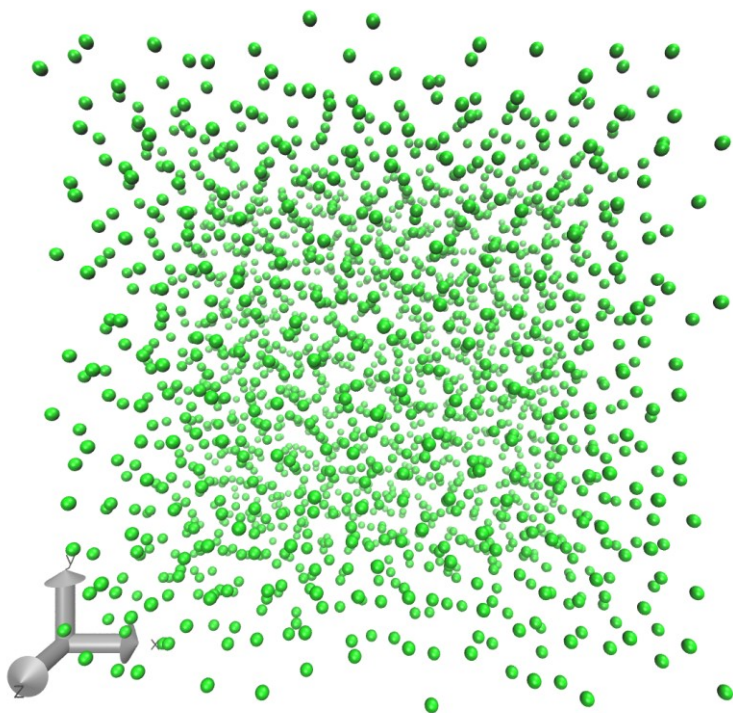
Till höger i Figur 8 visas hur den elektrostatiska potentialen mellan två molekyler av samma slag varierar med avståndet mellan dem. Tre parametrar, unika för varje molekyllag, bestämmer kurvans form. För växelverkan mellan två molekyler av olika slag används en kombination av potentialkurvorna. Om vi jämför den röda kurvan (H₂O) med den blå (N₂) ser vi att den attraherande kraften är större för H₂O. Detta återspeglas också i vattens höga kokpunkt – det krävs en högre hastighet hos molekyler (dvs. temperatur) för att molekylerna inte ska ”fastna” (kondensera) i potentialbrunnen. Här kan även noteras att gaser kondenserar generellt vid högre temperatur om trycket är förhöjt (jämfört med rumstemperatur och atmosfärstryck). Exempelvis utgör kondensering av vatten i spränggasar en utmaning för termokemiska modeller. Om kondensation sker i reaktionszonen bakom detonationsfronten kommer det att resultera i lägre detonationshastighet och detonationstryck. Om kondensation sker senare under expansionen av spränggaserna när tryck och temperatur sjunker kommer det att påverka sprängämnets arbetsförmåga.

En potentialbaserad modell kan användas i beräkningar direkt på mikroskopisk nivå genom att simulera växelverkan mellan ett stort antal molekyler. Beräkningsmetoder såsom *molekyldynamik* och *monte carlo* kan då nyttjas för att göra detaljerade undersökningar av en gaskompositionens fysikaliska och kemiska egenskaper. Detta är dock tidskrävande och för termokemiska koder krävs en tillståndsekvation av enklare typ, helst i analytisk form eller i tabellform. En tilltalande metod för detta är att genom teori från statistisk mekanik och termodynamik omformulera den potentialbaserade modellen till en relation mellan resulterande tryck, densitet och energi. Detta är dock en utmanande uppgift som kräver relativt avancerad matematik och noggrann verifikation mot experiment och atomära beräkningar.

Några inledande tester med molekyldynamik har utförts i syfte att undersöka och demonstrera möjligheterna med mikroskopiska beräkningar. Till att börja med implementerades exp6-potentialen² i molekyldynamikprogrammet LAMMPS [6] från Sandia. Så kallade NVT-simuleringar (konstant antal molekyler, densitet samt temperatur) utfördes sedan vid olika densitet och temperatur i fasrummet.

² Potentialen har implementerats som egendefinerad python-rutin. För att öka hastigheten har denna sedan tabulerats. För produktionssimuleringar bör full implementation i källkoden övervägas.

