



UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL

# ENERGÍA DE POSTCOMBUSTIÓN DE ALTOS EXPLOSIVOS EN ESPACIOS CONFINADOS

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL

DIEGO ARMANDO DÍAZ SANDOVAL

PROFESOR GUÍA:  
FRANCISO HERNÁNDEZ PRADO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:  
MAURICIO SARRAZIN ARELLANO  
JOSÉ CAROCA GAETE

SANTIAGO DE CHILE  
2018

**RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR AL  
TÍTULO DE:** Ingeniero Civil  
**POR:** Diego Armando Díaz Sandoval  
**FECHA:** Abril 2018  
**PROFESOR GUÍA:** Francisco Hernández Prado

## **ENERGÍA DE POSTCOMBUSTIÓN DE ALTOS EXPLOSIVOS EN ESPACIOS CONFINADOS**

Cuando un alto-explosivo detona, se genera una reacción ultrasónica que libera calor y hace que los reactivos se transformen súbitamente en gases altamente presurizados. La rápida expansión de los gases resulta en la generación de una onda de choque, la cual se expande a través de un medio como el aire, para posteriormente impactar en las estructuras.

El proceso de detonación involucra exclusivamente a los reactantes contenidos en el alto-explosivo, implicando que la energía de combustión liberada por la detonación se ve influenciada solamente por el contenido de oxígeno que está presente en el explosivo. En la medida que el contenido de oxígeno al interior del explosivo es bajo (explosivo deficiente en oxígeno), la combustión no se completa, generándose una postcombustión asociada a la interacción entre los productos aún inflamables de la detonación y el aire circundante. Este segundo proceso de combustión (postcombustión) es mucho más lento que el proceso de detonación y no genera una onda de choque; sin embargo, la postcombustión puede liberar una energía que es comparable a la liberada durante el proceso de detonación. Por lo tanto, la postcombustión presenta el potencial de aumentar significativamente la componente de presión de gas (cuasi-estática), en la medida que la explosión ocurra dentro de un espacio confinado.

El objetivo de este trabajo consiste en determinar valores apropiados de la energía específica aportada por la postcombustión, que se debe incorporar en el software comercial AUTODYN, con el fin de obtener predicciones más confiables de la presión cuasi-estática para distintos tipos de altos-explosivos. Para ello, en una primera etapa se lleva a cabo un modelo de equilibrio termodinámico simplificado asociado a reacciones de altos-explosivos en espacios totalmente confinados sujetos a condiciones atmosféricas. 57 explosivos son estudiados, en donde los resultados obtenidos permiten determinar las presiones cuasi-estáticas, concentraciones y temperaturas residuales. Para el caso del TNT, se obtiene un ajuste adecuado en comparación con datos experimentales, donde el modelo termodinámico simplificado genera resultados levemente mayores (25%) a lo observado experimentalmente, lo cual es conservador para el diseño y suficiente, teniendo en cuenta las simplificaciones consideradas en el modelo de equilibrio termodinámico.

Como segunda parte del estudio, se determina la energía de postcombustión que se debe emplear en el software AUTODYN para que la presión cuasi-estática se ajuste a los valores determinados por el modelo termodinámico simplificado. Esto se lleva cabo empleando la metodología descrita por Hernández (2016) (aplicado a TNT). Se observa que las presiones cuasi-estáticas obtenidas de las simulaciones incorporando la energía de postcombustión se ajustan al modelo termodinámico simplificado, mostrando diferencias menores a un 0.2%. En adición, se concluye que la práctica actual de considerar una carga de TNT equivalente puede ser bastante inexacta y que el método sugerido en este estudio es más adecuado para la obtención de la componente de presión de gas.

*Dedico esta memoria a Eliana y  
Gerardo, por su cariño infinito y  
apoyo incondicional.*

# Agradecimientos

La familia es lo primero, y, en consecuencia, quisiera agradecer a mis padres Gerardo y Eliana por apoyarme en todo momento, y haber hecho de mí una buena persona. Que este logro al menos les retribuya una pizca del orgullo que siento yo por ustedes.

Le agradezco a Luz por su gran compañerismo y apoyo emocional durante la mayor parte de la carrera, y que a pesar de la distancia siempre ha estado presente, comprendiéndome. También agradezco a mi hermano Álvaro, a sus tardes de niño-rata y a sus memes que me sacaron varias risas y me mantuvieron siempre contingente.

Le doy gracias a mi primo Carlos, que me ha ayudado cuando lo he necesitado aquí en Santiago y me enseñó a no ser tan provinciano. A Marcelo y a Lily, por recibirme con los brazos abiertos, y a Anto, que está cada día más grande. Aunque no dependiera de mí, debí haberlos conocido antes. Obviamente le agradezco a mis tíos y abuelos que siempre se han preocupado de mi persona. Aunque no les digo frecuentemente que los quiero, sí lo hago.

Agradezco a mi profesor guía Francisco Hernández, por su buena disposición a atender siempre cualquier duda que tuviese, independientemente si esta fuera o no con fines académicos. Su dedicación y pasión por la ingeniería es un ejemplo a seguir, y espero algún día estar a su altura, tanto como ingeniero, así como persona.

Mencionar a los amigos que conocí en la media: Felipe, Yeral y Gálvez. Son buena gente, y aunque nos vemos poco, siempre me voy sabiendo algo nuevo. Gracias por ello.

Darle las gracias a los buenos amigos que me encontré en civil, que hicieron de mi estancia en la universidad un refugio de risas y algo más que meramente académico. Entre estos personajes está Pablo Díaz y a su metódica forma de ser, que me convirtió en alguien más ordenado y eficiente. Agradezco a Carlos Fuentes y a sus chistes que mejoraron con el pasar de los años, no así su apetito. Ambos fingen ser deportistas, y espero que la mentira puedan sostenerla en el tiempo.

Le agradezco a Isidora, Javier, Daniela, Santiago y Campos, que siempre están presentes, y me han enseñado mucho. Agradezco a Gabriel Gana por enseñarme a no ser tan grosero con su buen hablar (aunque falló). A Luis Loyola le agradezco por acompañarme en las buenas y malas decisiones académicas escogidas y ser el compañero de grupo por defecto. Sin embargo, esto no le quita la esencia de perro cochino.

Aunque Gana y Lucho defiendan su ciudad a muerte, ojalá algún día acepten que es horrible.

Me quedo con los buenos recuerdos y no con las malas fotos que Pablo sacó.

Ojalá Luz me quiera, así como ama al chocolate.

Gracias pizza, y a los agradables momentos que me has hecho pasar con las personas que más me importan. Excepto a la pizza con piña, la respeto, pero no la comparto.

Agradezco a las dos personas que me dieron la vida, y agradezco a la vida misma por cruzarme con todos estos increíbles personajes.

# Tabla de contenido

Capítulo 1. Introducción y Objetivos.....	1
1.1 Introducción.....	1
1.2 Objetivos.....	3
1.2.1 Objetivos generales.....	3
1.2.2 Objetivos específicos.....	3
1.3 Metodología.....	4
1.4 Estructura y organización de la Memoria.....	4
Capítulo 2. Explosiones y cargas en espacios confinados.....	6
2.1 Explosivos.....	6
2.1.1 Balance de Oxígeno.....	6
2.1.2 Clasificación por velocidad de descomposición.....	7
2.1.3 Clasificación de explosivos por estabilidad.....	9
2.1.4 Clasificación según forma de uso.....	10
2.2 Explosiones.....	12
2.2.1 Explosiones no confinadas.....	13
2.2.2 Explosiones confinadas.....	15
2.2.3 El proceso de Postcombustión dentro de cámaras confinadas.....	17
2.3 Modelación de explosiones mediante el software AUTODYN.....	18
Capítulo 3. Curvas de presión cuasi-estática en espacios confinados.....	20
3.1 Modelo termodinámico de la presión de gas.....	20
3.1.1 Balance de las ecuaciones de detonación y combustión.....	21
3.1.2 Volumen de cámara necesario para lograr la combustión completa.....	23
3.1.3 Cálculo de la energía de postcombustión.....	25
3.1.4 Energía de reacción ante una postcombustión incompleta.....	26
3.1.5 Cálculo de número de moles en la mezcla de gases.....	27
3.1.6 Cálculo de la temperatura final del gas.....	31
3.1.7 Cálculo de presiones en el estado cuasi-estático.....	35
3.2 Propiedades químicas de los explosivos seleccionados.....	35
3.3 Presión de gas usando la equivalencia en TNT.....	39
3.4 Resultados.....	42
3.4.1 TNT.....	43
3.4.2 Composición C-4.....	46
3.4.3 Octol 75/25.....	49

3.4.4	PBX-9502 .....	51
3.4.5	Pentolite 50/50 .....	54
3.4.6	Resumen de los resultados .....	56
Capítulo 4.	Curvas de energía de postcombustión ajustadas para análisis en AUTODYN ..	60
4.1	Ecuaciones de estado .....	60
4.2	Descripción del método .....	61
4.2.1	Predicción de la presión cuasi-estática ( $P_{qs}$ ) .....	62
4.2.2	Cálculo de la energía adicional de postcombustión para uso en AUTODYN.....	64
4.3	Modelación realizada en AUTODYN.....	66
4.3.1	Forma de la cámara de confinamiento .....	66
4.3.2	Simulación de las explosiones confinadas en Autodyn.....	67
4.3.3	Incorporación de la energía adicional de postcombustión .....	71
4.4	Explosivos utilizados y sus propiedades.....	71
4.5	Resultados.....	72
4.5.1	Energía de Postcombustión para el explosivo TNT.....	72
4.5.2	Energía de Postcombustión para el Compuesto C-4 .....	75
4.5.3	Energía de Postcombustión para el explosivo Octol 75/25 .....	78
4.5.4	Energía de Postcombustión para el explosivo PBX-9502 .....	81
4.5.5	Energía de Postcombustión para el explosivo Pentolite 50/50 .....	83
4.5.6	Resumen de los resultados .....	85
Capítulo 5.	Conclusiones.....	92
Glosario.....		96
Bibliografía .....		101
Capítulo 6.	Anexos.....	103
Anexo A.	Modelo termodinámico .....	104
A.1.	Calores específicos.....	104
A.2.	Resultados del modelo termodinámico.....	106
A.2.1.	Amatol 80/20 .....	106
A.2.2.	Boracitol.....	108
A.2.3.	BTF .....	110
A.2.4.	Comp A-3.....	112
A.2.5.	Comp A-5.....	114
A.2.6.	Comp B Grade A.....	116
A.2.7.	Comp B-3.....	118
A.2.8.	Comp C-3.....	120

A.2.9.	Cyclotol 60/40 .....	122
A.2.10.	Cyclotol 75/25 .....	124
A.2.11.	DATB .....	126
A.2.12.	DIPAM .....	128
A.2.13.	DNPA .....	130
A.2.14.	EDNP .....	132
A.2.15.	EL-506A .....	134
A.2.16.	EL-506C .....	136
A.2.17.	FEFO .....	138
A.2.18.	HMX .....	140
A.2.19.	HNAB .....	142
A.2.20.	HNS .....	144
A.2.21.	LX-01-0 .....	146
A.2.22.	LX-04-1 .....	148
A.2.23.	LX-07-2 .....	150
A.2.24.	LX-09-0 .....	152
A.2.25.	LX-09-1 .....	154
A.2.26.	LX-10-0 .....	156
A.2.27.	LX-10-1 .....	158
A.2.28.	LX-11-0 .....	160
A.2.29.	LX-14-0 .....	162
A.2.30.	LX-15 .....	164
A.2.31.	LX-16 .....	166
A.2.32.	LX-17-0 .....	168
A.2.33.	MEN-II .....	170
A.2.34.	NC (12.0% N) .....	172
A.2.35.	NC (13.35% N) .....	174
A.2.36.	NC (14.14% N) .....	176
A.2.37.	NG .....	178
A.2.38.	NM .....	180
A.2.39.	NQ .....	182
A.2.40.	PBX-9007 .....	184
A.2.41.	PBX-9010 .....	186
A.2.42.	PBX-9011 .....	188
A.2.43.	PBX-9205 .....	190

A.2.44.	PBX-9407.....	192
A.2.45.	PBX-9501.....	194
A.2.46.	PBX-9503.....	196
A.2.47.	PETN.....	198
A.2.48.	RDX.....	200
A.2.49.	TACOT.....	202
A.2.50.	TATB.....	204
A.2.51.	Tetryl.....	206
A.2.52.	TNM.....	208
Anexo B.	Ajuste de Energía de Postcombustión en Autodyn.....	210
B.1.	Planilla de cálculo en Mathcad.....	210



# Índice de Tablas

Tabla 2-1: Categoría de cargas en explosiones. Modificado de UFC 3-340-02 (2008).....	17
Tabla 3-1: Composición molar del aire. ....	23
Tabla 3-2: Cantidad de aire necesario para que reaccione un mol de alto-explosivo.....	24
Tabla 3-3: Energía de liberación de las componentes de la postcombustión. ....	26
Tabla 3-4: Coeficientes del ajuste polinómico.....	33
Tabla 3-5: Razones de capacidades caloríficas.....	34
Tabla 3-6: Propiedades químicas de los explosivos $C_aH_bO_cN_d$ . Modificado de Dobratz & Crawford (1985). ....	36
Tabla 3-7: Propiedades químicas de los explosivos $C_aH_bO_cN_dF_eCl_f$ . Modificado de Dobratz & Crawford (1985). ....	38
Tabla 3-8: Densidad de carga límite para los explosivos en estudio. ....	42
Tabla 4-1: Parámetros de la JWL para los altos-explosivos en estudio.....	71
Tabla 4-2: Resumen de resultados para el caso TNT.....	87
Tabla 4-3: Resumen de resultados para el caso del Comp C-4.....	88
Tabla 4-4: Resumen de resultados para el caso del Octol 75/25.....	89
Tabla 4-5: Resumen de resultados para el caso del PBX-9502.....	90
Tabla 4-6: Resumen de resultados para el caso del Pentolite 50/50. ....	91
Tabla 6-1: Capacidades caloríficas de los compuestos $CO$ , $CO_2$ , $H_2O$ , $H_2$ , $O_2$ y $N_2$ . Fuente: Cooper, (1996).....	104
Tabla 6-2: Capacidades caloríficas de los compuestos $HF$ , y $HCl$ . Fuente: Chase, (1998). ....	105

# Índice de Ilustraciones

Figura 2-1: Clasificación de las sustancias explosivas por estabilidad. Fuente: Akhavan (2011).....	10
Figura 2-2: Esquema de una ráfaga de aire libre. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).....	13
Figura 2-3: Esquema de una ráfaga de aire. Fuente: UFC 3-340-02 (2008). ....	14
Figura 2-4: Esquema de una ráfaga superficial. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).....	14
Figura 2-5 Tiempo-historia de una explosión parcialmente confinada. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).....	16
Figura 2-6: Tipos de explosiones confinadas. Fuente: Koccaz, et al., (2008). ....	16
Figura 3-1: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 1. Modificado de Edri, et al., (2013).....	28
Figura 3-2: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 2. Modificado de Edri, et al., (2013).....	29
Figura 3-3: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 3. Modificado de Edri, et al., (2013).....	30
Figura 3-4: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 4. Modificado de Edri, et al., (2013).....	31
Figura 3-5: Calor específico a presión constante de los productos de la combustión. ....	33
Figura 3-6: Parámetros que caracterizan la fase positiva de la onda de choque para explosiones esférica de TNT en campo abierto al nivel del mar. Fuente: UFC 3-340-02 (2008). ....	40
Figura 3-7: Factor de conversión del TNT para distintas densidades de carga. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).....	42
Figura 3-8: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TNT. ....	43
Figura 3-9 Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TNT.....	44
Figura 3-10: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TNT. ....	44
Figura 3-11: Presión residual relativa del sistema para explosivo TNT. ....	45
Figura 3-12: Error porcentual de presión relativa. Explosivo TNT.....	46
Figura 3-13: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo C-4.....	47
Figura 3-14: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo C-4. ....	47
Figura 3-15: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp C-4. ....	48
Figura 3-16: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp C-4. ....	48
Figura 3-17: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Octol 75/25.....	49
Figura 3-18: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Octol 75/25. ....	50
Figura 3-19: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Octol 75/25. ....	50
Figura 3-20: Presión residual relativa del sistema para explosivo Octol 75/25.....	51
Figura 3-21: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9502.....	52
Figura 3-22: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9502. ....	52
Figura 3-23: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9502.....	53
Figura 3-24: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9502.....	53
Figura 3-25: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Pentolite 50/50. .	54
Figura 3-26: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Pentolite 50/50. ....	55
Figura 3-27: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Pentolite 50/50.....	55
Figura 3-28: Presión residual relativa del sistema para explosivo Pentolite 50/50.....	56
Figura 3-29: Energía total liberada por el sistema para distintas densidades de carga .....	57
Figura 3-30: Temperatura alcanzada en el sistema versus densidad de carga. ....	57