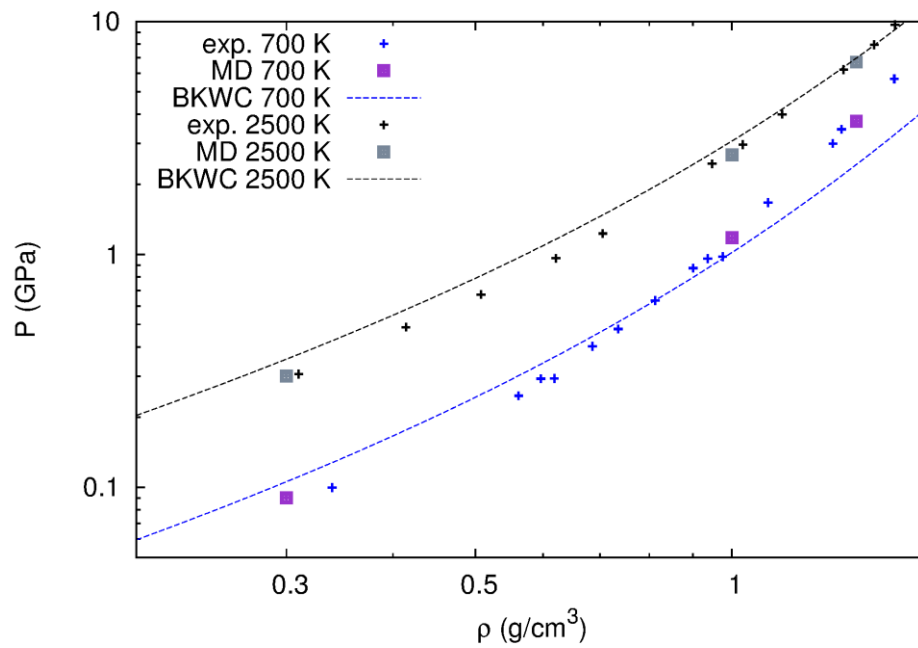
Figur 9 visar en bild från en molekylodynamiksimulering av 2000 kvävmolekyler med den implementerade exp6-potentialen. Partiklarna är placerade i en box med periodiska randvillkor. Begynnelsehastigheter slumpas ut från en hastighetsfördelning som motsvarar den angivna temperaturen och simuleringen fortgår sedan tills ett termodynamiskt jämviktstillstånd uppnås där trycket fluktuerar kring ett konstant värde. Tidssteget är satt till 2 fs (fs=femtosekund= 10^{-15}) och beräkningen kräver 1000-5000 tidssteg för att nå ett jämviktstillstånd (med avseende medeltryck) vilket typiskt tar någon minut på 4 snabba processorer.



Figur 9. Ögonblicksbild från molekylodynamiksimulering av 2000 punktformiga kvävmolekyler med exp6-potentialen. Den kraft som verkar mellan varje partikelpar erhålls ifrån den blå kurvan i Figur 8.

Figur 10 visar jämförelsen mellan BKW och referensdata från litteraturen som presenterades i Figur 7, men nu även med 6 punkter ifrån molekylodynamiksimuleringar (grå och lila kvadrater). Vi kan se att beräkningarna stämmer väl med referensdata vid både 700 K och 2500 K, vilket indikerar att implementationen är korrekt och delmodellerna och allmänna parametrar i molekylodynamikmodellen är rimliga³.

³ Exempel kan vara termostat för temperaturreglering, antal partiklar, tidsstegs samt *cut-off* för växelverkan.



Figur 10. Tryck som funktion av densitet beräknat med tillståndsekvationen BKW samt genom molekylodynamik med exp6-potentialen. Beräkningarna jämförs med referensdata ifrån litteraturen [5].

Parametrarna i exp6-modellen är kalibrerade mot liknande data och den goda överensstämmelsen är därför ingen överraskning. För att testa modellens begränsningar krävs tester mot flera olika ämnen, vid olika densiteter och temperaturer. Även stötvågsberäkningar med molekylodynamik kan vara lämpliga att utföra och jämföra mot försök med t.ex. lättgaskanon där höga stötvågstryck kan uppnås i en isolerad gascell [7].

3 Tillståndsekvationer för kondenserade produkter

I de produkter som bildas då explosivämnen reagerar ingår ofta inte bara gaser utan även kondenserade produkter. Detta avser ämnen som under vissa förhållanden återfinns i ett fast eller vätskeformigt aggregationstillstånd. Några exempel är kol, som förekommer i produkterna från i princip alla CHNO-sprängämnen med negativ syrebalans, metaller som aluminium och magnesium samt motsvarande metalloxider. De kondenserade faserna har andra termodynamiska egenskaper än motsvarande gasfas och behöver därför modelleras på ett annat sätt.

För att belysa vikten av att beskriva kondenserade faser beräknas detonationsegenskaperna för Comp-B, LX-14 och CL-20 på samma sätt som tidigare, med Cheetah 2.0 och produktbiblioteket BKWC, men möjligheten att bilda kondenserat kol utesluts. Resultaten jämförs i Tabell 2 med de tidigare beräkningarna från Tabell 1. Uteslutning av kondenserat kol från produkterna leder till att detonationshastigheten överskattas med 5-10 % och CJ-trycket överskattas med 3-9 %. De högre siffrorna avser Comp-B, som har den mest negativa syrebalansen av de tre sprängämnena och därför bildar mest kondenserat kol, medan de lägre siffrorna avser CL-20, som är mest syrebalanserat.

Tabell 2. Egenskaper för CJ-tillståndet för tre sprängämnen som beräknats med Cheetah 2.0 och produktbiblioteket BKWC.

ämne	densitet (g/cm ³)	D (m/s)	P _{CJ} (GPa)
Comp-B	1,712	7950	26,9
utan kondenserat kol		8720	29,2
LX-14	1,835	8800	34,4
utan kondenserat kol		9520	36,2
CL-20	1,950	9680	43,1
utan kondenserat kol		10120	44,3

Då de kondenserade faserna är separerade från den gasfas som beskrivits i avsnitt 2 ingår de inte i motsvarande tillståndsekvationer utan kräver egna. Typiskt behöver en tillståndsekvation för varje tänkbar kondenserad fas anges i ett produktbibliotek. Varje tillståndsekvation är dock relativt enkel då en kondenserad fas antas innehålla endast ett ämne.

En vanlig tillståndsekvation, som också är en av de som används i Cheetah 2.0, är Murnaghans tillståndsekvation [1]. Denna uttrycker den specifika volymen v som funktion av trycket P och temperaturen T enligt

$$v = v_0 \{ n \kappa P + \exp[-n \alpha (T - T_0)] \}^{-\frac{1}{n}}$$

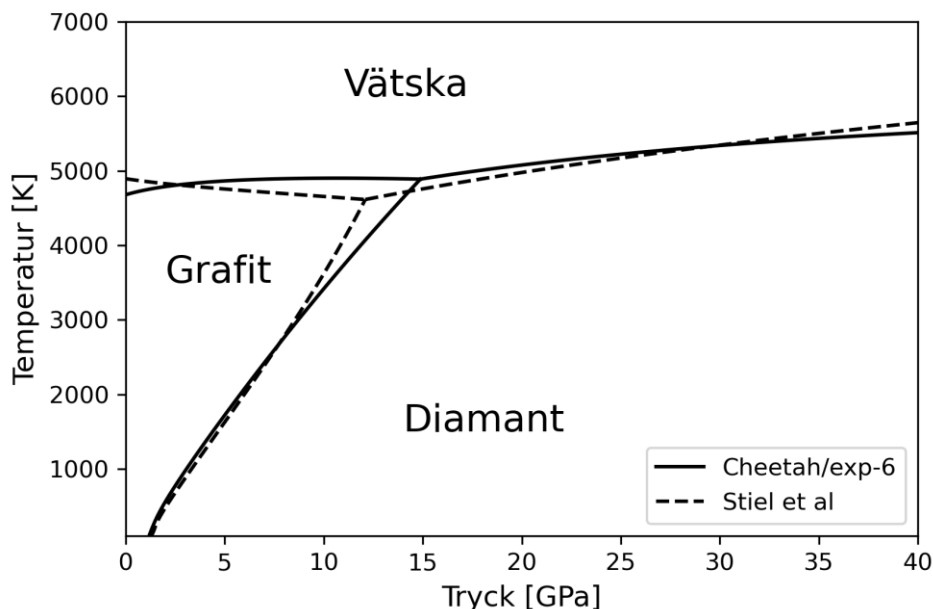
Ekvationen innehåller fyra materialkonstanter som behöver bestämmas från experiment eller atomära simuleringar. Dessa är den specifika volymen vid referenstillståndet 1 atm och 25 °C som betecknas v_0 , kompressibiliteten κ , koefficienten för volymsutvidgning α samt parametern n som karakteriserar hur snabbt kompressibiliteten minskar med ökande tryck. Parametern T_0 betecknar referenstemperaturen 25 °C. En del av de kondenserade produkter som ingår i Cheetah 2.0:s bibliotek är beskrivna av Murnaghans tillståndsekvation. Ekvationen är förhållandevis enkel, och parametrarna kan i princip härledas från materialets egenskaper vid låga tryck och temperaturer. En nackdel är dock att ekvationen är relativt oflexibel när det gäller att beskriva materialets beteende i hela spannet från låga tryck och temperaturer till de tillstånd som förekommer i detonationsförlopp. Detta innebär att de parametrar som bäst beskriver ämnets egenskaper

vid ett tillstånd skiljer sig från de parametrar som bäst beskriver egenskaperna vid ett annat tillstånd.

Då en reaktionsprodukt kan förekomma i två eller flera kondenserade faser är det viktigt att gränserna mellan dessa faser återges korrekt, så att rätt fas förutsägs i rätt del av tillståndsrummet. Som första exempel betraktas här kol som normalt förekommer i tre faser varav en är vätska och två är solida, nämligen grafit och diamant. Dessa tre faser är termodynamiskt stabila i olika delar av tillståndsrummet, vilket illustreras av Figur 11. Vid mycket höga temperaturer (> 5000 K) är kolet vätska. Vid lägre temperaturer har kolet vid höga tryck diamantstruktur och vid låga tryck grafitstruktur. Det kan noteras att övergången mellan grafit och diamant beror på både temperatur och tryck.