Figura 3-31: Presión residual relativa del sistema para distintos tipos de explosivos. ....	58
Figura 3-32: Presión residual relativa del sistema para distintos tipos de explosivos. ....	59
Figura 4-1: Esquema de EOS de JWL usada para explosivo, que relaciona la presión con la densidad. Fuente: ANSYS Inc. (2016).....	61
Figura 4-2: Cámara utilizada en la modelación.....	67
Figura 4-3: Cuña unidimensional para explosión de TNT. Estado inicial. ....	68
Figura 4-4: Cuña unidimensional para explosión de TNT. Estado previo al remapeo. ....	69
Figura 4-5: Sistema espacio-cámara previo al remapeo. ....	70
Figura 4-6: Explosión de TNT posterior al remapeo desde el modelo 1D (esquema de velocidades de la onda de choque). ....	70
Figura 4-7: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo TNT. ....	73
Figura 4-8: Energía interna cedida por el explosivo TNT. Modelos Autodyn sin AB. ....	74
Figura 4-9: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo TNT. ....	75
Figura 4-10: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo C-4.....	76
Figura 4-11: Energía interna cedida por el explosivo C-4. Modelo Autodyn sin AB.....	77
Figura 4-12: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo C-4.....	78
Figura 4-13: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo Octol 75/25. ....	79
Figura 4-14: Energía interna cedida por el explosivo Octol 75/25. Modelos Autodyn sin AB. ....	80
Figura 4-15: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo Octol 75/25. ....	81
Figura 4-16: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo PBX-9502... ..	82
Figura 4-17: Energía interna cedida por el explosivo PBX-9502. Modelos Autodyn sin AB. ....	82
Figura 4-18: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo PBX-9502. ....	83
Figura 4-19: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo Pentolite 50/50.....	84
Figura 4-20: Energía interna cedida por el explosivo Pentolite 50/50. Modelos Autodyn sin AB.....	84
Figura 4-21: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo Pentolite 50/50.....	85
Figura 6-1: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Amatol 80/20. ....	106
Figura 6-2: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Amatol 80/20. ....	107
Figura 6-3: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Amatol 80/20. ....	107
Figura 6-4: Presión residual relativa del sistema para explosivo Amatol 80/20. ....	107
Figura 6-5: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Boracitol. ....	108
Figura 6-6: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Boracitol. ....	108
Figura 6-7: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Boracitol. ....	109
Figura 6-8: Presión residual relativa del sistema para explosivo Boracitol. ....	109
Figura 6-9: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo BTF.....	110
Figura 6-10: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo BTF.....	110
Figura 6-11: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo BTF.....	111
Figura 6-12: Presión residual relativa del sistema para explosivo BTF.....	111
Figura 6-13: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto A-3. ....	112
Figura 6-14: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp A-3.....	112
Figura 6-15: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp A-3.....	113
Figura 6-16: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp A-3. ....	113
Figura 6-17: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto A-5. ....	114

Figura 6-18: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp A-5.....	114
Figura 6-19: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp A-5.....	115
Figura 6-20: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp A-5.....	115
Figura 6-21: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto B Grade A.....	116
Figura 6-22: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp B Grade A.....	116
Figura 6-23: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp B Grade A.....	117
Figura 6-24: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp B Grade A.....	117
Figura 6-25: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto B-3.....	118
Figura 6-26: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp B-3.....	118
Figura 6-27: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp B-3.....	119
Figura 6-28: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp B-3.....	119
Figura 6-29: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto C-3.....	120
Figura 6-30: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp C-3.....	120
Figura 6-31: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp C-3.....	121
Figura 6-32: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp C-3.....	121
Figura 6-33: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Cyclotol 60/40.....	122
Figura 6-34: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Cyclotol 60/40.....	122
Figura 6-35: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Cyclotol 60/40.....	123
Figura 6-36: Presión residual relativa del sistema para explosivo Cyclotol 60/40.....	123
Figura 6-37: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Cyclotol 75/25.....	124
Figura 6-38: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Cyclotol 75/25.....	124
Figura 6-39: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Cyclotol 75/25.....	125
Figura 6-40: Presión residual relativa del sistema para explosivo Cyclotol 75/25.....	125
Figura 6-41: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo DATB.....	126
Figura 6-42: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo DATB.....	126
Figura 6-43: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo DATB.....	127
Figura 6-44: Presión residual relativa del sistema para explosivo DATB.....	127
Figura 6-45: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo DIPAM.....	128
Figura 6-46: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo DIPAM.....	128
Figura 6-47: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo DIPAM.....	129
Figura 6-48: Presión residual relativa del sistema para explosivo DIPAM.....	129
Figura 6-49: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo DNPA.....	130
Figura 6-50: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo DNPA.....	130
Figura 6-51: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo DNPA.....	131
Figura 6-52: Presión residual relativa del sistema para explosivo DNPA.....	131
Figura 6-53: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo EDNP.....	132
Figura 6-54: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo EDNP.....	132
Figura 6-55: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo EDNP.....	133
Figura 6-56: Presión residual relativa del sistema para explosivo EDNP.....	133
Figura 6-57: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo EL-506A.....	134
Figura 6-58: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo EL-506A.....	134
Figura 6-59: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo EL-506A.....	135
Figura 6-60: Presión residual relativa del sistema para explosivo EL-506A.....	135
Figura 6-61: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo EL-506C.....	136
Figura 6-62: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo EL-506C.....	136
Figura 6-63: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo EL-506C.....	137

Figura 6-64: Presión residual relativa del sistema para explosivo EL-506C.....	137
Figura 6-65: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo FEFO. ....	138
Figura 6-66: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo FEFO.....	138
Figura 6-67: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo FEFO.....	139
Figura 6-68: Presión residual relativa del sistema para explosivo FEFO. ....	139
Figura 6-69: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo HMX.....	140
Figura 6-70: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo HMX.....	140
Figura 6-71: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo HMX.....	141
Figura 6-72: Presión residual relativa del sistema para explosivo HMX. ....	141
Figura 6-73: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo HNAB.....	142
Figura 6-74: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo HNAB.....	142
Figura 6-75: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo HNAB.....	143
Figura 6-76: Presión residual relativa del sistema para explosivo HNAB.....	143
Figura 6-77: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo HNS.....	144
Figura 6-78: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo HNS. ....	144
Figura 6-79: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo HNS.....	145
Figura 6-80: Presión residual relativa del sistema para explosivo HNS. ....	145
Figura 6-81: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-01-0.....	146
Figura 6-82: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-01-0.....	146
Figura 6-83: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-01-0.....	147
Figura 6-84: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-01-0.....	147
Figura 6-85: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-04-1.....	148
Figura 6-86: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-04-1.....	148
Figura 6-87: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-04-1.....	149
Figura 6-88: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-04-1.....	149
Figura 6-89: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-07-2.....	150
Figura 6-90: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-07-2.....	150
Figura 6-91: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-07-2.....	151
Figura 6-92: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-07-2.....	151
Figura 6-93: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-09-0.....	152
Figura 6-94: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-09-0.....	152
Figura 6-95: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-09-0.....	153
Figura 6-96: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-09-0.....	153
Figura 6-97: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-09-1.....	154
Figura 6-98: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-09-1.....	154
Figura 6-99: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-09-1.....	155
Figura 6-100: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-09-1.....	155
Figura 6-101: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-10-0.....	156
Figura 6-102: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-10-0.....	156
Figura 6-103: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-10-0.....	157
Figura 6-104: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-10-0.....	157
Figura 6-105: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-10-1.....	158
Figura 6-106: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-10-1.....	158
Figura 6-107: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-10-1.....	159
Figura 6-108: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-10-1.....	159
Figura 6-109: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-11-0.....	160
Figura 6-110: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-11-0.....	160
Figura 6-111: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-11-0.....	161

Figura 6-112: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-11-0. ....	161
Figura 6-113: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-14-0. ....	162
Figura 6-114: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-14-0. ....	162
Figura 6-115: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-14-0. ....	163
Figura 6-116: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-14-0. ....	163
Figura 6-117: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-15. ....	164
Figura 6-118: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-15. ....	164
Figura 6-119: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-15. ....	165
Figura 6-120: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-15. ....	165
Figura 6-121: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-16. ....	166
Figura 6-122: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-16. ....	166
Figura 6-123: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-16. ....	167
Figura 6-124: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-16. ....	167
Figura 6-125: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-17-0. ....	168
Figura 6-126: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-17-0. ....	168
Figura 6-127: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-17-0. ....	169
Figura 6-128: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-17-0. ....	169
Figura 6-129: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo MEN-II. ....	170
Figura 6-130: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo MEN-II. ....	170
Figura 6-131: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo MEN-II. ....	171
Figura 6-132: Presión residual relativa del sistema para explosivo MEN-II. ....	171
Figura 6-133: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NC (12% N). ....	172
Figura 6-134: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NC (12% N). ....	172
Figura 6-135: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NC (12% N). ....	173
Figura 6-136: Presión residual relativa del sistema para explosivo NC (12% N). ....	173
Figura 6-137: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NC (13.35% N). .....	174
Figura 6-138: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NC (13.35% N). .....	174
Figura 6-139: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NC (13.35% N). ....	175
Figura 6-140: Presión residual relativa del sistema para explosivo NC (13.35% N). ....	175
Figura 6-141: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NC (14.14% N). .....	176
Figura 6-142: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NC (14.14% N). .....	176
Figura 6-143: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NC (14.14% N). ....	177
Figura 6-144: Presión residual relativa del sistema para explosivo NC (14.14% N). ....	177
Figura 6-145: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NG. ....	178
Figura 6-146: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NG. ....	178
Figura 6-147: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NG. ....	179
Figura 6-148: Presión residual relativa del sistema para explosivo NG. ....	179
Figura 6-149: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NM. ....	180
Figura 6-150: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NM. ....	180
Figura 6-151: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NM. ....	181
Figura 6-152: Presión residual relativa del sistema para explosivo NM. ....	181
Figura 6-153: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NQ. ....	182
Figura 6-154: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NQ. ....	182
Figura 6-155: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NQ. ....	183

Figura 6-156: Presión residual relativa del sistema para explosivo NQ. ....	183
Figura 6-157: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9007. ....	184
Figura 6-158: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9007. ....	184
Figura 6-159: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9007. ....	185
Figura 6-160: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9007. ....	185
Figura 6-161: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9010. ....	186
Figura 6-162: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9010. ....	186
Figura 6-163: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9010. ....	187
Figura 6-164: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9010. ....	187
Figura 6-165: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9011. ....	188
Figura 6-166: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9011. ....	188
Figura 6-167: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9011. ....	189
Figura 6-168: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9011. ....	189
Figura 6-169: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9205. ....	190
Figura 6-170: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9205. ....	190
Figura 6-171: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9205. ....	191
Figura 6-172: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9205. ....	191
Figura 6-173: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9407. ....	192
Figura 6-174: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9407. ....	192
Figura 6-175: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9407. ....	193
Figura 6-176: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9407. ....	193
Figura 6-177: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9501. ....	194
Figura 6-178: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9501. ....	194
Figura 6-179: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9501. ....	195
Figura 6-180: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9501. ....	195
Figura 6-181: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9503. ....	196
Figura 6-182: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9503. ....	196
Figura 6-183: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9503. ....	197
Figura 6-184: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9503. ....	197
Figura 6-185: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PETN. ....	198
Figura 6-186: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PETN. ....	198
Figura 6-187: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PETN. ....	199
Figura 6-188: Presión residual relativa del sistema para explosivo PETN. ....	199
Figura 6-189: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo RDX. ....	200
Figura 6-190: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo RDX. ....	200
Figura 6-191: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo RDX. ....	201
Figura 6-192: Presión residual relativa del sistema para explosivo RDX. ....	201
Figura 6-193: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TACOT. ....	202
Figura 6-194: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TACOT. ....	202
Figura 6-195: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TACOT. ....	203
Figura 6-196: Presión residual relativa del sistema para explosivo TACOT. ....	203
Figura 6-197: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TATB. ....	204
Figura 6-198: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TATB. ....	204
Figura 6-199: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TATB. ....	205
Figura 6-200: Presión residual relativa del sistema para explosivo TATB. ....	205
Figura 6-201: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Tetryl. ....	206
Figura 6-202: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Tetryl. ....	206
Figura 6-203: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Tetryl. ....	207

Figura 6-204: Presión residual relativa del sistema para explosivo Tetryl. ....	207
Figura 6-205: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TNM.....	208
Figura 6-206: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TNM. ....	208
Figura 6-207: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TNM.....	209
Figura 6-208: Presión residual relativa del sistema para explosivo TNM.....	209



# Capítulo 1. Introducción y Objetivos

## 1.1 Introducción

Las explosiones pueden ser categorizadas en eventos físicos, nucleares o químicos que generan altos niveles de sobrepresión (diferencia de presión respecto a la presión atmosférica), expulsión de fragmentos y calor. Ejemplos de explosiones físicas podría ser la súbita falla de un cilindro con gas presurizado, la erupción de un volcán o la mezcla violenta de líquidos a distintas temperaturas. En cambio, una explosión nuclear libera enormes cantidades de energía por medio de la fusión/fisión de diferentes núcleos atómicos (Smith & Hetherington, 1994).

Una explosión química, involucra la oxidación (o combustión) de compuestos inflamables, los cuales básicamente se caracterizan por la expansión de gases a diversas tasas de reacción. Esta combustión puede ser supersónica cuyo proceso es denominado detonación o puede ser una combustión sónica (se propaga a una velocidad menor a la velocidad del sonido) denominada como deflagración, la cual es comúnmente observada en la explosión de gases, pólvora, polvos industriales en suspensión, etc.; siendo un incendio el caso de una combustión extremadamente lenta que no se caracteriza por generar niveles significativos de sobrepresión. De esta forma el potencial efecto que genera una combustión en términos de sobrepresión se relaciona a la tasa de combustión y la magnitud de expansión de los reactantes generados en el proceso de combustión (Akhavan, 2011).

En la naturaleza no es común encontrar materiales que tengan una combustión supersónica. Es decir, materiales que puedan causar una detonación, siendo estos materiales definidos como altos-explosivos (*high-explosives*). De esta forma, los altos-explosivos se caracterizan por poseer una alta tasa de combustión (y una alta tasa de propagación) en la cual la combustión viaja más rápidamente que el medio en el cual se propaga la onda de sobrepresión, generando una acumulación (o superposición) de energía. Esto gatilla una onda de choque, la cual será más potente en la medida que la energía liberada durante el proceso de detonación sea más alta, y en la medida que la velocidad de propagación de la reacción de detonación sea mayor (Meyer, et al., 2007).

Cabe mencionar que uno de los primeros altos-explosivos corresponde a la nitroglicerina ( $C_3H_5N_3O_9$ ), que fue desarrollada por Ascanio Sobrero en 1847 trabajando en la Universidad de Turín (Akhavan, 2011). La nitroglicerina es un compuesto orgánico que se obtiene de la mezcla entre ácido nítrico concentrado, ácido sulfúrico y glicerina. La nitroglicerina al ser un alto-explosivo probó ser de una altísima potencia, trayendo como consecuencia una evolución en la industria de la minería, reemplazando rápidamente a la pólvora negra. Sin embargo, este tipo de alto-explosivo era sumamente inestable y peligroso de manipular, lo cual generó serios accidentes a quienes la utilizaban o transportaban (Meyer, et al., 2007; Meyers & Shanley, 1990).

En 1866, Alfred Nobel realizó un avance importante en la industria de los explosivos inventando la dinamita, la cual se obtuvo mezclando nitroglicerina con absorbentes inertes (diatomita), obteniendo como resultado, un alto explosivo sumamente estable (resistente a cambios de temperaturas, impactos, fuego, etc.). Otro gran aporte de Nobel fue la invención

de un detonador que emplea un explosivo primario que explota al interior de la dinamita para causar una detonación secundaria de mayor potencia. Este invento revolucionó nuevamente la industria de la minería, construcción, demolición y bélica, puesto que por primera vez se contaba con un explosivo de alta potencia capaz de fracturar rocas fácilmente y que fuera extremadamente estable y fácil de utilizar. Este invento lo convirtió en alguien inmensamente rico. Antes de que Nobel falleciera, instituyó con su fortuna, un fondo con el que se premiaría a los mejores exponentes en la literatura, fisiología, física, química y de paz (Abrams, 2001).

Cuando una detonación ocurre, el explosivo se descompone violentamente, a medida que la reacción libera calor y los reactivos se transforman en gases altamente presurizados. La rápida expansión de los gases resulta en generación de ondas de choque que se expanden a través de un medio como el aire e impactan posteriormente a las estructuras.

Los alto-explosivos son compuestos o mezclas metaestables que pueden reaccionar rápidamente para generar productos gaseosos a alta temperatura y presión. La expansión de estos productos es el mecanismo por el cual los explosivos pueden generar daños importantes en estructuras al punto de provocar colapsos (Dobratz, 1972). La combustión de un alto-explosivo usualmente involucra dos procesos: La detonación y la postcombustión. La detonación es un proceso químico híper rápido que involucra la reacción de los propios componentes del alto-explosivo (Hernández, et al., 2016). La velocidad a la cual se propaga la reacción inicial puede llegar a alcanzar valores de 1500 a 9000 [m/s] (Smith & Hetherington, 1994) y los tiempos de escala en que se produce la detonación es del orden de microsegundos. La postcombustión es un proceso químico complejo que se genera por la oxidación de los productos aún inflamables que quedan después del proceso de detonación, liberando energía adicional (Edri, et al., 2012). A diferencia de la detonación, las reacciones de postcombustión son relativamente lentas correspondiendo a procesos de deflagración, es decir, explosiones cuya velocidad de reacción es menor que la velocidad del medio, ocurriendo, además, en una escala de tiempo de milisegundos (Hernández, et al., 2016).

Cuando se produce una explosión en espacios abiertos, la temperatura y presión disminuye rápidamente en función de la distancia que recorre la onda de choque (Edri, et al., 2013), por lo tanto, la liberación de energía extra no es significativa en términos de aumentar las ondas de presión. En cambio, cuando una explosión ocurre en una habitación confinada o parcialmente confinada, es decir con pocas o nulas aberturas, se genera una sobrepresión en las paredes, las cuales pueden ser descritas por dos componentes: un tren de ondas de choque y una componente de presión de gas (Hernández, et al., 2016). Bajo estas condiciones, el volumen de gas en expansión se presuriza debido a las condiciones de confinamiento en que se encuentra. Esto genera una componente de presión de gas de larga duración (que se asocia a un gran impulso, o un incremento del área bajo la curva de presión/tiempo actuante en la estructura), y además a una alta temperatura residual que decae de forma lenta y afecta consecuentemente a la estructura (Edri, et al., 2012).