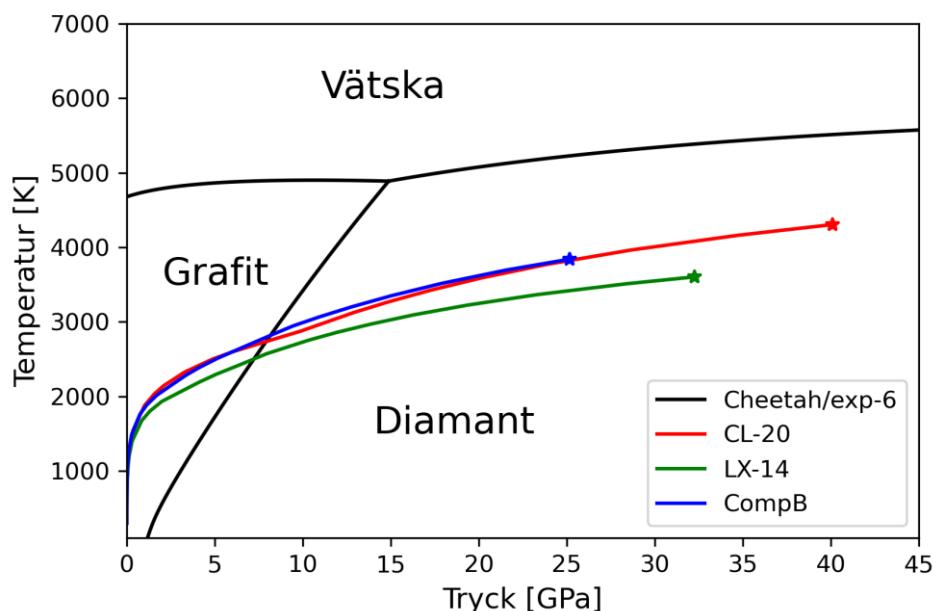
Beroende på vilka tillståndsekvationer som nyttjas för de olika faserna, samt hur dessa är kalibrerade, kommer modellen att förutsäga olika egenskaper hos faserna och olika gränser mellan dem. Som exempel jämförs i Figur 11 fasdiagrammet för kol som beräknats med två olika modeller, där den ena är tagen från produktbiblioteket exp6 i Cheetah 2.0 [1] och den andra är tagen från ett arbete av Stiel m.fl. från 2014 [8]. I Stiels arbete används mer noggranna tillståndsekvationer för att representera de olika faserna, vilka bland annat visades ge en bättre uppskattning av trippelpunkten, dvs. den punkt där de tre fasgränserna möts.

Tillståndsekvationernas parametrar för de olika faserna kommer både från experiment och atomära simuleringar. För grafit och diamant finns experimentella data för höga tryck att tillgå. Dessa behöver dock extrapoleras till höga temperaturer, vilket Stiel m.fl. gjorde, och validerade mot atomära simuleringar. För flytande kol, som endast förekommer vid höga temperaturer, finns betydande luckor i det experimentella underlaget, varför Stiel m.fl. mestadels använde data från atomära simuleringar.



Figur 11. Fasdiagram över kolets tre vanliga faser, beräknat med tillståndsekvationer från produktbiblioteket exp6 i Cheetah 2.0 [1] och från Stiel m.fl. [8].

För att illustrera vad dessa fasgränser kan ha för praktisk betydelse visar Figur 12 samma fasdiagram där även den isentropa expansionen från Chapman-Jouguet-tillståndet (CJ-tillståndet) visas för CL-20, LX-14 och Comp-B. CJ-tillståndet är det termodynamiska tillstånd, t.ex. tryck och temperatur, som reaktionsprodukterna befinner sig i omedelbart efter att detonationsfronten har passerat. Den isentropa expansionen är den väg i tillståndsrummet som följs då reaktionsprodukterna därefter expanderar. Med isentrop avses här att inget värmeutbyte med omgivningen hinner ske under förloppet. CJ-tillståndet och den isentropa expansionen har här beräknats med Cheetah 2.0 och produktbiblioteket exp6. För alla tre sprängämnen ligger CJ-tillståndet i den del av fasdiagrammet där diamant är den stabila fasen. Detta hänger ihop med att trycket i CJ-tillståndet vanligtvis är högt, 20-40 GPa, samtidigt som temperaturen inte är tillräckligt hög för att ge flytande kol. Då reaktionsprodukterna expanderar följs de färgade kurvorna i Figur 12 i riktning mot vänster, vilket innebär att produkterna kyls av samtidigt som trycket sjunker. Då trycket sjunkit till cirka 5-10 GPa passerar fasgränsen till grafit, varför denna fas nu favoriseras istället för diamant. Det bör nämnas att man vid beräkning av en isentrop expansion i regel fryser koncentrationen av produkter då temperaturen sjunker under en viss temperatur, ofta omkring 2000 K. Fasgränsen mellan diamant och grafit passerar dock här vid en högre temperatur.



Figur 12. Fasdiagram över kolets tre vanliga faser (svarta kurvor), beräknat med tillståndsekvationer från produktbiblioteket exp6 i Cheetah 2.0 [1], samt isentrop expansion från CJ-tillståndet för CL-20 (röd), LX-14 (grön) och Comp-B (blå), beräknade med samma produktbibliotek. CJ-tillstånden är markerade med stjärnsymboler, och reaktionsprodukterna följer de färgade kurvorna i riktning mot vänster och neråt, då de expanderar.

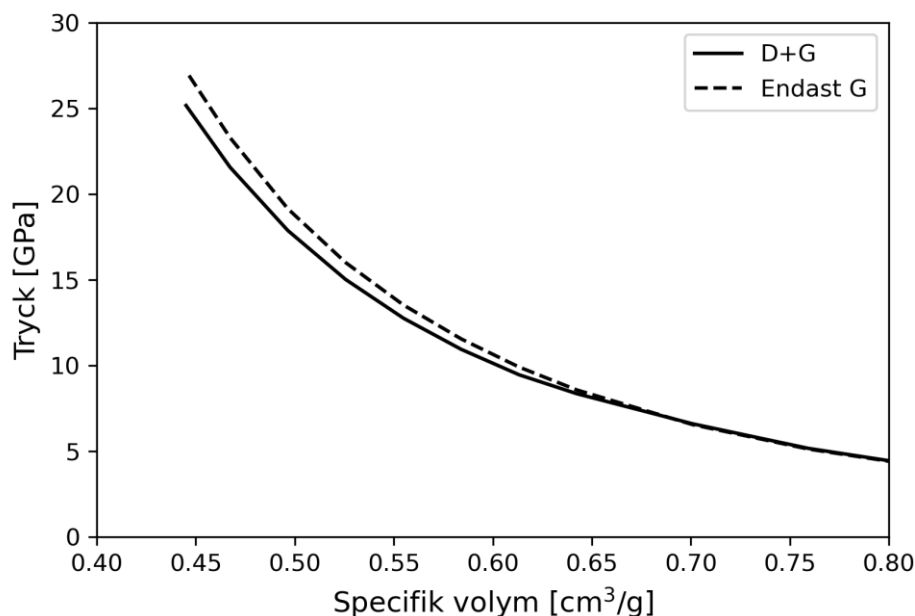
För att undersöka inverkan av fasövergångar beräknas CJ-tillståndet och den isentropa expansionen för de tre sprängämnena med samma metod, men denna gång utesluts diamant bland produktslagen så att det kondenserade kolet endast förekommer som grafit. Resultaten för CJ-tillståndet visas i

Tabell 3 och resultaten för den isentropa expansionen för Comp-B visas i Figur 13. Exkludering av diamant från produktslagen leder till högre beräknad detonationshastighet och CJ-tryck. Skillnaden är störst för Comp-B, som är minst syrebalanserat och således producerar mest kondenserat kol, och minst för CL-20, som är mest syrebalanserat. För Comp-B består tryckskillnaden under den isentropa expansionen tills trycket sjunkit till cirka 8 GPa, under vilket båda beräkningarna favoriserar grafit. För att ett

produktbibliotek, för en bred klass av sprängämnen, ska kunna ge förutsägelser av både CJ-egenskaperna och sprängämnets arbetsförmåga, behöver således hänsyn tas till kolets olika kondenserade faser.

Tabell 3. Egenskaper för CJ-tillståndet för tre sprängämnen som beräknats med Cheetah 2.0 och produktbiblioteket exp6.

ämne	densitet (g/cm ³)	D (m/s)	P _{CJ} (GPa)
Comp-B	1,712	7860	0,252
utan diamant		8170	0,269
LX-14	1,835	8750	0,323
utan diamant		8990	0,341
CL-20	1,950	9370	0,401
utan diamant		9470	0,410



Figur 13. Isentrop expansion från CJ-tillståndet för Comp-B beräknat med Cheetah 2.0 och produktbiblioteket exp6 [1]. Solid linje visar beräkning där alla kolets faser tillåts. Streckad linje visar beräkning där diamant utesluts.

Som andra exempel på kondenserade reaktionsprodukter betraktas sprängämnen som, utöver CHNO, också innehåller aluminium. Metalliserade sprängämnen har bland annat behandlats i en tidigare FOI-rapport [9]. Tillsats av aluminium ger ett betydligt tillskott till det totala energiinnehållet på grund av den höga reaktionsenergin hos aluminiumets reaktion med syre, vilket bildar aluminiumoxid Al₂O₃. Detta kan dock ha en komplex effekt på sprängämnets prestanda. Ett ofta förekommande resultat är att tillsats av aluminium ökar arbetsförmågan medan detonationshastighet och CJ-tryck förblir oförändrade eller försämrats något. Flera olika förklaringar till detta har föreslagits i litteraturen.

En hypotes är att aluminiserade sprängämnen ger upphov till patologiska detonationer [10]. Det innebär att den reaktion som fullständigt omsätter sprängämnet till reaktionsprodukter inte kan ge upphov till en stabil detonationsfront. Istället bildas en stabil detonationsfront av en partiell reaktion som endast omsätter CHNO-komponenterna