La sobrepresión generada por el tren de ondas de choque dentro de un espacio totalmente confinado decae rápidamente, mientras que la componente de presión de gas alcanza un valor residual que permanece constante (presión cuasi-estática o residual). La presión cuasi-estática no se ve alterada por el tren de ondas de choque, y se relaciona a un equilibrio termodinámico del gas residual que se describe por un estado final (definido por

la presión, temperatura y concentración) que es invariante en el volumen de la cámara. Por lo tanto, la presión cuasi-estática se puede obtener de un balance termodinámico.

Cabe mencionar que en la práctica habitual, se obtiene la presión cuasi-estática a través de ecuaciones simplificadas que consideran una carga de explosivo equivalente a TNT en función del calor de combustión, el calor de detonación y la densidad de carga del alto-explosivo (UFC 3-340-02, 2008), siendo esta estimación adecuada para altos-explosivos que poseen un comportamiento similar al TNT, pero que podrían presentar serias diferencias en el caso que la post-combustión sea significativamente distinta a la observada en este alto-explosivo.

La energía de postcombustión afecta levemente al tren de ondas de choque modificando los tiempos de llegada de los pulsos reflejados y alterando ligeramente la magnitud de estos (Hernández, et al., 2016). Esta liberación extra de energía incrementa la presión cuasi-estática que se alcanza en la habitación, lo que significa que en caso de ignorarla implicaría subestimaciones significativas de la componente de presión de gas que actúa sobre una estructura, en la medida que la energía liberada en el proceso de postcombustión sea comparable con la liberada durante el proceso de detonación.

Actualmente, existen softwares especializados basados en elementos finitos fluidodinámicos (CFD - Computational Fluid Dynamics) que permiten modelar los gases de la detonación del alto-explosivo, la interacción de éste con el aire, líquidos y estructuras que pudieran encontrarse en el interior de la habitación, donde ecuaciones de estado para cada uno de los gases son utilizadas de forma separada. Para el caso de los productos de altos-explosivos, la ecuación de estado que comúnmente se utiliza es la Jones-Wilkins-Lee (JWL), la cual no incluye el proceso de postcombustión. Por otra parte, la postcombustión es modelada en forma adicional y externa a la ecuación de estado, incorporándola como energía interna adicional liberada durante el proceso, la cual es incluida gradualmente en el tiempo y cuyo valor debe ser definido por el usuario.

La motivación de este trabajo consiste en determinar valores apropiados de la energía adicional específica de postcombustión que se deben utilizar en el software comercial ANSYS AUTODYN (ANSYS Inc., 2016) con el fin de obtener modelaciones más confiables de la presión cuasi-estática de explosiones que ocurren en habitaciones rígidas y totalmente confinadas, para distintos tipos de altos-explosivos.

## 1.2 Objetivos

### 1.2.1 Objetivos generales

Determinar curvas de energía de postcombustión necesaria para realizar una correcta modelación de la explosión de un alto-explosivo en un espacio confinado utilizando el software AUTODYN (ANSYS Inc., 2016).

### 1.2.2 Objetivos específicos

1. Recopilar propiedades termodinámicas de distintos tipos de alto-explosivos.
2. Determinar curvas de presión cuasi-estática versus densidad de carga explosiva, para distintos tipos de alto-explosivos empleando un equilibrio termodinámico simplificado.

3. Establecer curvas de energía de postcombustión que deben ser empleadas en el software AUTODYN para distintos tipos de alto-explosivos según la densidad de carga de explosivo en la habitación y así conseguir una correcta modelación de la presión cuasi-estática que se observa como estado residual de una explosión totalmente confinada.

### 1.3 Metodología

Con el propósito de lograr los objetivos anteriormente planteados, se aplica la siguiente metodología:

1. Recopilación bibliográfica de estudios que determinen empíricamente la presión cuasi-estática versus la densidad de carga de explosivo, para distintos tipos de altos-explosivos.
2. Elaboración de curvas de presión cuasi-estática versus densidad de carga, para lo cual se hace uso de un modelo termodinámico simplificado, en donde se recopilan parámetros termoquímicos de distintos altos-explosivos tales como: energía de detonación, energía de postcombustión, densidad de masa, estequiometría y masa molecular. Además, se recopilan las reacciones químicas involucradas en la explosión y las propiedades termodinámicas de cada subproducto generado.
3. Comparación de los resultados obtenidos por el modelo termodinámico simplificado con respecto a resultados empíricos, en el caso de que se llegase a contar con esta información.
4. Generación de la curva de presión cuasi-estática versus densidad de carga de explosivo, sin considerar el efecto de postcombustión que se genera en una explosión confinada. Para ello se modelarán explosiones totalmente confinadas dentro de una cámara rígida en el software AUTODYN (ANSYS Inc., 2016).
5. Una vez que se atenúan significativamente las ondas de choque, se determina mediante un supuesto de que el aire se comporta isentrópicamente, la energía de postcombustión que se debe emplear en el software AUTODYN según la metodología descrita por Hernández et al., (2016), con el fin de lograr las presiones cuasi-estáticas que se obtienen en el modelo termodinámico simplificado. Se generan las curvas para distintos explosivos en función de la densidad de carga y se verifica que la energía adicional incorporada propuesta por dicha metodología reproduzca la presión cuasi-estática deseada en AUTODYN.

### 1.4 Estructura y organización de la Memoria

Además del presente capítulo que incorpora la introducción y los objetivos del trabajo realizado, la presente memoria se compone de 4 capítulos adicionales, los cuales se distribuyen de la siguiente forma:

En el **Capítulo 2, Explosiones y cargas en espacios confinados**, una introducción a los tipos de explosivos y tipos de cargas dinámicas que estas generan es estudiada, con el objetivo de comprender el fenómeno físico y químico de las explosiones de altos-explosivos.

En el **Capítulo 3, Curvas de presión cuasi-estática en espacios confinados**, se generan las curvas de presión cuasi-estática para distintos explosivos (57 en total), los cuales son

elaborados mediante un modelo termodinámico simplificado, que incorpora las reacciones de detonación y postcombustión a las que están sujetas distintos tipos de altos-explosivos.

En el **Capítulo 4, Curvas de energía de postcombustión ajustadas para análisis en AUTODYN**, se generan curvas de energía adicional de postcombustión para distintos valores de densidad de carga de un alto-explosivo. Con ello se determina la energía de postcombustión que se debe emplear en el software ANSYS AUTODYN (ANSYS Inc., 2016) para modelar correctamente la presión cuasi-estática que genera una explosión totalmente confinada.

En el **Capítulo 5, Conclusiones**, se señalan las implicancias del trabajo realizado, el resumen de los principales supuestos utilizados durante el desarrollo de la memoria y un análisis concluyente de los resultados.

# Capítulo 2. Explosiones y cargas en espacios confinados

Con el objetivo de comprender el fenómeno físico y químico que involucra una explosión totalmente confinada, una revisión sobre la clasificación y tipos de explosivos es abordada en este capítulo. También se describen los tipos de cargas que se generan en una explosión, dependiendo si éstas ocurren en el interior de una estructura (explosiones confinadas) o en su exterior (explosiones no confinadas).

## 2.1 Explosivos

Los explosivos son sustancias reactivas capaces de contener una gran cantidad de energía interna, la cual, al momento de desencadenarse, generan una explosión que usualmente es acompañada por la producción de luz, calor, sonido y presión.

Los explosivos químicos, son sustancias sólidas o líquidas, puras o mezcladas, las cuales se encuentran en un estado metaestable, y son capaces de experimentar una rápida reacción química sin la necesidad de participación de reactantes externos (Meyer, et al., 2007) . La reacción de un explosivo puede ser iniciada mediante medios mecánicos, tales como impactos, fricción, por medio de calor, o por choques detonantes (es decir, por medio presiones generadas por otro explosivo).

La resistencia del estado metaestable a reaccionar se llama *Estabilidad*. Esto consiste en la habilidad de un explosivo de poder ser almacenado sin ser igniciado. La estabilidad de un explosivo se relaciona a la composición química, la temperatura de almacenaje, la exposición al sol o la presión externa a la que está sometido. La facilidad con la cual la reacción química puede ser iniciada se conoce como *Sensibilidad*. La sensibilidad de un explosivo al calor, estrés mecánico, impactos, choques, fricción o al impacto de una detonación, determina la maniobrabilidad y aplicación potencial de un explosivo, donde el uso de aditivos, parafinas y aceites pueden disminuir la sensibilidad a acciones mecánicas.

Un explosivo puede reaccionar con una tasa de propagación de la combustión dentro del propio material más lento que la velocidad de propagación de ondas mecánicas (velocidad del sonido), cuyo proceso se conoce como *Deflagración*, o puede propagarse a una velocidad mayor a la del sonido, lo cual se conoce como *Detonación*.

### 2.1.1 Balance de Oxígeno

Una de las variables más importantes de estudio para el desarrollo de esta memoria, corresponde al balance de oxígeno (*BO* o  $\Omega$ ), el cual corresponde a una expresión que se usa para indicar el grado de oxidación que puede alcanzar un explosivo (Zou, 2017). El balance de oxígeno representa la cantidad de oxígeno expresada en porcentaje de peso, que establece la razón entre el oxígeno contenido en el alto-explosivo y el oxígeno requerido para llevar la combustión completa de todo el material inflamable contenido en él; es decir, el oxígeno necesario para generar productos estables de la combustión tales como  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $SO_2$ ,  $Al_2O_3$  (Meyer, et al., 2007).

Un valor positivo de balance de oxígeno significa que el explosivo posee oxígeno más que suficiente en su composición para completar la combustión durante el proceso de detonación, mientras que un valor negativo, significa que el explosivo es deficiente en oxígeno, y por lo tanto la combustión se completará posterior a la reacción de detonación a través de un proceso llamado postcombustión, que se produce cuando los productos aún inflamables de la reacción de detonación interactúan con el oxígeno circundante. Por ejemplo, el TNT ( $C_7H_5N_3O_6$ ) tiene un balance de oxígeno de un -74.0%, lo que significa que por cada kilogramo de TNT que detona, se necesitarán 0.74 [kg] de  $O_2$  proveniente del aire circundante, para completar la combustión. El nitrato de amonio ( $NH_4NO_3$ ) en cambio, tiene un balance de oxígeno de +20%. Esto significa que cuando el compuesto reaccione, 20% de los productos de la detonación corresponden a oxígeno liberado a la atmósfera y por tanto no existirá una postcombustión.

Para los explosivos de tipo  $C_aH_bO_cN_d$ , el balance de oxígeno es formulado de la siguiente forma:

$$\Omega = \frac{\left[ c - \left( 2a + \frac{b}{2} \right) \right] \cdot MW_o}{MW_{HE}} \quad (2.1)$$

Mientras que para los explosivos de tipo  $C_aH_bO_cN_dF_eCl_f$ , el balance de oxígeno se expresa como:

$$\Omega = \frac{\left[ c - \left( 2a + \frac{b - (e + f)}{2} \right) \right] \cdot MW_o}{MW_{HE}} \quad (2.2)$$

Donde  $MW_{HE}$  es la masa molecular del alto-explosivo,  $MW_o$  corresponde a la masa atómica del oxígeno, igual a 16 [g/mol],  $a$  es el número de moles de carbono,  $b$  es el número de moles de hidrógeno,  $c$  es el número de moles de oxígeno,  $d$  es el número de moles de nitrógeno,  $e$  es el número de moles de flúor y  $f$  es el número de moles de cloro del alto-explosivo según su estequiometría.

Con el fin de asegurar una mínima cantidad de gases tóxicos sean liberados, tales como monóxido de carbono, usualmente los explosivos comerciales tienden a tener valores de balance de oxígeno cercanos a 0 (Meyer, et al., 2007).

### 2.1.2 Clasificación por velocidad de descomposición

La *Combustión* es un término utilizado para describir la reacción de oxidación, que se genera entre una sustancia y oxígeno, el cual puede estar tanto dentro del compuesto mismo o en el medio circundante (Akhavan, 2011; Smith & Hetherington, 1994). La reacción, puede ser muy rápida y altamente exotérmica, siendo usualmente acompañada de una flama.

La combustión de un explosivo se define como un proceso auto sostenible, exotérmico y altamente oxidante (Akhavan, 2011), el cual implica muchos pasos que dependen de las

propiedades de las sustancias combustibles. A bajas temperaturas, la oxidación de materiales combustibles puede ocurrir muy lentamente, sin la presencia de una llama. Cuando se eleva la temperatura, como por ejemplo mediante la aplicación de calor externo, se aumenta la tasa de reacción. Si la temperatura de los reactivos se eleva por encima de su temperatura de ignición, el calor generado será mayor que el calor perdido en el medio circundante y se observará una llama. Dependiendo de la tasa en que el explosivo reaccione, se distinguen 2 tipos de combustión.

### Deflagración

Una sustancia clasifica como explosivo deflagrante cuando una pequeña cantidad de él en condiciones no confinadas comienza repentinamente a reaccionar cuando es sujeta a una flama, chispa eléctrica, golpe, fricción o alta temperatura. La zona que rodea a la explosión inicial comienza a aumentar su temperatura debido a la energía que se libera en el punto de origen de ignición. Esta transferencia de calor permite que el material inflamable alcance su punto de combustión, liberando más energía al sistema y propagando la flama. Por lo tanto, el fenómeno de la combustión por deflagración es basado en reacciones térmicas. Usualmente los materiales que se descomponen a tasas menores a la velocidad del sonido corresponden a explosivos deflagrantes.

Una combustión deflagrante se caracteriza por tener una tasa de reacción que depende altamente de su medio externo, como presión o temperatura; por ejemplo, explosivos deflagrantes con un mayor confinamiento exhibirán una mayor tasa de combustión.

Compuestos químicos tales como propulsores exhiben este tipo de mecanismo de combustión.

Cabe mencionar que una deflagración se presenta en la combustión de gases como hidrocarburos, pólvora, polvos metálicos u orgánicos en suspensión, etc. La tasa de combustión depende de la velocidad de propagación de la flama la cual suele ser del orden de 8 [m/s] para gases inflamables generados por la mezcla de oxígeno e hidrocarburos. La velocidad de propagación de la flama puede verse incrementada por la turbulencia que se pudiese generar en ésta a medida que se propaga la combustión, la cual puede ser ocasionada por condiciones geométricas (ej. ductos) o por la presencia de obstáculos. De esta forma, una deflagración puede transitar a una detonación si las condiciones de turbulencia incrementan de tal forma, que la velocidad a la que se propaga la combustión, supera la velocidad del sonido, generando como consecuencia niveles altísimos de sobrepresión.

### Detonación

La detonación, es una reacción química en la cual el explosivo alcanza un alto gradiente de presión y temperatura, generándose con ello, un frente de ondas de choque. Este proceso de descomposición se caracteriza por ser desencadenado mediante ondas de choque (provenientes del mismo o de otro explosivo), en vez de los típicos mecanismos térmicos que se generan en una deflagración. La tasa en la cual se descompone un explosivo depende mucho de la velocidad en que la onda choque es propagada a través del material, alcanzando valores de propagación de un orden de entre 1500 a 9000 [m/s] (Meyer, et al., 2007).



### 2.1.3 Clasificación de explosivos por estabilidad

Los explosivos son también clasificados según su uso y comportamiento, en donde tres grupos son los que dividen a los explosivos según su estabilidad:

#### Explosivos Primarios

Los explosivos primarios o también conocidos como altos-explosivos primarios, difieren de los explosivos secundarios, debido a que experimentan una transición muy rápida de la combustión a la detonación, teniendo la capacidad de transmitir la detonación a explosivos menos sensibles. Los explosivos primarios detonan cuando están expuestos al calor, impactos o golpes eléctricos.

Los explosivos primarios son muy sensitivos y por lo tanto proclives a detonar fácilmente ante un pequeño estímulo (llama, fricción, impacto, choque, corriente, descarga eléctrica, radiación), por lo cual se usan principalmente como detonadores (iniciadores de una explosión). Es decir, no se emplean como el explosivo principal debido a que son delicados en su transporte y manipulación y, por lo tanto, solo se manejan en pequeñas cantidades. En condiciones adecuadas de aislación, pueden ser empleados como detonadores de explosivos secundarios. Es decir, una pequeña cantidad de explosivo primario se inserta dentro de un explosivo secundario. En general, a través de una chispa eléctrica se detona el explosivo primario (detonador), para que luego este active (o detone) al explosivo secundario circundante. Cabe mencionar, que a consecuencia de esto es que los detonadores presentan pequeñas fracciones de explosivo primario el cual está fuertemente aislado del ambiente.

En la detonación, las moléculas en el explosivo se disocian y liberan una gran cantidad de energía. Esto, a su vez, genera un segundo explosivo más estable. Por estas razones los explosivos primarios, se utilizan como dispositivos de iniciación.

Los explosivos primarios difieren considerablemente en su sensibilidad al calor y en el monto de energía interna que liberan cuando se detonan. Alcanzando velocidades de detonación entre los 3500 y 5000 [m/s]. Los explosivos primarios más usados son el azida de plomo, estifnato de plomo, LMNR, KDNBF y estifnato de bario.

#### Explosivos Secundarios

Los explosivos secundarios, o también llamados altos-explosivos secundarios, difieren de los explosivos primarios debido a que no pueden detonar fácilmente con calor o golpes mecánicos y son generalmente más poderosos que los explosivos primarios. Los explosivos secundarios son menos sensibles y solo pueden ser detonados por la onda de choque producida por la explosión de un explosivo primario. De forma casi instantánea a la detonación del compuesto, éste se disocia en productos más estables.

Ejemplos de explosivos secundarios son el TNT, Tetryl, Nitrocelulosa (NC), Nitroglicerina (NG), RDX, HMX, TATB, y las mezclas que se pudieran generar entre estos.

#### Propulsores

Los propulsores son materiales combustibles que contienen dentro de sí el oxígeno necesario para su combustión, es decir, tienen un balance de oxígeno positivo. Los propulsores solo se queman y no explotan. Por lo general, la combustión se produce de forma bastante violenta y va acompañada de una llama o chispas y un silbido o crujido, pero no por

un golpe fuerte y agudo como en el caso de los explosivos detonantes. Los propulsores pueden iniciarse mediante una llama o chispa, y cambiar de un estado sólido a uno gaseoso de forma relativamente lenta, es decir, en cuestión de milisegundos (deflagraciones). Ejemplos de propulsores son la pólvora negra, explosivos de voladura y explosivos de nitrato de amonio, que no contienen nitroglicerina u otros compuestos aromáticos.

A modo de resumen, en la Figura 2-1, se entrega un esquema conceptual de la clasificación de explosivos por estabilidad.

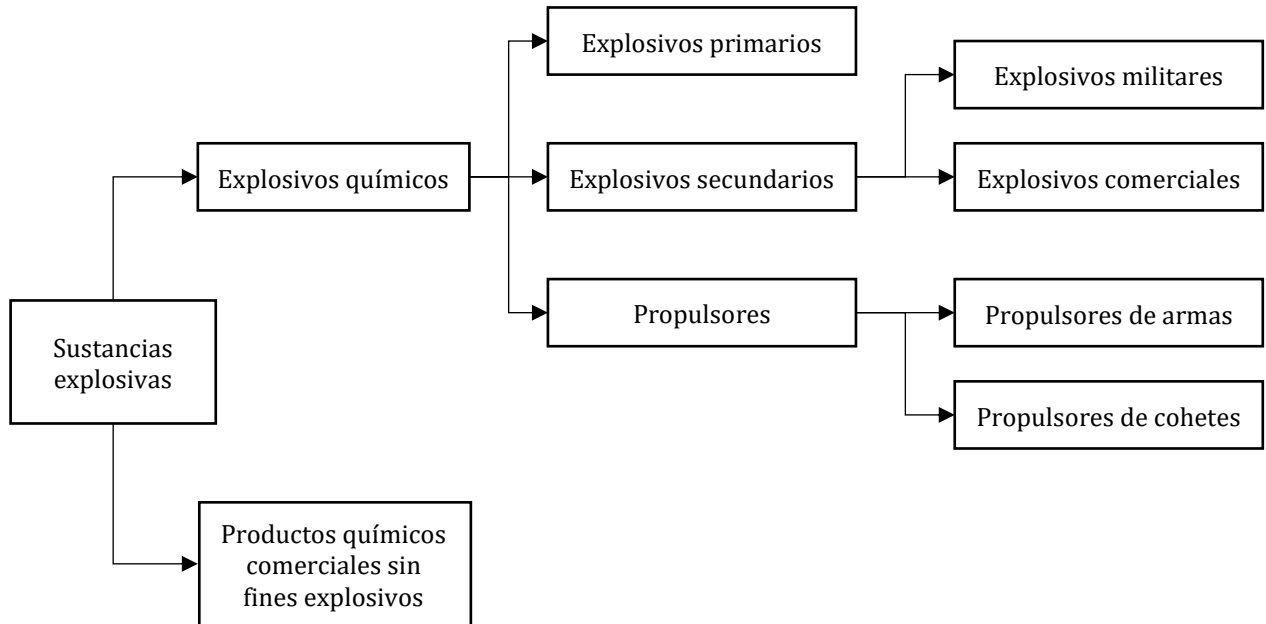


Figura 2-1: Clasificación de las sustancias explosivas por estabilidad. Fuente: Akhavan (2011).

#### 2.1.4 Clasificación según forma de uso

Usualmente, la mayoría de los explosivos en forma pura requiere modificaciones en sus propiedades mecánicas para poder ser utilizadas. Por ello y con el fin de cambiar o mejorar sus capacidades mecánicas y de sensibilidad, los explosivos puros son mezclados con otros explosivos o con materias inertes (Cooper, 1996). El resultado de estas mezclas permite que un mismo explosivo sea usado de diversas formas específicas, según la necesidad y fin.

##### Prensados

Esta forma de uso consiste en formar pellets de explosivos, los cuales son comprimidos. Si el explosivo resulta ser menos sensible a la fricción del comprimido, se enlata o encartucha, si no, un aglutinante y aditivos antifricción son incorporados y mezclados con el compuesto. Ello permite reducir la sensibilidad en el prensado.

##### Fundidos

Esta forma de uso consiste en que, dentro de una mezcla, al menos uno de los componentes explosivos es derretido a una temperatura en que la manipulación del resto de los explosivos es segura, para luego verter la mezcla fundida a un molde o envase. Un ejemplo de un explosivo fundido es el TNT, en donde, debido a su balance de oxígeno negativo, oxidantes, nitratos y explosivos con balance de oxígeno positivo son agregados a la mezcla.

La mayoría de estos explosivos son mecanizables, sin embargo, su maquinabilidad no resulta ser tan buena como la de los PBXs (Cooper, 1996).

Algunos explosivos fundibles son Amatol, Baratol, Boracitol, Comp B, Cyclotol, Octol y Pentolite.

### Polímero-aglutinados

Los explosivos polímero aglutinados, o plástico aglutinados son explosivos en polvo a los cuales un aglutinante plástico se les ha añadido. Mezclados cuidadosamente, son prensados a una temperatura por sobre los 120°C. Ello permite alcanzar grandes densidades para el explosivo, de un orden de un 97% de la densidad teórica máxima. Con este proceso el explosivo logra tener muy buenas propiedades de mecanizado (Cooper, 1996).

La mayoría de los explosivos de este tipo, están compuesto por RDX, HMX y TATB, donde se pueden reconocer por nombres como LX y PBX en sus siglas iniciales.

### Masilla

Las masillas son mezclas de polvo fino de RDX con plastificantes. Esta mezcla puede ser moldeada con la mano en la forma deseada, conservando su forma tal como si fuera una arcilla.

Explosivos de este tipo son el C-4, el compuesto C, PE-4 y Semtex.

### Engomados

Mezclas de RDX o PETN con cauchos sintéticos o naturales y plastificantes son enrolladas en láminas planas de material sólido, pero flexible. Las láminas son capaces de mantener su estabilidad y son muy fáciles de manipular, pudiendo ser cortadas y adheridas a alguna superficie deseada. El producto comercial más conocido de este tipo de explosivos es el *Detasheet* (Cooper, 1996).

### Extruíbles

Mezclas de PETN con Sylgard 182 (silicona de caucho) y un agente de curado, en proporciones de 80% PETN y 20% goma, permiten generar un líquido viscoso, el cual puede ser extruido en agujeros, grietas o canales. Posterior a ello, el explosivo puede ser polimerizado y curado con el incremento de la temperatura, dejando un material resistente como si fuera de goma. Algunos de estos explosivos son el LX-13, XTX-8003 y XTX-8004 (Cooper, 1996).

### Binarios

Estos explosivos consisten en dos materiales almacenados y enviados en paquetes separados. Cada material es considerado no-explosivo hasta que es mezclado en el sitio de uso. Posterior a su mezcla, los productos forman un líquido, una lechada o un polvo húmedo (Cooper, 1996).

### Agentes de voladura

Los agentes de voladura se definen como cualquier material o mezcla, consistente de un combustible y un oxidante destinado a voladura, en la cual ninguno de los agentes clasifica como explosivo por sí solo. Estas mezclas se caracterizan por ser no detonables por una tapa

explosiva (detonador, usualmente hecho con explosivos primarios). Este tipo de explosivos son de muy baja sensibilidad, y, por tanto, el proceso de ignición debe ser iniciado por medio de un *booster* (Cooper, 1996).

Los agentes de voladura son principalmente mezclas de nitrato de amonio (AN) y combustible, donde el más usado es el aceite combustible (FO). Los explosivos más conocidos de este tipo son los ANFO (Cooper, 1996; Meyer, et al., 2007).

### Lechadas y geles acuosos

Las lechadas corresponden a una solución híper concentrada de nitrato de amonio en agua junto con combustible (comúnmente polvo de aluminio) y un sensibilizador (polvo de TNT o PETN), las cuales posteriormente son espesadas con gelatinas, goma de guar y plásticos polimerizables solubles en agua. Ello permite conseguir una mezcla gelatinosa y densa, la cual es empaquetada en cartuchos tal como si fuese dinamita. Es un explosivo que se usa en grandes cantidades, pudiendo ser manufacturado en el sitio de uso (Cooper, 1996).

### Dinamitas

Las dinamitas consisten en la preparación de cargas explosivas que contienen nitroglicerina, un alto-explosivo muy sensible a la detonación por golpes. Mediante la absorción de este compuesto por un medio poroso, se suprime esta sensibilidad, permitiendo que el explosivo sea manejable. Estos aditivos, además, tienen la propiedad de proveer resistencia al agua en algunos casos, y la habilidad de ajustar la densidad y balance de oxígeno del explosivo (Cooper, 1996; Meyer, et al., 2007).

## 2.2 Explosiones

Una explosión ocurre cuando una gran cantidad de energía es liberada de forma repentina. Esta energía puede provenir de diversas fuentes, tales como vapor a presión, producto de una reacción química, o de una reacción nuclear. La liberación de energía durante una explosión puede manifestarse de diversas formas: generación de ondas de choque, propulsión de escombros, liberación de energía térmica y radiación (Akhavan, 2011)

Las explosiones pueden dividirse en tres grupos, dependiendo del fenómeno que provoca esta liberación abrupta de energía, pudiendo ser eventos físicos, tales como erupción de volcanes, eventos químicos, tal como la detonación de un alto-explosivo, o nucleares, tales como el uso de la bomba atómica (Smith & Hetherington, 1994).

Una explosión física, consiste en una rápida transformación de un estado físico en la materia, tal como podría ser un rápido cambio de presión de un contenedor, o un abrupto cambio de temperatura. Una explosión química, involucra una rápida oxidación de los elementos combustibles, los cuales están contenidos dentro de la composición del explosivo. Cuando una explosión ocurre, el explosivo químico se descompone violentamente, a medida que la reacción libera calor y los reactivos se transforman en gas. La rápida expansión de los gases resulta en generación de ondas de choque que se expanden a través de un medio como el aire e impactan posteriormente a las estructuras (Edri, et al., 2012; Hernández, et al., 2016; Smith & Hetherington, 1994).

Las cargas generadas por una explosión que afecta a una estructura pueden ser categorizada en dos grupos: explosiones confinadas y no confinadas, en donde cada grupo es subdividido, basado en la carga producida sobre una estructura.

### 2.2.1 Explosiones no confinadas

#### Explosión en campo libre.

Una explosión en campo libre ocurre adyacente y por sobre la estructura produce una onda de choque que se propaga esféricamente desde el punto de detonación, golpeando la estructura directamente, sin una reflexión intermedia que afecte la onda. En la

Figura 2-2: Esquema de una ráfaga de aire libre. Fuente: UFC 3-340-02 .

, se entrega un esquema.

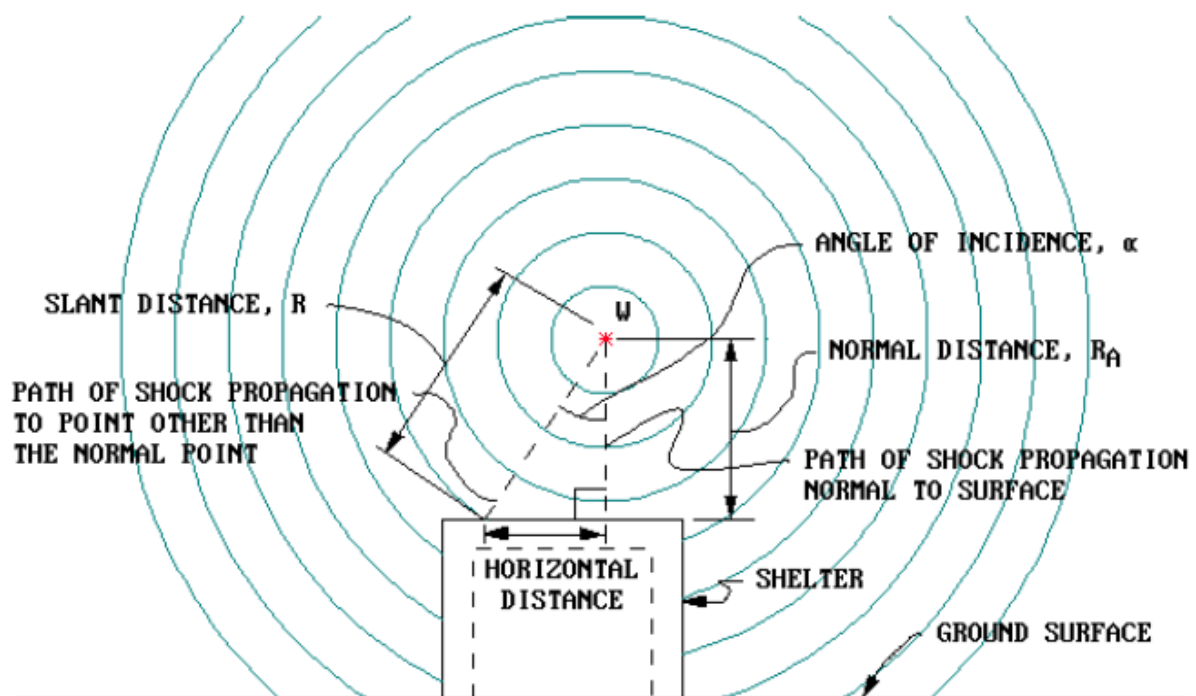


Figura 2-2: Esquema de una ráfaga de aire libre. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).

#### Explosión de ráfaga

Una ráfaga de aire se produce cuando la detonación ocurre sobre la superficie del suelo a una distancia tal de la estructura, que la onda de choque que se propaga primero impacta la superficie del terreno antes de llegar a la estructura. A consecuencia de ello, un frente de ondas de ráfaga se genera, el cual es formado por la superposición entre la onda incidente y la onda reflejada en la superficie del suelo. En la

Figura 2-3: Esquema de una ráfaga de aire. Fuente: UFC 3-340-02 .

, se entrega un esquema de este tipo de explosiones. Cabe mencionar que el frente de ráfagas genera una sobrepresión mayor que la onda de choque generada por una explosión en campo libre.

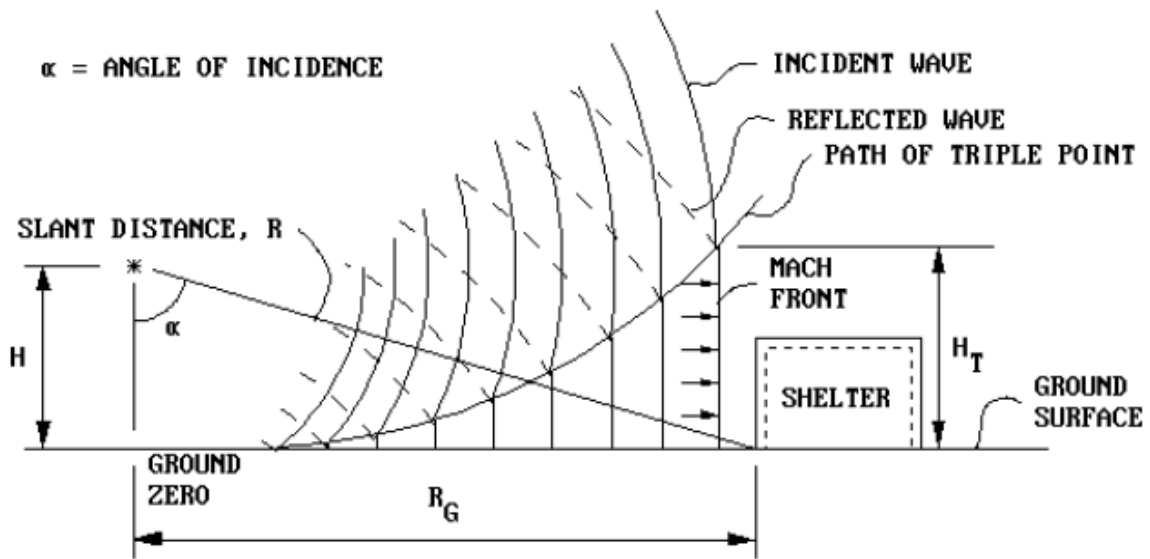


Figura 2-3: Esquema de una ráfaga de aire. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).

Ráfaga superficial.

Una carga explosiva detonada en la superficie del suelo es instantáneamente reflejada. Por lo tanto, la onda de choque es amplificada automáticamente al ser reflejada en la superficie del terreno. Este tipo de explosión difiere del anterior, debido a que la onda reflejada se superpone con la onda incidente en el punto de detonación, formando una única onda de choque que se propaga semiesféricamente (que tiene una presión aproximadamente igual al doble que una onda de choque propagada en campo libre, si se ignora que parte de la onda no es reflejada en la superficie). En la Figura 2-4 se entrega un esquema de este tipo de explosiones.