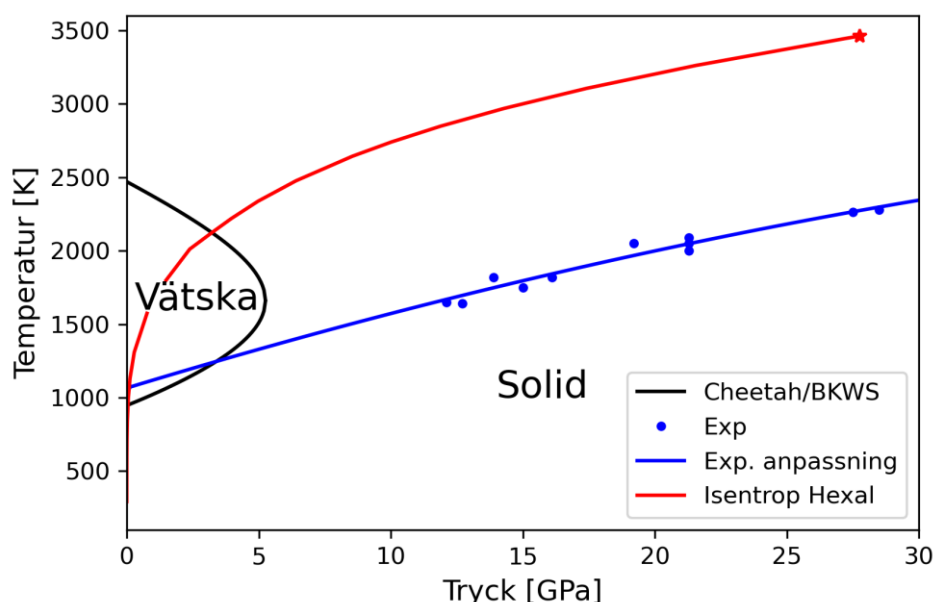
och högst en begränsad fraktion av aluminiumtillsatsen. Förbränningen av aluminium, som då äger rum bakom CJ-planet, bidrar till arbetsförmågan, men inte till CJ-egenskaperna.

En parallell beskrivning är att aluminiumpartiklarna initialt isoleras av ett yttre oxidlager, och inte kan reagera med övriga detonationsprodukter förrän detta lager spricker upp [11, 12]. Detta tros ske då partiklarna värmts upp till aluminiumets smältpunkt vid det aktuella trycket. Då partiklarna värms genom värmeutbyte med de varma gaserna, som utgörs av övriga detonationsprodukter, uppnås denna temperatur först efter viss fördröjning.

FOI har i tidigare arbete utforskat en fenomenologisk modell för detonation där aluminiumet på ett liknande sätt antas reagera efter CJ-tillståndet. Modellen är komplex och behöver kalibreras både mot experiment, t.ex. cylinderexpansionsförsök, och termokemiska beräkningar [9, 13, 14]. Beräkningar där aluminiumet behandlas som inert behöver här kombineras med beräkningar där det behandlas som reaktivt.

En alternativ hypotes är att aluminium reagerar i detonationsfronten och då bildar Al_2O och AlO . Al_2O_3 bildas först senare under detonationsprodukternas expansion, då temperaturen sjunkit och aluminiumoxid därigenom blivit den termokemiskt mest stabila produkten [15]. Detta förlopp förutsägs inte vid beräkning med Cheetah 2.0 och produktbiblioteket BKWS. Det är dock känt att Cheetah har genomgått betydande förbättringar i senare versioner av.

Det fortsatta arbetet med att förstå och utveckla modeller för metalliserade sprängämnen kommer med stor sannolikhet att förutsätta tillförlitliga termokemiska beräkningar. Det finns således anledning att säkerställa att produkter som innehåller aluminium beskrivs av korrekta och validerade tillståndsekvationer. Figur 14 visar fasdiagrammet för aluminium som beräknats med tillståndsekvationer från BKWS och jämför detta med experimentella data [16, 17]. Det kan noteras att aluminium vid höga temperaturer också kan förekomma som gas. Ett fasdiagram som inkluderar detta kommer dock att bero på gasens övriga komponenter samt vilken tillståndsekvation som beskriver dessa.