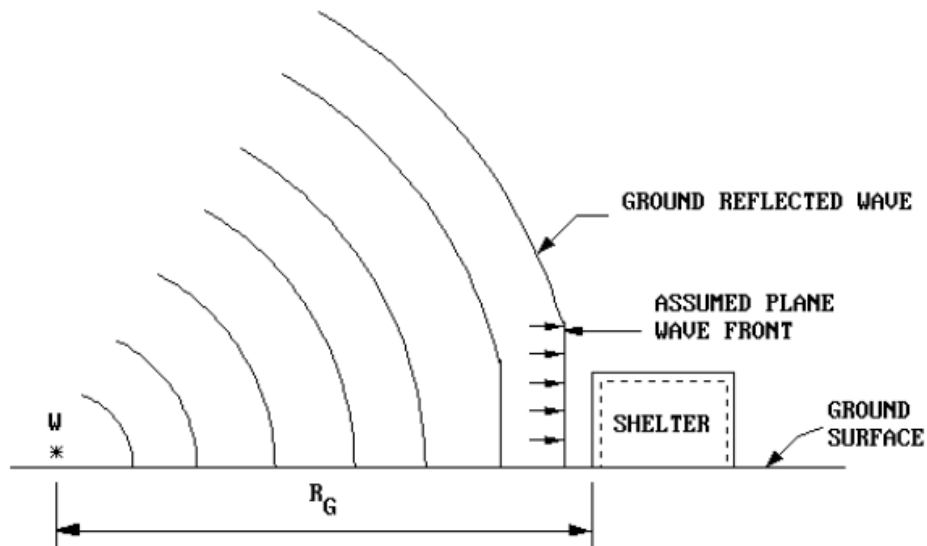


Figura 2-4: Esquema de una ráfaga superficial. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).

## 2.2.2 Explosiones confinadas

### Efectos del confinamiento

Cuando una explosión ocurre al interior de una estructura, el peak de presiones asociadas con la frente de choque inicial, puede ser extremadamente alto, siendo posteriormente amplificado por las reflexiones dentro de la estructura. Dependiendo del grado de confinamiento, los efectos de las altas temperaturas y la acumulación de gases residuales de la explosión ejercerán presiones adicionales e incrementarán la duración de la presión dentro de la estructura. Por esto, la incorporación de ventilaciones adecuadas en la estructura puede resultar beneficioso, pues permite reducir las magnitudes de duración de las cargas dinámicas generadas.

Las explosiones confinadas se clasifican en 3 tipos.

### Explosión completamente ventilada (Figura 2-6 a)

Una explosión totalmente ventilada se produce, cuando una o más superficies dentro de un cubículo o habitación están completamente abiertas a la atmósfera. La onda inicial se amplifica mediante la reflexión de ésta en las paredes de la estructura, pero los productos de la detonación se expulsan totalmente a la atmósfera, formando una onda de choque que se propaga fuera de la estructura. En este caso se puede ignorar el efecto de sobrepresión de gas que se genera debido a que los gases se expanden son liberados rápidamente hacia el exterior.

### Explosión parcialmente confinada (Figura 2-6 b)

Se produce una explosión parcialmente confinada dentro de una habitación, cuando esta tiene un limitado tamaño de aberturas y/o superficies frangibles (que se abren rápidamente). La presión interna, que es amplificada por las paredes de la estructura y los gases generados en la detonación, se libera a la atmósfera después de un periodo finito de tiempo, el cual depende del proceso de ventilación. El confinamiento parcial de los productos de la explosión, que consisten en la acumulación de productos gaseosos a altas temperaturas, se genera de una presión de gas que será menor o igual a la presión cuasi-estática que es observada en explosiones totalmente confinadas. Esta presión tiene una larga duración en comparación con la presión del frente de ondas de choque.

Cabe mencionar que una explosión parcialmente confinada es modelada de forma similar a una explosión totalmente confinada (incluyendo el efecto de detonación y postcombustión), por lo que los valores de energía de postcombustión que son necesarios emplear en la modelación son exactamente los mismos que los necesarios para la modelación de una explosión totalmente confinada. Sin embargo, para modelar correctamente una modelación parcialmente confinada se hace necesario modelar correctamente el fenómeno de ventilación de gases que reduce paulatinamente la presión residual de gas.

Un ejemplo de presiones tiempo-historia es adjunto en la Figura 2-5 para explosiones semi-confinadas.

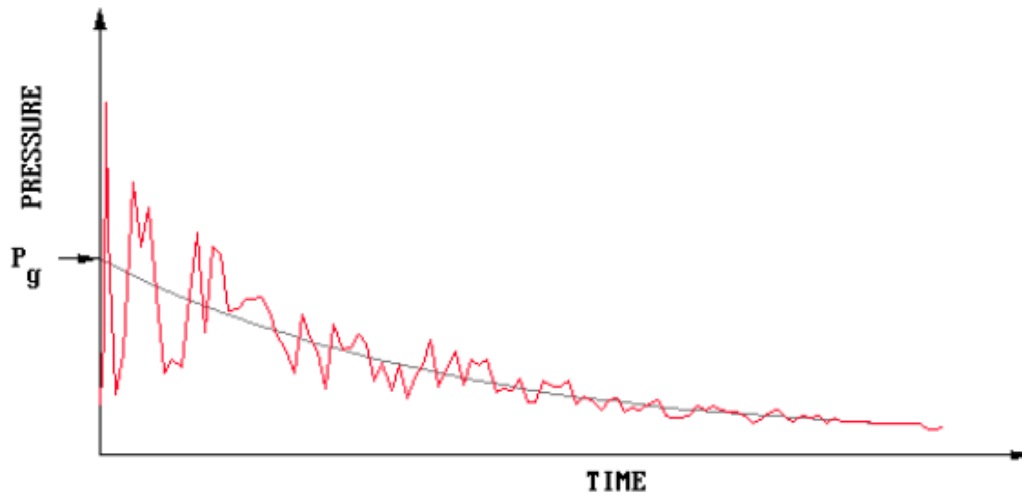
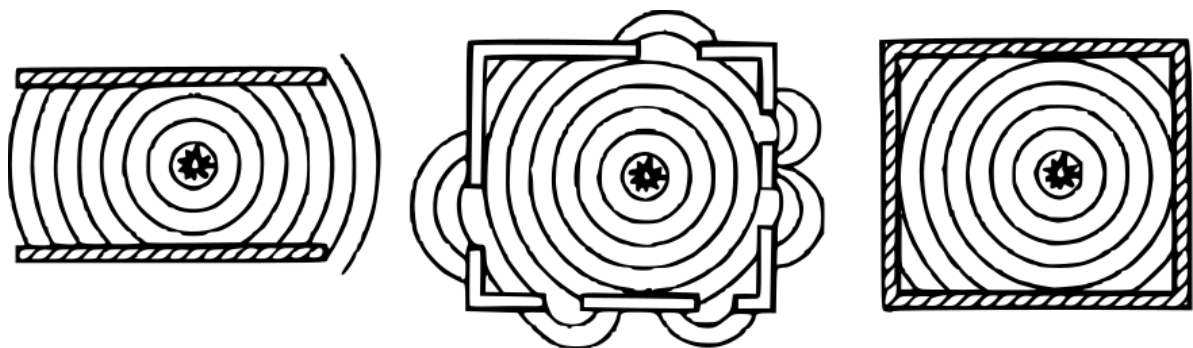


Figura 2-5 Tiempo-historia de una explosión parcialmente confinada. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).

Explosiones completamente confinadas (Figura 2-6 c)

El confinamiento completo de una explosión se asocia con la contención total de los gases generados. Las cargas internas de explosión consistirán en un tren de ondas choque, el cual no es ventilado y una presión de gas de muy larga duración (que alcanza un valor residual o cuasi-estático).

En la Figura 2-6 se entrega un esquema de los diferentes grados de confinamiento de una habitación a modo conceptual.



a) Totalmente ventilada      b) Parcialmente confinada      c) Totalmente confinada

Figura 2-6: Tipos de explosiones confinadas. Fuente: Koccaz, et al., (2008).

En la Tabla 2-1, se entrega a modo de resumen, las categorías de cargas en explosiones.



Tabla 2-1: Categoría de cargas en explosiones. Modificado de UFC 3-340-02 (2008).

Categorías de cargas en explosiones		
Confinamiento	Categoría	Presiones de carga
Explosiones no confinadas	Ráfaga de campo libre	No reflejada
	Ráfaga de aire	Reflejada
	Superficial	Reflejada
Explosiones confinadas	Totalmente ventilada	Tren de choque Fuga de presiones
	Parcialmente confinada	Tren de choque Presión de gas Fuga de presiones
	Totalmente confinada	Tren de choque Presión de gas

### 2.2.3 El proceso de Postcombustión dentro de cámaras confinadas

La *Postcombustión* es un proceso químico, que se origina cuando las condiciones del medio que rodea la detonación permiten que un explosivo siga oxidándose, liberando una cantidad de energía química extra que eleva las presiones de los gases almacenados.

Durante este proceso de detonación, el alto-explosivo reacciona casi de manera instantánea, donde un compuesto que está en fase sólida, rápidamente se expande, transformándose en un gas altamente presurizado y con gran temperatura. Esta combustión rápida permite generar una onda de choque, y en el caso que la detonación haya ocurrido en una cámara confinada, la onda será reflejada sucesivamente, generando un tren de ondas de choque.

Cuando un alto-explosivo se detona, los materiales que lo componen se oxidan y, dependiendo del oxígeno que contengan en su compuesto es que se puede producir una postcombustión (balance de oxígeno negativo). Un explosivo que presenta un balance de oxígeno positivo produce gases de combustión puros que suelen ser vapor de agua y dióxido de carbono. Mientras que, si hay un balance negativo, solo parte de estos productos será estable, quedando compuestos residuales que aún pueden seguir reaccionando (inflamables), tales como monóxido de carbono, hidrógeno en fase de gas o carbón.

El proceso de postcombustión consiste en la reacción de los compuestos que aún pueden liberar energía posterior a la detonación, y que reaccionan con el oxígeno que lo rodea, aumentando la energía total liberada por la explosión. Esta postcombustión se genera debido a la interacción entre los productos de la detonación y el oxígeno almacenados en una cámara parcial o totalmente confinada. Los gases, al no poder salir de la cámara (totalmente confinada), o saliendo de forma lenta (parcialmente confinada), hacen que en el interior se

conservar una elevada temperatura, propiciando las condiciones adecuadas para que gases como el  $CO$  o  $H_2$  se mezclen con el aire circundante y puedan reaccionar.

Debido a que el proceso de postcombustión en una reacción principalmente deflagrante, su principal mecanismo de iniciación es térmico, lo que explicaría el por qué no se presente en explosiones en ambientes abiertos, pues allí la temperatura del gas explosivo decae rápidamente en función de la distancia recorrida.

Los efectos que la postcombustión genera en explosiones confinadas, es el aumento de la presión residual existente, es decir, en el estado final de una explosión, y también leves modificaciones al tiempo de llegada del tren de ondas de choque (Hernández, et al., 2016). En consecuencia, para modelar este tipo de explosiones de una forma correcta, es necesaria la incorporación adecuada de su efecto, puesto que la respuesta estructural no solo depende del efecto de las ondas de choque, sino que también puede ser altamente afectada por la presión de gas.

### 2.3 Modelación de explosiones mediante el software AUTODYN

Basado en un continuo desarrollo desde 1986, el software AUTODYN (ANSYS Inc., 2016), es una herramienta que permite realizar análisis dinámicos a través de un método de diferencias finitas y de integración numérica explícita, y en consecuencia permite modelar de forma detallada y altamente no lineal la dinámica de fluidos, sólidos, gases y sus interacciones. Por lo tanto, AUTODYN es útil para determinar la respuesta de estructuras sujetas a cargas de corta duración tales como impactos o explosiones.

Un método explícito es el que no requiere la resolución de un sistema de ecuaciones no trivial a cada paso de tiempo, sino que la solución de cada elemento puede ser resuelta en forma individual. Los métodos explícitos suelen ser convergentes, pero no incondicionalmente, por lo que el paso de tiempo usado en el esquema de diferencias finitas debe ser menor que un cierto valor. En particular, en AUTODYN se debe emplear un paso de tiempo que es menor que el tiempo que demora una onda mecánica de compresión en propagarse a través del elemento finito de menor tamaño (en explosiones un 50% de este valor). Es decir, emplear pasos de tiempo del orden de microsegundos (dependiendo del tamaño del mallado). Una ventaja importante del método explícito es la resolución de las ecuaciones a nivel exclusivamente local, permitiendo el uso de algoritmos elemento por elemento, que facilitan el cálculo en paralelo y la modelación detallada de su comportamiento no-lineal. Un modelo explícito no requiere de iteraciones y puede incorporar fácilmente altas no-linealidades de los elementos modelados.

Una de las ventajas del uso de este programa, es que permite modelar materiales que sufren una gran deformación plástica y presentan eventualmente rotura. Debido a que dentro de un modelo se pueden utilizar diferentes algoritmos de solución, es posible modelar elementos sólidos mediante el uso de elementos Lagrangianos, y modelar fluidos mediante el uso de elementos Eulerianos (CFD, *Computational Fluid Dynamic elements*). Todo ello incorporando la interacción entre estos distintos tipos de elementos finitos.

El software AUTODYN está incorporado como un módulo en el programa ANSYS. De hecho, AUTODYN es el programa que por defecto emplea ANSYS Workbench para llevar a cabo análisis explícitos. Es decir, ANSYS Workbench emplea indirectamente AUTODYN para

resolver problemas asociados a impactos de elementos estructurales y para modelar la interacción de estructuras con fluidos.

En ANSYS Workbench no se tiene acceso a todas las características que presenta AUTODYN. Entre ellas, no se encuentra la modelación de altos-explosivos. De esta forma, se debe trabajar directamente en el módulo AUTODYN cuando se desea modelar explosiones. Por lo tanto, durante el desarrollo de este trabajo, se genera la geometría básica de las estructuras y su mallado en la plataforma de ANSYS Workbench 17.2 y luego se exporta al módulo AUTODYN donde se trabaja directamente para incluir la modelación del aire, los explosivos y sus interacciones.

# Capítulo 3. Curvas de presión cuasi-estática en espacios confinados

Con el objetivo de poder determinar las presiones residuales generadas por una explosión confinada, un modelo termodinámico simplificado es programado en MATLAB, basados en la metodología propuesta por Cooper (1996) y utilizada por Edri (2013). Este modelo, toma en consideración el equilibrio químico en conjunto con la energía liberada por un alto-explosivo, de manera de determinar la temperatura alcanzada dentro de la cámara, la cantidad de moles de cada producto generado en la reacción y la sobrepresión generada. Además, a modo comparativo, se calculan las presiones generadas utilizando la carga de TNT equivalente señalada por la UFC 3-340-02 (2008).

Las presiones cuasi-estáticas obtenidas utilizando el modelo termodinámico simplificado, serán posteriormente empleadas en el Capítulo 4 para determinar las curvas de energía de postcombustión adicional que deben ser incorporadas en AUTODYN, de manera que las presiones residuales se ajusten al valor determinado en este modelo termodinámico simplificado.

## 3.1 Modelo termodinámico de la presión de gas

Sea conocido el número de moles de un gas, el volumen que éste ocupa, y la temperatura a la que se encuentra, se puede obtener la presión de éste mediante el uso de ecuaciones de estado. En particular, la ecuación de estado de gas ideal se expresa como:

$$P = \frac{nRT}{V} \quad (3.1)$$

Donde,  $P$  es la presión del gas [kPa],  $n$  es el número de moles del gas encerrado,  $R$  es la constante de los gases ideales (igual a  $8.314472 \times 10^{-3}$  [kJ/mol K]),  $T$  corresponde a la temperatura del sistema en Kelvin, y  $V$  corresponde al volumen de la cámara que es ocupado por el gas [m<sup>3</sup>].

Cuando un explosivo reacciona, genera productos gaseosos y se rigen por la ecuación de estado de gas ideal (3.1) en la medida que los productos de la detonación hayan sido suficientemente expandidos. Si bien, existen mejores ecuaciones de estado que pudieran lidiar con este problema (mejorando la precisión), Cooper (1996) señala que dentro del rango entre 25 y 4000° C de temperatura, y presiones entre 1 y 100 atmósferas, los gases de la combustión se aproximan al comportamiento de un gas ideal.

Cuando los gases de la combustión de un alto-explosivo han sido suficientemente expandidos y mezclados con el aire circundante se puede suponer sin grandes errores que el gas remanente es una mezcla que se rige por la ecuación de estado de gas ideal. Esto permite establecer un equilibrio termodinámico en forma simplificada, estimado la composición de la mezcla final y realizar un balance que se condiga con la energía liberada durante la combustión del explosivo que puede ser parcial o total.

### 3.1.1 Balance de las ecuaciones de detonación y combustión

La existencia de diversos softwares de equilibrio termoquímico tales como *CHEETAH*, *BKW*, *RUBY*, *EXPLO5*, *TIGER*, etcétera, permiten calcular de forma precisa los productos y subproductos que se generan en las reacciones de detonación y combustión isocóricas (dentro de un volumen constante) de diversos altos-explosivos, propulsores y formulas pirotécnicas. Es decir, el equilibrio químico permite predecir el estado y composición final de la mezcla que resulta de la combustión de un producto dado, teniendo en cuenta que además los gases (como el aire) están almacenados en una cámara indeformable.

Sin embargo, los programas señalados tienen restricciones significativas para usuarios debido a políticas de seguridad y su alto costo, los cuales no han podido ser adquiridos en este estudio. Alternativamente, diversos autores señalan procedimientos simplificados para computar los productos y subproductos que se generan al momento de que un explosivo detona, siguiendo reglas que privilegian la formación de algunos componentes por sobre otros al momento de balancear las reacciones químicas. De esta forma, en este estudio se emplean estas reglas de formación con el objetivo de determinar simplificadaamente, los compuestos resultantes de la combustión de un alto-explosivo.

Dentro de las reglas de formación de productos de la combustión de explosivos, las de Kistiankowsky-Wilson modificadas (Akhavan, 2011), resultan ser adecuadas para establecer los productos de la detonación de un alto-explosivo, basado en el hecho de que un compuesto con menor entalpía se forma más fácilmente que el que tiene mayor entalpía (Stephen, 2009).

La estimación de los productos formados por la detonación de un explosivo del tipo  $C_aH_bO_cN_d$  sigue la siguiente jerarquía:

1. Todo el nitrógeno del explosivo produce  $N_2$ .
2. Todo el hidrógeno forma  $H_2O$ .
3. Si queda algún mol de oxígeno restante después de la formación de  $H_2O$ , este oxida el carbono convirtiéndolo en  $CO$ .
4. Si queda algún mol de oxígeno restante después de la formación de  $CO$ , se genera  $CO_2$  a partir del monóxido de carbono.
5. Cualquier oxígeno restante forma  $O_2$ .
6. Cualquier carbono restante forma  $C_{(s)}$ .

Si bien, trazas de  $NO_x$  (mezclas de óxido de nitrógeno) siempre se forman, éstas se consideran despreciables en el modelo a utilizar, pues corresponden a un porcentaje menor a un 1% de los productos formados (Cooper, 1996).

Por lo tanto, para un explosivo se distinguen 4 casos de formación de productos durante la detonación, los cuales dependerán de la cantidad de oxígeno que contenga la estequiometría del compuesto.

(3.2)

$$C_aH_bO_cN_d \rightarrow \begin{cases} \frac{d}{2}N_2 + cH_2O + \left(\frac{b}{2} - c\right)H_2 + aC_{(s)} & \text{si } \frac{b}{2} > c \\ \frac{d}{2}N_2 + \frac{b}{2}H_2O + \left(c - \frac{b}{2}\right)CO + \left(a - \left(c - \frac{b}{2}\right)\right)C_{(s)} & \text{si } c > \frac{b}{2} \text{ y } c < a + \frac{b}{2} \\ \frac{d}{2}N_2 + \frac{b}{2}H_2O + \left(c - \left(\frac{b}{2} + a\right)\right)CO_2 + \left(2a - \left(c - \frac{b}{2}\right)\right)CO & \text{si } c > a + \frac{b}{2} \text{ y } c < 2a + \frac{b}{2} \\ \frac{d}{2}N_2 + \frac{b}{2}H_2O + aCO_2 + \frac{1}{2}\left(c - \left(\frac{b}{2} + 2a\right)\right)O_2 & \text{si } c > 2a + \frac{b}{2} \end{cases}$$

Para el caso en que un compuesto contenga flúor y/o cloro, es decir, un compuesto del tipo  $C_aH_bO_cN_dF_eCl_f$ , el orden de formación sería  $HF$ ,  $HCl$  y luego seguir con las reglas ya mencionadas. (Dobratz & Crawford, 1985).

Para fines prácticos, en el desarrollo de esta memoria se definen los siguientes casos para la detonación de un alto-explosivo, según los gases generados y la cantidad de oxígeno presente en el alto-explosivo:

Caso I: Si  $\frac{b}{2} > c$ .

Caso II: Si  $c > \frac{b}{2}$  y  $c < a + \frac{b}{2}$ .

Caso III: Si  $c > a + \frac{b}{2}$  y  $c < 2a + \frac{b}{2}$ .

Caso IV: Si  $c > 2a + \frac{b}{2}$ .

En caso de que un alto-explosivo contenga flúor o cloro, se define entonces como  $b'$  a la cantidad de moles de hidrógeno que reaccionan o tienen la capacidad de reaccionar con oxígeno, es decir:

$$b' = b - (e + f) \quad (3.3)$$

Redefiniendo entonces los casos como:

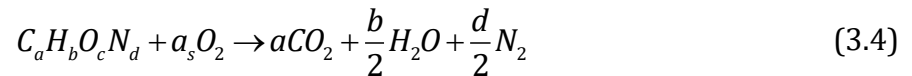
Caso I: Si  $\frac{b'}{2} > c$ .

Caso II: Si  $c > \frac{b'}{2}$  y  $c < a + \frac{b'}{2}$ .

Caso III: Si  $c > a + \frac{b'}{2}$  y  $c < 2a + \frac{b'}{2}$ .

Caso IV: Si  $c > 2a + \frac{b'}{2}$ .

En el caso de los altos-explosivos oxígeno-deficientes, es necesario contar con oxígeno adicional para llevar a cabo la combustión completa, proceso el cual se denomina postcombustión. Dicha cantidad de oxígeno dependerá de la estequiometría del compuesto, y en particular de su balance de oxígeno ( $\Omega$ ). Si existen las condiciones de oxidación adecuadas, entonces la reacción usada para el balance químico de la reacción completa será la siguiente:



Donde  $a_s$  corresponde a la cantidad extra de oxígeno necesario para que reaccione completamente un mol de alto-explosivo y equivale a:

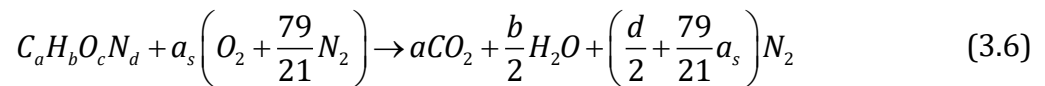
$$a_s = a + \frac{b}{4} - \frac{c}{2} \quad (3.5)$$

Cuando un explosivo detona en una cámara con aire, no solo existe oxígeno en su interior, sino que también existe nitrógeno, dióxido de carbono, y trazas de otros gases. Sin embargo, para efectos de simplificación del modelo termodinámico se considera que el aire dentro de la cámara es descrito por la siguiente composición molar:

Tabla 3-1: Composición molar del aire.

Compuestos		
O <sub>2</sub>	21	[%]
N <sub>2</sub>	79	[%]

Por tanto si la explosión ocurre dentro de una cámara que contiene aire, la ecuación (3.4) que describe la combustión completa se expresa como:



Como ejemplo, el caso del TNT, cuya fórmula es  $C_7H_5O_6N_3$ ,  $a_s$  corresponde a 5.25 moles de oxígeno (Edri et al., 2013).

### 3.1.2 Volumen de cámara necesario para lograr la combustión completa

Utilizando la ecuación (3.6), se puede calcular cuánto oxígeno (o aire) adicional se necesita para que reaccione completamente un mol de alto explosivo (HE). De esta forma, se procede a determinar la masa de aire necesaria para que quemar 1 [kg] de combustible, considerando que éste posee una masa molecular  $MW_{HE}$ .

Tabla 3-2: Cantidad de aire necesario para que reaccione un mol de alto-explosivo.

Componente	N° moles	MW [kg/mol]	Masa total [kg]	Masa normalizada [kg]
HE	1	$MW_{HE}$	$MW_{HE}$	1
$O_2$	$a_s$	0.032	$0.032 a_s$	$0.032 \frac{a_s}{MW_{HE}}$
$N_2$	$\frac{79}{21} a_s$	0.028	$0.028 a_s$	$0.028 \cdot \frac{79}{21} \frac{a_s}{MW_{HE}}$

Entonces la masa de aire  $m_{air}^{FC}$  [kg], necesaria para lograr la combustión completa de una masa determinada de alto-explosivo  $W$  [kg], queda definida como:

$$m_{air}^{FC} = \left( 0.032 + 0.028 \cdot \frac{79}{21} \right) \frac{a_s \cdot W}{MW_{HE}} \quad (3.7)$$

Considerando que la densidad del aire ( $\rho_{air}$ ) es igual a 1.225 [kg/m<sup>3</sup>] en condiciones de presión y temperatura estándar (stp) (1 atm y 298 K, respectivamente), se calcula el volumen de cámara  $V_{lim}$  [m<sup>3</sup>] necesario para que reaccione totalmente la masa de alto-explosivo  $W$  [kg].

$$V_{lim} = V_{air}^{FC} + V_{HE} \quad (3.8)$$

Con:

$$V_{air}^{FC} = \frac{m_{air}^{FC}}{\rho_{air}} \quad (3.9)$$

$$V_{HE} = \frac{W}{\rho_{HE}} \quad (3.10)$$

Donde  $V_{air}^{FC}$  [m<sup>3</sup>] corresponde al volumen de aire necesario para lograr la combustión completa del compuesto,  $V_{HE}$  [m<sup>3</sup>] es el volumen ocupado por el explosivo, que este caso tiene una masa  $W$  [kg], y por último  $\rho_{HE}$  que corresponde a la densidad inicial del explosivo en estudio [kg/m<sup>3</sup>].

Uno de los parámetros más importantes que se emplea a lo largo de este estudio es la densidad de carga de explosivo,  $W/V$  [kg/m<sup>3</sup>], el cual representa la razón entre la cantidad de masa de explosivo y el volumen confinado por la cámara. Se define entonces, la densidad de carga límite como  $W/V_{lim}$  [kg/m<sup>3</sup>].

Cabe señalar que  $W/V_{lim}$  representa un punto de transición entre una postcombustión completa (valores de  $W/V$  menores que  $W/V_{lim}$  o  $V \geq V_{lim}$ ), a una combustión parcialmente



completa (valores de  $W/V$  mayores que  $W/V_{lim}$  o  $V < V_{lim}$ ), donde se observan reacciones oxígeno-deficientes (Edri, et al., 2013); es decir, la cámara no tiene oxígeno suficiente para completar la combustión del explosivo almacenado.

Finalmente se define  $\Gamma$  al volumen de cámara necesario en  $[m^3]$  para que 1  $[kg]$  de alto-explosivo alcance la combustión completa.

$$\Gamma = \frac{1}{W/V_{lim}} \quad (3.11)$$

Para los explosivos que cumplan con  $\left(c > 2a + \frac{b}{2}\right)$ ,  $W/V_{lim}$  se indefiniría, pues son explosivos con un balance de oxígeno positivo; es decir, siempre que detonan existirá oxígeno suficiente dentro del propio explosivo para que reaccione todo el combustible almacenado.

### 3.1.3 Cálculo de la energía de postcombustión

Después que el proceso de detonación ocurre, los altos-explosivos siguen teniendo el potencial de reaccionar con el oxígeno que los rodea. Esto se debe a que el oxígeno que está dentro del explosivo no es suficiente para reaccionar con todos los combustibles generados dentro de esta primera etapa, y por lo tanto, la existencia de oxígeno circundante permite que se pueda seguir liberando energía a través de la postcombustión.

Las reacciones de postcombustión (*AB-Afterburning*) que se utilizan dentro del desarrollo del modelo termodinámico simplificado son las siguientes:



Cuando existen todas las condiciones para que se genere la postcombustión, la cantidad de energía liberada puede describirse en función de la cantidad de moles de productos que aún pueden reaccionar y el calor de reacción que genera cada una al descomponerse en subproductos más estables. La expresión para la energía adicional que libera la postcombustión completa por unidad de masa,  $\Delta H_{AB}^{FC}$   $[kJ/kg]$  puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\Delta H_{AB}^{FC} = \sum_i \frac{n_i \cdot \Delta H_{ri}}{MW_{HE}} \quad (3.13)$$

Donde  $n_i$  corresponde al número de moles del compuesto  $i$  que aún pueden reaccionar,  $\Delta H_{ri}$  es la energía liberada por la combustión del compuesto  $i$   $[kJ/mol]$ , y  $MW_{HE}$   $[kg/mol]$  corresponde a la masa molecular del alto-explosivo.

Por lo tanto, para calcular la energía de postcombustión, es necesario tener en cuenta la cantidad de moles de cada producto que libera energía, cuyos términos se pueden deducir directamente de la ecuación (3.2), y de la energía liberada por cada mol de producto que

reacciona, cuyos valores son extraídos de Cooper (1996), y que se pueden revisar en la Tabla 3-3.

Tabla 3-3: Energía de liberación de las componentes de la postcombustión.

Reacción	Energía liberada [kJ/mol]
$C_{(s)} + O_2 \rightarrow CO_2$	$\Delta H_r^{C \rightarrow CO_2} = 393.51$
$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	$\Delta H_r^{CO \rightarrow CO_2} = 282.99$
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	$\Delta H_r^{H_2 \rightarrow H_2O} = 241.83$

En función de la cantidad de moles de cada producto que post-combustiona y su energía liberada, se puede realizar el cálculo de la energía de postcombustión completa de un alto-explosivo, según el caso en que éste se encuentre. La forma se determinar este valor, se expresa en la ecuación (3.14).

$$\Delta H_{AB}^{FC} = \frac{1}{MW_{HE}} \begin{cases} \left( \frac{b}{2} - c \right) \Delta H_r^{H_2 \rightarrow H_2O} + a \Delta H_r^{C \rightarrow CO_2} & \text{Caso I} \\ \left( c - \frac{b}{2} \right) \Delta H_r^{CO \rightarrow CO_2} + \left( a - \left( c - \frac{b}{2} \right) \right) \Delta H_r^{C \rightarrow CO_2} & \text{Caso II} \\ \left( 2a - \left( c - \frac{b}{2} \right) \right) \Delta H_r^{CO \rightarrow CO_2} & \text{Caso III} \\ 0 & \text{Caso IV} \end{cases} \quad (3.14)$$

### 3.1.4 Energía de reacción ante una postcombustión incompleta

El calor de combustión,  $\Delta H_C^{FC}$  [kJ/kg], se define como la energía de detonación más la energía de postcombustión (i.e., la energía liberada por la combustión completa).

$$\Delta H_C^{FC} = \Delta H_{det} + \Delta H_{AB}^{FC} \quad (3.15)$$

En caso de que no exista suficiente oxígeno al interior de una cámara que almacena una carga de alto-explosivo, es decir si  $W/V > W/V_{lim}$ , solo parte de la energía de la postcombustión será liberada, pues quedarán componentes sin reaccionar (Edri, et al., 2013). En el caso del modelo termodinámico construido se supone que todo el oxígeno contenido en la cámara es utilizado (lo que representa un supuesto conservador). En caso de que la cantidad de oxígeno almacenada en la cámara sea insuficiente para que se produzca la combustión completa de los altos-explosivos, se supone que la energía de combustión liberada por la combustión será proporcional a la razón entre la cantidad de oxígeno disponible y la cantidad de oxígeno necesaria para que ocurra la combustión completa. Se define entonces,  $\mu$  como la fracción del explosivo que presenta una reacción completa

(siendo  $1 - \mu$ , la fracción que libera sólo energía de detonación), la cual reacciona con todo el oxígeno disponible en la cámara, que se expresa como:

$$\mu = \begin{cases} 1 & \text{si } W/V \leq W/V_{lim} \text{ o } V_{lim} \leq V \\ \frac{1}{\left(\frac{W}{V}\right) \cdot \Gamma} = \frac{V}{V_{lim}} & \text{si } W/V > W/V_{lim} \text{ o } V_{lim} > V \end{cases} \quad (3.16)$$

De acuerdo con esta suposición, se puede calcular la energía de postcombustión por unidad de masa de alto explosivo,  $\Delta H_{AB}$  en caso de que existan condiciones tanto para la combustión completa, como para una con deficiencia de oxígeno.

$$\Delta H_{AB} = \mu \cdot \Delta H_{AB}^{FC} \quad (3.17)$$

Por lo tanto, la energía de combustión promedio liberada por un explosivo en una cámara con oxígeno, cualquiera sea su condición, queda expresada por:

$$\Delta H_c = \Delta H_{det} + \Delta H_{AB} \quad (3.18)$$

### 3.1.5 Cálculo de número de moles en la mezcla de gases

Como se verá en apartados posteriores, para calcular la temperatura final que alcanza el gas en la fase cuasi-estática y la presión residual en la cámara, es necesario determinar el número de moles de la mezcla final de gases. Utilizando como base las ecuaciones (3.2) y (3.6), se realiza el cálculo de éstas en función de la densidad de carga,  $W/V$  y la estequiometría del explosivo en estudio. Estos resultados se pueden observar desde la Figura 3-1 hasta la Figura 3-4.

Para facilitar la comprensión de los cálculos, se define el volumen de aire contenido dentro de la cámara,  $V_{air}$  [ $m^3$ ], como:

$$V_{air} = V - \frac{W}{\rho_{HE}} \quad (3.19)$$

Donde  $V$  es el volumen de la cámara [ $m^3$ ],  $W$  es la masa del explosivo que está dentro de la cámara [ $kg$ ] y  $\rho_{HE}$  la densidad del alto-explosivo en estudio [ $kg/m^3$ ].