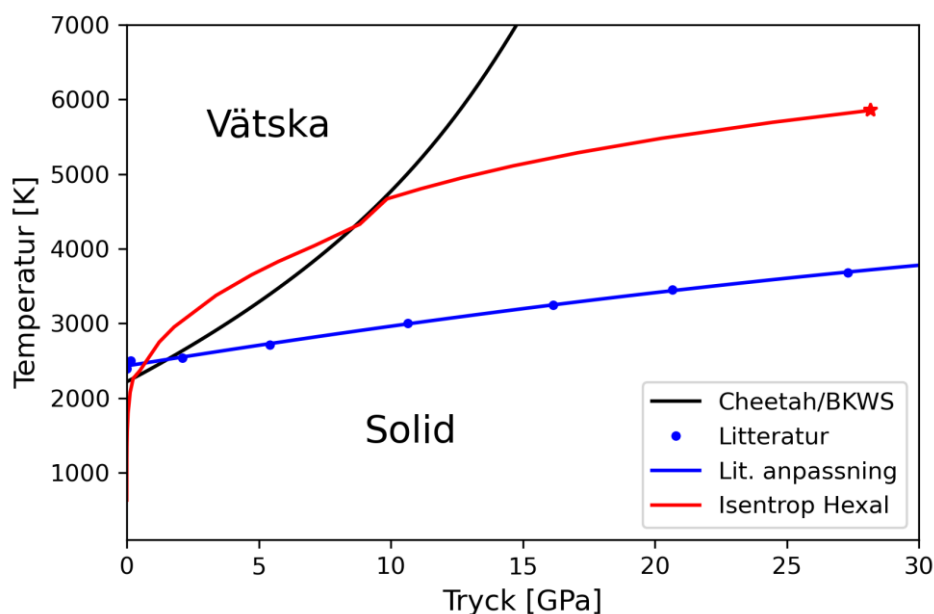


Figur 14. Fasdiagram för aluminium beräknat med tillståndsekvationer från Cheetah 2.0 och produktbiblioteket BKWS [1] (svart kurva) och data från experiment [16, 17] (blå punkter) och en kvadratisk anpassning till dessa (blå kurva). I Cheetah-beräkningen är aluminium vätska i området till vänster som begränsas av svart kurva och solid utanför. I experiment är aluminium vätska ovanför den blå kurvan och solid under. Isentrop expansion från CJ-tillståndet för en hexalkomposition beräknad med Cheetah 2.0 och BKWS är också inkluderad (röd kurva, CJ-tillstånd markerat med stjärnsymbol). I beräkningen antas aluminium vara inert.

Cheetah förutsäger här ett fasdiagram där aluminium endast förekommer som vätska i en begränsad del av fasrummet där trycket är mindre än 5 GPa. Vid atmosfärstryck förutsägs att flytande aluminium omvandlas till gas om temperaturen höjs ytterligare, vilket inte visas i figuren. Vid ett högre tryck, t.ex. 4 GPa, förutsägs dock att flytande aluminium blir solid igen, om temperaturen höjs över cirka 2000-2500 K. Detta är ett märkligt resultat som inte stöds av experimenten, vilka visar att aluminium förekommer som vätska även för högre tryck, dock med en smältpunkt som ökar med trycket.

I Figur 14 markeras också den isentropa expansionen från CJ-tillståndet för en hexalkomposition (RDX och aluminium) som beräknats med Cheetah 2.0 och BKWS. I beräkningen har det antagits att aluminiumet är inert. Enligt Cheetah är aluminiumpartiklarna solida i CJ-tillståndet och övergår till vätska först då trycket sjunkit till cirka 5 GPa. Enligt det experimentella fasdiagrammet skulle aluminiumet istället vara i vätskeform redan i CJ-tillståndet, och förbli som sådant under merparten av expansionen.

Motsvarande fasdiagram för Al_2O_3 , som är en av de huvudsakliga produkterna vid aluminiumförbränning, visas i Figur 15. Även i detta fall stämmer den beräknade smältkurvan dåligt överens med litteratordata som validerats mot experiment [18], speciellt för höga tryck där smälttemperaturen överskattas ordentligt.



Figur 15. Fasdiagram för aluminiumoxid beräknat med tillståndsekvationer från produktbiblioteket BKWS [1] (svart kurva) och data från litteraturvärden validerade mot experiment [18] (blå punkter) och en kvadratisk anpassning till dessa (blå kurva). Cheetah-beräkningen förutsäger att Al_2O_3 är vätska ovanför svart kurva och solid under. Enligt litteratordata är Al_2O_3 vätska ovanför blå kurva och solid under. Isentrop expansion från CJ-tillståndet för en hexalkomposition beräknad med Cheetah 2.0 och BKWS är också inkluderad (röd kurva, CJ-tillstånd markerat med stjärnsymbol). I beräkningen antas aluminium vara reaktivt.

I Figur 15 visas också den isentropa expansionen från CJ-tillståndet för samma hexalkomposition som ovan. Denna gång har dock aluminiumet i beräkningen antagits vara reaktivt. Beräkningen förutsäger då att allt aluminium förekommer som aluminiumoxid under hela expansionen. Produkten är inledningsvis solid, men förutsägs smälta då den teoretiska smältkurvan korsas vid cirka 9 GPa och 4500 K.

Om beräkningen istället nyttjat en tillståndsmodell för aluminiumoxid som varit konsistent med smältkurvan från litteraturen, hade resultaten förutsagt att produkten förekommer i

vätskefas i CJ-tillståndet och under merparten av expansionen. Detta hade kunnat ge andra förutsägelser beträffande detonationshastighet, CJ-tryck och arbetsförmåga. Det är dock tänkbart att förbränningen av aluminiumpartiklarna helt eller delvis sker först efter CJ-planet. I så fall representeras detonationshastighet och CJ-tryck bättre av en beräkning som antar att allt eller en del av aluminiumpartiklarna är inerta.

Sammanfattningsvis är detonationsförlopp hos metalliserade sprängämnen komplexa och inte kända i detalj. En avgörande förutsättning för det fortsatta forsknings- och modellutvecklingsarbetet är tillförlitliga termokemiska beräkningar. Det är därför av stor betydelse att granska, validera och om möjligt förbättra de tillståndsmodeller för metaller och kondenserade produkter från metallförbränning som är avsedda för termokemiska beräkningar.