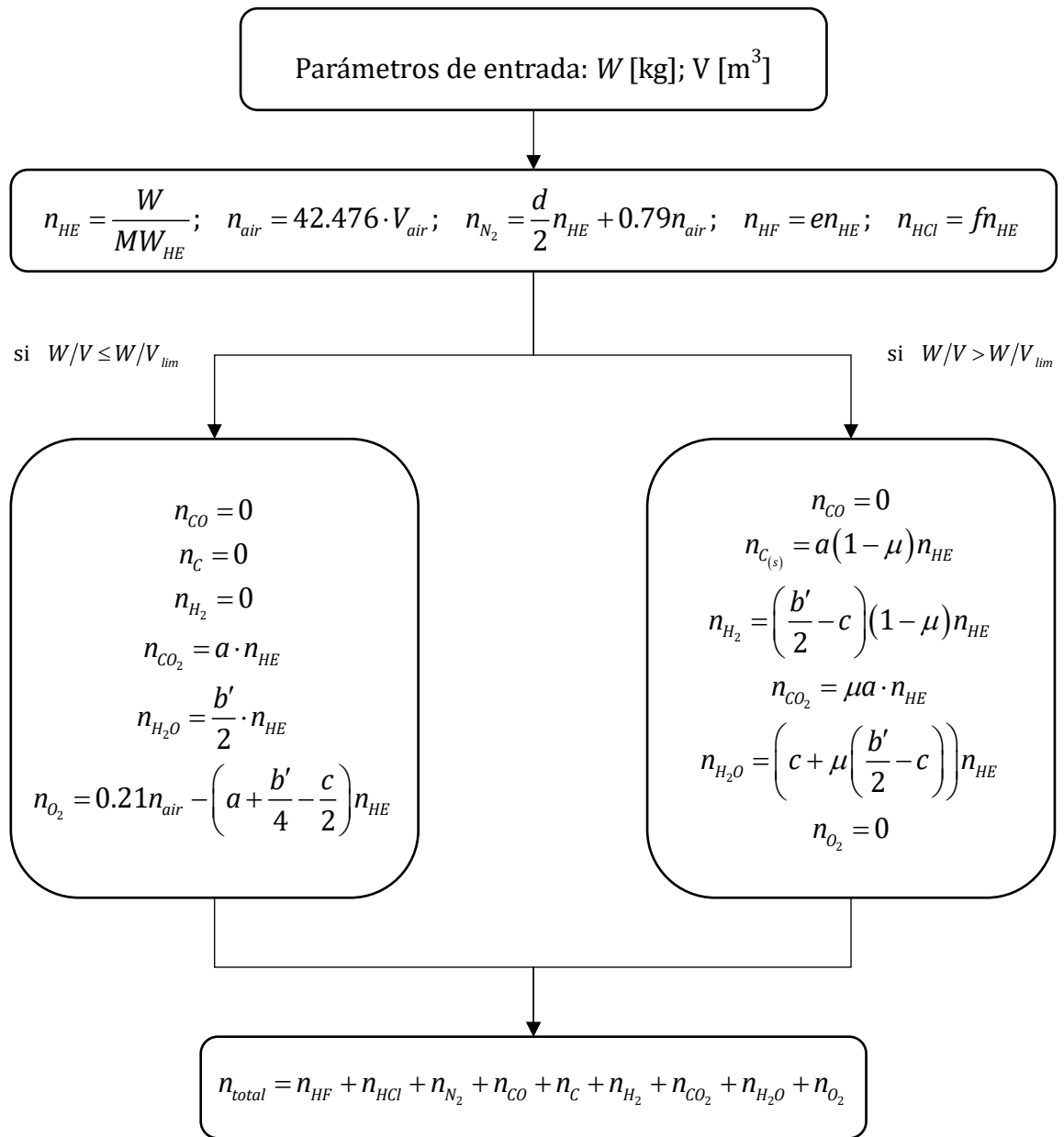


Figura 3-1: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 1. Modificado de Edri, et al., (2013).

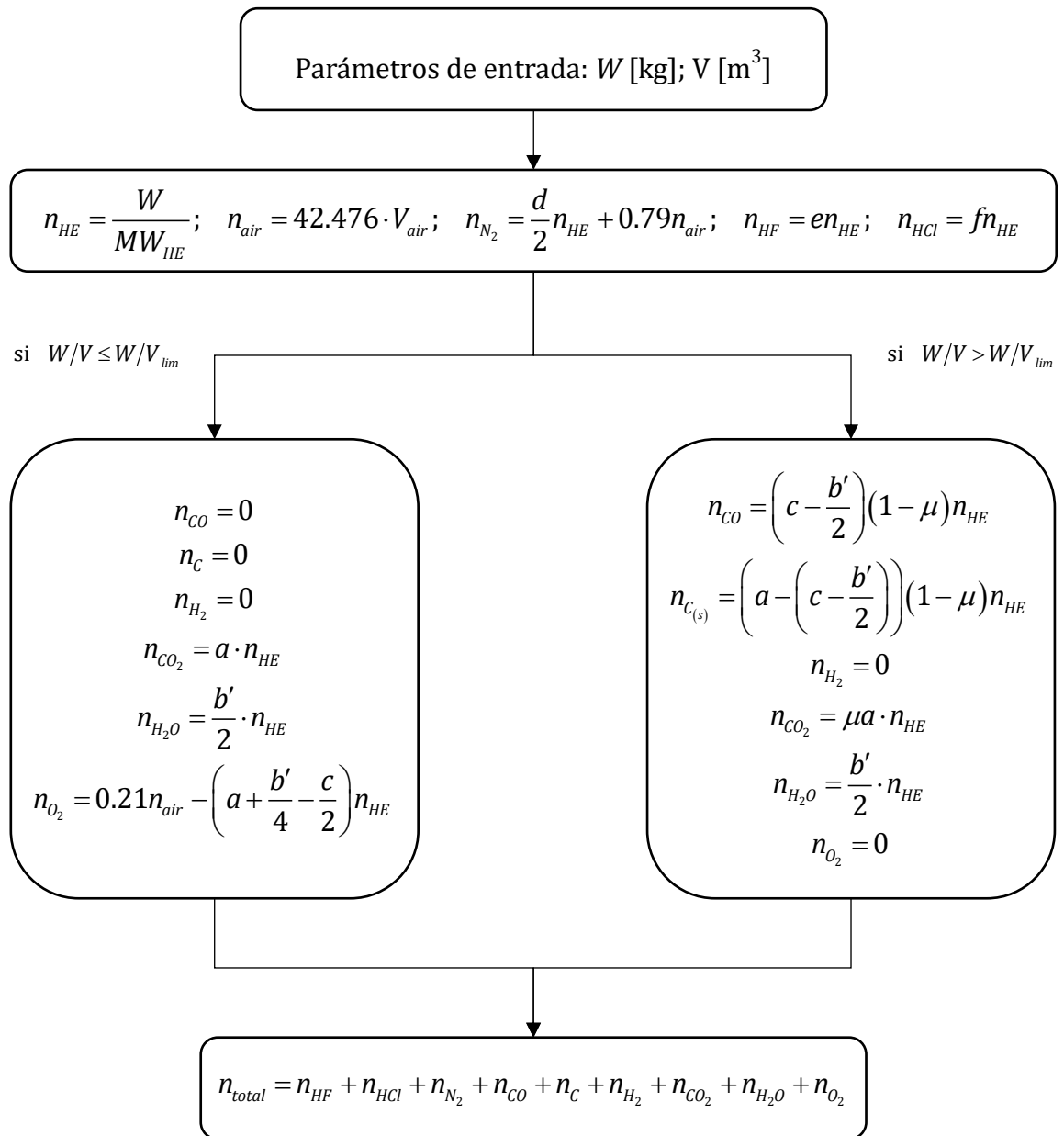


Figura 3-2: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 2. Modificado de Edri, et al., (2013).

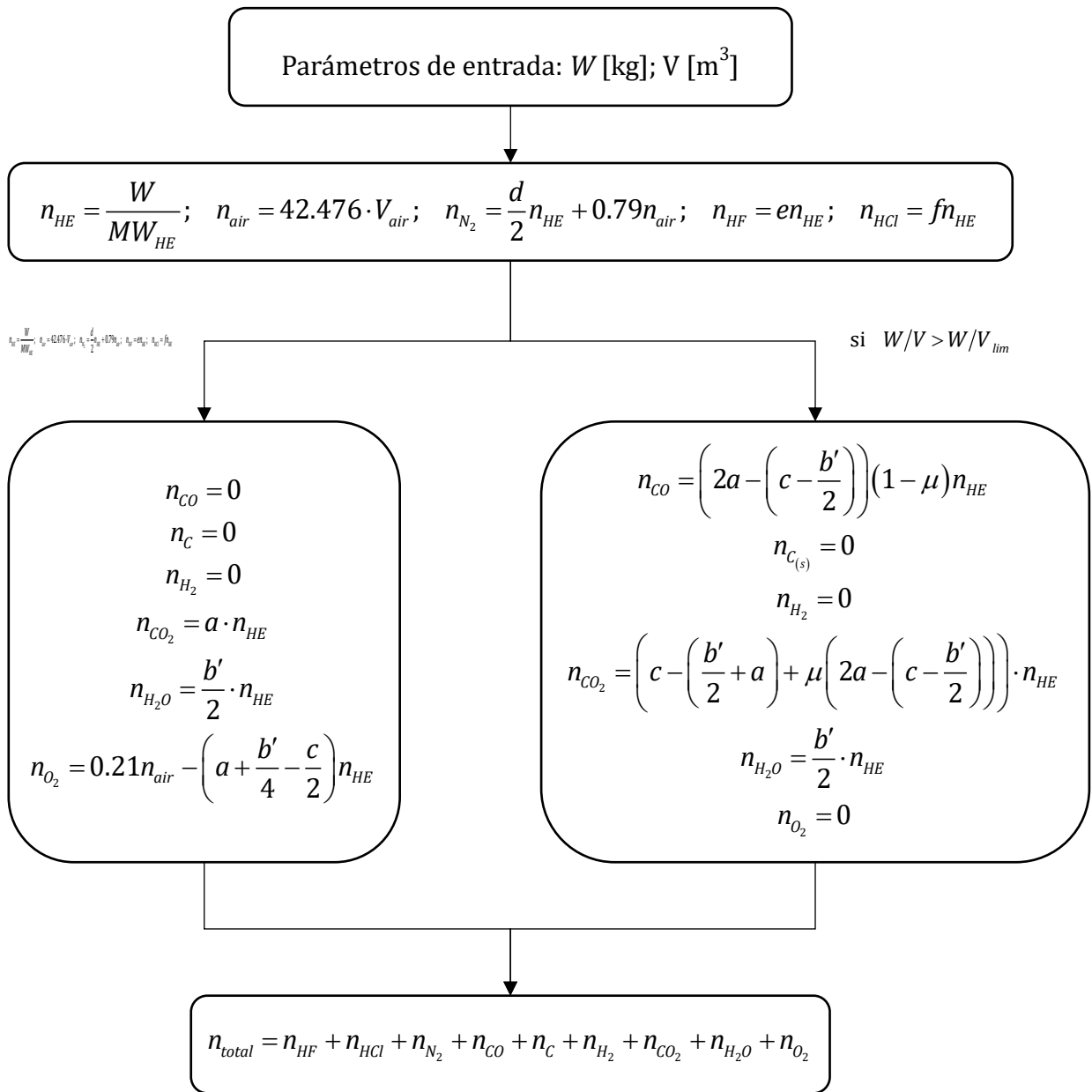


Figura 3-3: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 3. Modificado de Edri, et al., (2013).

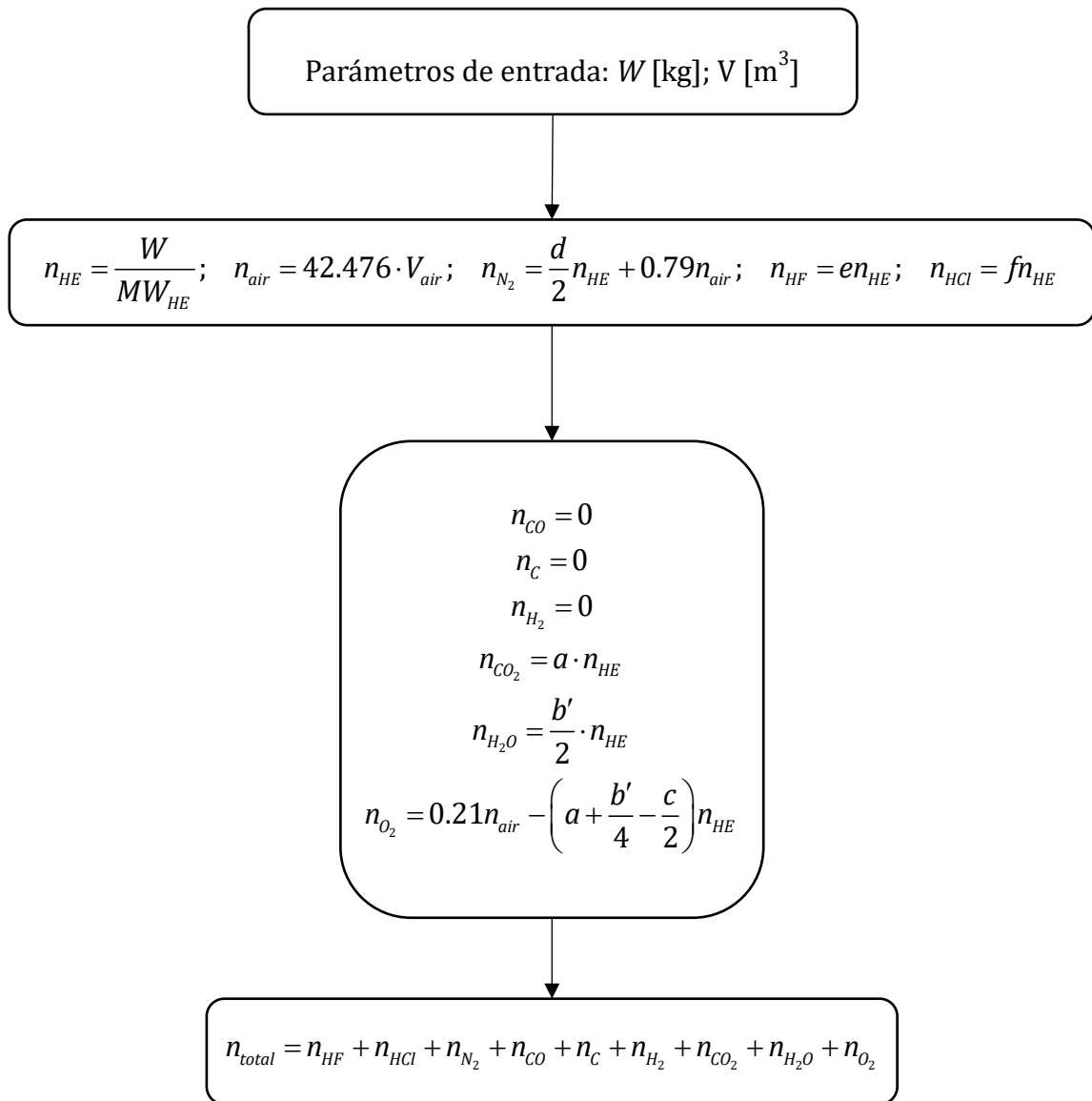


Figura 3-4: Cálculo de moles totales en la mezcla de gases. Caso 4. Modificado de Edri, et al., (2013).

### 3.1.6 Cálculo de la temperatura final del gas

Siendo liberada la energía del explosivo al medio y considerando un proceso isocórico; es decir, donde no hay variación en el volumen del sistema (cámara indeformable), se puede utilizar la siguiente expresión conocida de la termodinámica para calcular la temperatura del gas:

$$nC_v = \left( \frac{\partial Q}{\partial T} \right)_v \quad (3.20)$$

Donde  $n$  es el número de moles de un gas,  $C_v$  [kJ/mol K] corresponde al calor específico a volumen constante,  $Q$  [kJ] representa la energía en forma de calor, y  $T$  [K] la temperatura.

Integrando la ecuación (3.20), se obtiene:

$$\Delta Q = n \int_{T_1}^{T_2} C_v dT \quad (3.21)$$

Donde  $T_1$  representa la temperatura inicial del gas, en condiciones de temperatura estándar, 298 [K],  $T_2$  [K] es la temperatura que alcanza el sistema en la etapa cuasi-estática y  $\Delta Q$  [kJ] es la energía liberada por la explosión, la cual es igual a:

$$\Delta Q = \Delta H_c \cdot W \quad (3.22)$$

Debido a que dentro de la cámara existen varios compuestos, la ecuación (3.21) se puede expresar de la siguiente forma:

$$\Delta Q = \int_{T_1}^{T_2} \sum_i n_i C_{vi} dT \quad (3.23)$$

Donde  $C_{vi}$  [kJ/mol K], es el calor específico del compuesto  $i$  a volumen constante, el cual es una función de la temperatura.

En la literatura, las capacidades específicas a presión constante ( $C_p$ ) son los mayormente reportados por los autores. En tanto, la capacidad específica a volumen constante ( $C_v$ ) puede ser obtenida mediante la siguiente expresión:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad (3.24)$$

En donde  $\gamma$  representa la razón de calores específicos, y  $C_p$  [kJ/mol K] corresponde al calor específico a presión constante.

En la Figura 3-5 se muestra el calor específico versus temperatura de los distintos productos de la combustión de un alto-explosivo. Los datos se extrajeron de Cooper (1996) para los compuestos  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$  y  $N_2$ , mientras que para  $HF$  y  $HCl$  la información fue extraída de Chase (1998). Para  $C_{(s)}$  los datos usados fueron recopilados de Butland & Maddison (1973).

Cabe señalar que la tabla con toda la información utilizada se puede revisar en el Anexo A.