4 Sammanfattning

En termokemisk beräkningskod utgör en viktig byggsten för forskning och utveckling på försvarsområdet. Merparten av europeiska aktörer är idag hänvisade till antingen föråldrade program eller kommersiella program med liten eller inget inflytande över kodutveckling, inriktning och omfattning. Mot denna bakgrund kommer ett EDA-projekt med målet att utveckla en modern europeisk termokemisk kod att starta våren 2022. Denna rapport sammanfattar motiv och upplägg för detta initiativ samt redogör för två inledande studier som genomförts. I den första studien undersöks några grundläggande tillståndsekvationer för gaser. Vidare visas hur molekylära modeller skulle kunna nyttjas för att öka den fysikaliska kopplingen med potential att generera mer generella tillståndsekvationer som med bibehållen noggrannhet kan förutsäga prestandaparametrar för en bredare klass av sprängämnen. I den andra studien demonstreras hur kondenserade reaktionsprodukter kan påverka resultatet i termokemiska beräkningar. Detta är en viktig men utmanande del i det kommande utvecklingsarbetet.

5 Referenser

- [1] L. E. Fried, W. M. Howard, and P. C. Souers, "Cheetah 2.0 Users's Manual," Lawrence Livermore National Laboratory 1998.
- [2] L. Martinez, R. Andrade, and J. M. Martinez, "Packmol: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations," *Journal of Computational Chemistry*, vol. 30, pp. 2157-2164, 2009.
- [3] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, "VMD - Visual Molecular Dynamics," *Journal of Molecular Dynamics*, vol. 14, pp. 33-38, 1996.
- [4] C. L. Mader, *Numerical Modeling of Explosives and Propellants*: CRC Press, 2008.
- [5] A. Maiti, R. H. Gee, S. Bastea, and L. E. Fried, "Phase separation in H₂O:N₂ mixture: Molecular dynamics simulations using atomistic force fields," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 126, p. 044510, 2007.
- [6] S. Plimpton, "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics," *J. Chomp. Phys.*, vol. 117, pp. 1-19, 1995.
- [7] W. J. Nellis and A. C. Mitchell, "Shock compression of liquid argon, nitrogen, and oxygen to 90 GPa (900 kbar)," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 73, pp. 6137-6145, 1980.
- [8] L. I. Stiel and E. L. Baker, "Relationships for the Thermodynamic Properties of Carbon Phases at Elevated Temperatures and Pressures," in *15:th International Detonation Symposium* San Francisco, CA, USA, 2014, p. 1622.
- [9] R. Wedberg, "Modellering och karakterisering av prestanda av metalliserade sprängämnen," FOI-R--4831-1942, 2019.
- [10] W. Fickett and W. C. Davis, *Detonation - Theory and Experiment*. New York: Dover Publications, Inc., 1979.
- [11] S. K. Chan, "Reaction Delay of Aluminum in Condensed Explosives," *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, vol. 39, pp. 897-903, 2014.
- [12] L. I. Stiel, E. L. Baker, and C. Capellos, "Characteristic Melt Times and Onset of Reaction for Aluminized Explosives," in *14:th International Detonation Symposium*, Coeur d'Alene, USA, 2010, p. 1035.
- [13] R. Wedberg, "Undervattensförsök för karaktärisering av aluminiserade sprängämnen," Totalförsvarets forskningsinstitut FOI-D--0688--SE, 2015.
- [14] R. H. Guirguis and P. J. Miller, "Time-dependent equations of state for aluminized underwater explosives," presented at the 10:th International Detonation Symposium, 1993.
- [15] B. C. Tappan, L. G. Hill, J. P. Lichthardt, P. R. Bowden, D. L. McDonald, M. Shorty, *et al.*, "Diameter Effect Observations in Pressed HMX-Aluminum Explosive Formulations," in *16:th International Detonation Symposium*, Cambridge, MD, USA, 2018, p. 498.
- [16] A. Hänström and P. Lazor, "High pressure melting and equation of state of aluminium," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 305, pp. 209-215, 2000.
- [17] R. Boehler and M. Ross, "Melting curve of aluminum in a diamond cell to 0.8 Mbar: implications for iron," *Earth and Planetary Science Letters*, vol. 153, pp. 223-227, 1997.
- [18] Z. Wang, H. Mao, and S. K. Saxena, "The melting of corundum (Al₂O₃) under high pressure conditions," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 299, pp. 287-291, 2000.

FOI är en huvudsakligen uppdragsfinansierad myndighet under Försvarsdepartementet. Kärnverksamheten är forskning, metod- och teknikutveckling till nytta för försvar och säkerhet. Organisationen har cirka 1000 anställda varav ungefär 800 är forskare. Detta gör organisationen till Sveriges största forskningsinstitut. FOI ger kunderna tillgång till ledande expertis inom ett stort antal tillämpningsområden såsom säkerhetspolitiska studier och analyser inom försvar och säkerhet, bedömning av olika typer av hot, system för ledning och hantering av kriser, skydd mot och hantering av farliga ämnen, IT-säkerhet och nya sensorers möjligheter.



FOI
Totalförsvarets forskningsinstitut
164 90 Stockholm

Tel: 08-55 50 30 00
Fax: 08-55 50 31 00

www.foi.se