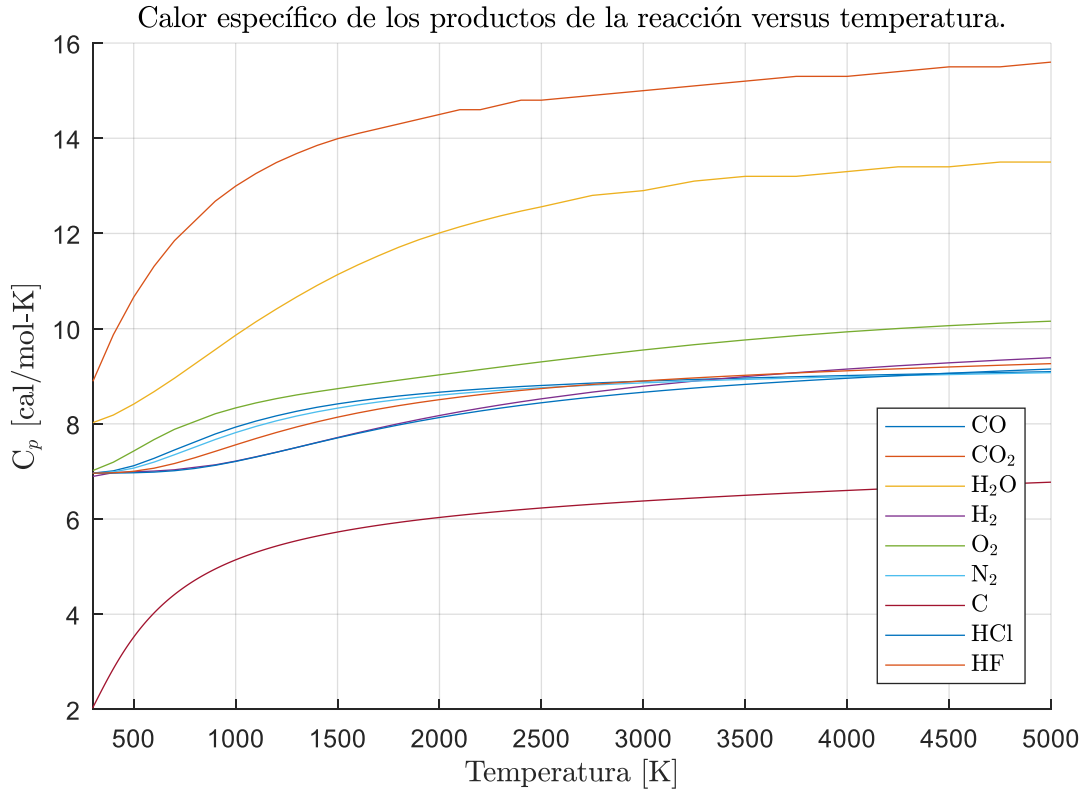


Figura 3-5: Calor específico a presión constante de los productos de la combustión.

Posteriormente, se realiza un ajuste polinómico de sexto orden con el fin de hacer integrable la curva de calor específico, como muestra la siguiente ecuación:

$$C_p = K_0 + K_1T + K_2T^2 + K_3T^3 + K_4T^4 + K_5T^5 + K_6T^6 \quad (3.25)$$

En la Tabla 3-4 se adjuntan los coeficientes del ajuste polinómico utilizados para cada compuesto químico el cual es aplicable entre 300 y 5000 [K].

Tabla 3-4: Coeficientes del ajuste polinómico.

Compuesto	$K_6$	$K_5$	$K_4$	$K_3$	$K_2$	$K_1$	$K_0$
CO	7.346E-21	-1.219E-16	7.735 E-13	-2.289E-09	2.858E-06	-5.164E-05	6.723
CO <sub>2</sub>	-1.024E-20	1.920E-16	-1.462E-12	5.832E-09	-1.309E-05	1.656E-02	4.990
H <sub>2</sub>	-6.321E-22	2.073E-18	6.546E-14	-5.687E-10	1.635E-06	-1.007E-03	7.116
H <sub>2</sub> O	7.869E-21	-1.406E-16	9.842E-13	-3.327E-09	5.001E-06	-4.392E-04	7.761
HCl	2.738E-21	-5.613E-17	4.465E-13	-1.704E-09	2.991E-06	-1.202E-03	7.072
HF	1.558E-21	-3.466E-17	3.051E-13	-1.328E-09	2.811E-06	-1.841E-03	7.316
N <sub>2</sub>	8.055E-21	-1.356E-16	8.807E-13	-2.715E-09	3.746E-06	-9.151E-04	6.919
O <sub>2</sub>	1.929E-22	6.601E-18	-1.345E-13	8.699E-10	-2.622E-06	4.308E-03	5.880

Cabe señalar que, para el caso del carbono ( $C$ ), Butland & Maddison (1973) entregan el siguiente ajuste polinómico:

$$C_p = A + BT + CT^{-1} + DT^{-2} + ET^{-3} + FT^{-4} \quad (3.26)$$

Donde  $A = 0.54212$ ,  $B = 2.42667 \times 10^{-6}$ ,  $C = -90.2725$ ,  $D = -43449.3$ ,  $E = 1.59309 \times 10^7$  y  $F = -1.43688 \times 10^9$ .

En la Tabla 3-5 se entregan los coeficientes de la razón de capacidades caloríficas para cada compuesto formado, en condiciones de presión y temperatura estándar. Estos valores fueron todos extraídos de Cooper (1996), excepto para  $HF$  y  $HCl$ , cuyos parámetros fueron obtenidos de USCG (1999).

Tabla 3-5: Razones de capacidades caloríficas.

Compuesto	$\gamma$ [-]
$CO_2$	1.304
$CO$	1.404
$O_2$	1.401
$N_2$	1.404
$H_2O$	1.324
$H_2$	1.41
$C_{(s)}$	1
$HCl$	1.398
$HF$	1.399

Si bien, la razón de capacidades caloríficas depende de la temperatura y de la presión a la cual se encuentre el compuesto, Cooper (1996) señala que para el rango de temperatura y presiones usadas en la mayoría de este tipo de cálculos ( $25 < T < 4000^\circ C$ , y  $1 \text{ bar} < P < 1 \text{ kbar}$ ), el valor de  $\gamma$  a condiciones de presión y temperatura estándar pueden ser consideradas constantes a través del rango señalado sin introducir un error significativo.

Considerando lo anteriormente expuesto, la ecuación (3.23) queda:

$$\Delta H_c \cdot W = \int_{298}^{T_2} \left( \sum_i n_i \frac{C_{pi}}{\gamma_i} \right) dT \quad (3.27)$$

Finalmente, esta ecuación permite obtener la temperatura de la mezcla de gas  $T_2$ , en unidades Kelvin una vez que se iguala la energía de combustión y la integral de la ec. (3.27).

### 3.1.7 Cálculo de presiones en el estado cuasi-estático

Suponiendo que la mezcla final de gases es un gas ideal y que este es invariante se puede determinar el aumento de presión de la mezcla  $\Delta P$  [kPa] como:

$$\Delta P = \frac{n_{total}R(T_2 - T_1)}{V} \quad (3.28)$$

## 3.2 Propiedades químicas de los explosivos seleccionados

Se selecciona un total de 57 alto-explosivos, entre aquellos que tienen una estequiometría  $C_aH_bO_cN_d$  y  $C_aH_bO_cN_dF_eCl_f$  (42 y 15, respectivamente). Los datos de estos compuestos fueron obtenidos de Dobratz B. M., (1972) y Dobratz & Crawford, (1985) y están adjuntos en la Tabla 3-6 y Tabla 3-7.

Cabe señalar, que el balance de oxígeno ( $BO$ ) y la energía de postcombustión ( $\Delta H_{AB}$ ), fueron calculados según lo descrito en los acápites 2.1.1 y 3.1.3. En caso de que un explosivo no corresponda a un compuesto puro, con una estequiometría teórica no definida, un valor arbitrario de 100 [g/mol] se le asigna como peso molecular, y su estequiometría empírica es entregada.

Tabla 3-6: Propiedades químicas de los explosivos  $C_aH_bO_cN_d$ . Modificado de Dobratz & Crawford (1985).

Explosivos LLNL	Composición Elemental				Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	MW (gr/mol)	$\Delta H_{det}$ Calculada (MJ/kg)		$\Delta H_{det}$ Experimental (MJ/kg)		$\Delta H_{AB}$ Calculada (MJ/kg)	BO (%)
	C	H	N	O			H <sub>2</sub> O (l)	H <sub>2</sub> O (g)	H <sub>2</sub> O (l)	H <sub>2</sub> O (g)		
Amatol 80/20	0.62	4.44	2.26	3.53	1.46	100	5.02	4.08	4.27	--	0.00	1.1
Boracitol	1.23	3.79	0.53	3.97	1.535	100	1.67	0.84	--	--	1.09	-6.2
BTF	6	0	6	6	1.87	252.1	7.07	7.07	5.9	5.9	6.74	-38.1
Comp A-3	1.87	3.74	2.46	2.46	1.65	100	6.61	5.82	--	--	6.71	-50.4
Comp A-5	1.425	2.85	2.65	2.65	1.7	100	6.78	6.76	--	--	4.25	-26.0
Comp B Grade A	2.03	2.64	2.18	2.67	1.71	100	6.44	5.86	5.02	--	6.50	-43.4
Comp B-3	2.05	2.51	2.15	2.67	1.72	100	6.44	5.86	5.02	4.69	6.50	-43.0
Comp C-3	1.9	2.83	2.34	2.6	1.6	100	6.03	6.02	--	--	6.17	-41.8
Comp C-4	1.82	3.54	2.46	2.51	1.65	100	6.65	5.86	--	--	6.34	-46.4
Cyclotol 75/25	1.78	2.58	2.36	2.69	1.755	100	6.4	5.93	--	--	5.46	-34.6
Cyclotol 60/40	2.04	2.5	2.15	2.68	1.68	100	6.57	6.02	--	--	6.45	-42.4
DATB	6	5	5	6	1.79	243.1	5.27	4.81	4.1	3.81	8.12	-55.9
DIPAM	12	6	8	12	1.79	454.1	5.65	5.31	--	--	8.21	-52.9
DNPA	6	8	2	6	1.47	204.1	4.44	3.57	--	--	10.49	-78.4
EDNP	7	12	2	6	1.28	220.2	5.15	3.93	--	--	12.51	-101.7
EL-506A	2.41	4.29	1.08	3.27	1.48	100	6.78	5.77	--	--	8.24	-59.1
EL-506C	3.25	5.49	0.87	2.68	1.48	100	5.9	4.69	--	--	12.95	-105.0
HMX	4	8	8	8	1.89	296.2	6.78	6.19	6.19	5.73	3.82	-21.6
HNAB	12	4	8	12	1.75	452.2	6.15	5.94	--	--	8.00	-49.5
HNS	14	6	6	12	1.72	450.3	5.94	5.69	--	--	10.03	-67.5
LX-01-0	1.52	3.73	1.69	3.39	1.23	100	7.2	6.36	--	--	4.29	-24.2
LX-14-0	1.52	2.92	2.59	2.66	1.83	100	6.59	5.95	--	--	4.66	-29.4
MEN-II	2.06	7.06	1.33	3.1	1.017	100	5.77	4.39	--	--	9.15	-72.8
NC (12.0% N)	6	7	2.25	9.5	1.5	262.6	4.85	4.27	--	--	6.47	-36.6
NC (13.35% N)	6	7	2.5	10	1.656	274.1	4.85	4.27	--	--	5.68	-32.1

Explosivos LLNL	Composición Elemental				Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	MW (gr/mol)	$\Delta H_{det}$ Calculada (MJ/kg)		$\Delta H_{det}$ Experimental (MJ/kg)		$\Delta H_{AB}$ Calculada (MJ/kg)	BO (%)
	C	H	N	O			H <sub>2</sub> O (l)	H <sub>2</sub> O (g)	H <sub>2</sub> O (l)	H <sub>2</sub> O (g)		
NC (14.14% N)	6	7	3	11	1.659	297.1	8.16	7.57	--	--	4.29	-24.2
NG	3	5	3	9	1.596	227.1	6.65	6.19	--	--	0.00	3.5
NM	1	3	1	2	1.13	61	6.78	5.69	5.15	4.44	5.55	-39.3
NQ	1	4	4	2	1.65	104.1	4.444	3.68	--	--	3.78	-30.7
Octol 75/25	1.78	2.58	2.36	2.69	1.81	100	6.57	5.98	--	--	5.46	-34.6
PBX-9007	1.97	3.22	2.43	2.44	1.66	100	6.53	5.82	--	--	6.83	-49.8
PBX-9011	1.73	3.18	2.45	2.61	1.77	100	6.4	5.69	--	--	5.68	-39.0
PBX-9205	1.83	3.14	2.49	2.51	1.68	100	6.11	5.9	--	--	6.16	-43.5
PBX-9501	1.47	2.86	2.6	2.69	1.84	100	6.65	6.03	--	--	4.39	-26.9
Pentolite 50/50	2.33	2.37	1.29	3.22	1.67	100	6.4	5.86	5.15	4.85	6.92	-42.0
PETN	5	8	4	12	1.76	316.2	6.9	6.32	6.23	5.73	1.79	-10.1
RDX	3	6	6	6	1.806	222.1	6.78	6.19	6.32	5.94	3.82	-21.6
TACOT	12	4	8	8	1.61	388.2	5.9	5.64	4.1	4.02	10.46	-74.2
TATB	6	6	6	6	1.88	258.2	5.02	4.52	--	--	7.86	-55.8
Tetryl	7	5	5	8	1.71	287	6.32	6.07	4.77	4.56	7.48	-47.4
TNM	1	0	4	8	1.65	196	2.3	2.3	--	--	0.00	49.0
TNT	7	5	3	6	1.63	227.1	5.9	5.4	4.56	4.27	10.43	-74.0

Tabla 3-7: Propiedades químicas de los explosivos  $C_aH_bO_cN_dF_eCl_f$ . Modificado de Dobratz & Crawford (1985).

Explosivos LLNL	Composición Elemental						Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	MW (gr/mol)	$\Delta H_{det}$ Calc. (MJ/kg)		$\Delta H_{det}$ Exp. (MJ/kg)		$\Delta H_{AB}$ Calc. (MJ/kg)	$BO$ (%)
	<i>C</i>	<i>H</i>	<i>N</i>	<i>O</i>	<i>F</i>	<i>Cl</i>			H <sub>2</sub> O (l)	H <sub>2</sub> O (g)	H <sub>2</sub> O (l)	H <sub>2</sub> O (g)		
FEFO	5	6	4	10	2	0	1.607	320.1	6.07	5.82	5.36	5.06	1.768	-10.0
LX-04-1	1.55	2.58	2.3	2.3	0.52	0	1.865	100	5.94	5.49	5.49	5.23	4.696	-29.3
LX-07-2	1.48	2.62	2.43	2.43	0.35	0	1.865	100	6.23	5.73	--	--	4.393	-26.6
LX-09-0	1.43	2.74	2.59	2.72	0.02	0	1.845	100	6.69	6.11	--	--	4.124	-24.0
LX-09-1	1.425	2.735	2.592	2.721	0.0144	0	1.84	100	6.69	6.11	--	--	4.104	-23.8
LX-10-0	1.42	2.66	2.57	2.57	0.17	0	1.863	100	6.49	5.94	--	--	4.123	-24.2
LX-10-1	1.41	2.663	2.579	2.579	0.156	0	1.87	100	6.49	5.94	--	--	4.084	-23.9
LX-11-0	1.61	2.53	2.16	2.16	0.7	0	1.875	100	5.77	5.36	4.69	4.85	4.960	-31.6
LX-15	3.05	1.29	1.27	2.53	0.13	0.04	1.752	100	6.4	5.61	--	--	9.825	-66.1
LX-16	1.61	2.52	1.22	3.64	0.05	0	1.595	100	6.65	6.11	--	--	2.306	-13.0
LX-17-0	2.29	2.18	2.15	2.15	0.2	0.054	1.9	100	5.48	4.27	--	--	7.700	-54.3
PBX-9010	1.39	2.43	2.43	2.43	0.26	0.09	1.79	100	6.15	5.69	--	--	3.934	-22.2
PBX-9407	1.41	2.66	2.54	2.54	0.09	0.07	1.6	100	6.69	6.11	--	--	4.123	-24.5
PBX-9502	2.3	2.23	2.21	2.21	0.13	0.038	1.9	100	4.81	4.18	--	--	7.748	-54.7
PBX-9503	2.16	2.28	2.26	2.26	0	0.038	1.88	100	5.1	4.64	--	--	7.241	-50.9

Si bien, el calor de detonación calculado ( $\Delta H_{det}$  Calc.) representa un límite superior de energía química que se obtiene en una explosión, en la práctica siempre la energía liberada es menor que la asumida por el cálculo termodinámico, debido a principalmente dos razones:

- Durante la reacción se pueden generar concentraciones de productos levemente diferentes a los obtenidos con las reglas de formación.
- Existe un cambio de entropía que es mayor que la existente a 298 K y 1 atm (Dobratz & Crawford, 1985). Por lo tanto, para el desarrollo de las curvas de presión cuasi-estáticas, se privilegia el uso de las energías de detonación experimentales por sobre las calculadas (en caso de que las primeras no estuviesen, se utilizan las segundas).

La energía de detonación teórica, se puede determinar según los procedimientos que se detallan en Akhavan (2011) y Cooper (1996), en función de las concentraciones de los productos que se forman.

### 3.3 Presión de gas usando la equivalencia en TNT

El peso equivalente de TNT de un alto-explosivo, corresponde al valor del peso necesario para reproducir un efecto similar al observado por la explosión de una carga de TNT (Swisdak Jr., 1975). Este valor es una simplificación teniendo en cuenta que el comportamiento de un alto-explosivo posee diferencias respecto al comportamiento del TNT. Sin embargo, esta carga equivalente resulta útil cuando no se tiene toda la información del explosivo en estudio, puesto que se pueden estimar los efectos generados por una detonación de éste, en función de ábacos que han sido elaborados experimentalmente para el TNT.

Por ejemplo, la UFC 3-340-02 (2008) considera que, para efectos de diseño contra explosiones, las propiedades de la onda de choque de un explosivo pueden ser expresadas como función de la razón entre la energía de detonación éste, y la energía de detonación del TNT, tal como se describe a continuación:

$$W / V_E = \frac{\Delta H_{det-HE}}{\Delta H_{det-TNT}} W / V_{HE} \quad (3.29)$$

Donde,  $W / V_E$  [kg/m<sup>3</sup>] corresponde a la densidad de carga equivalente en TNT para la una onda de choque,  $W / V_{HE}$  [kg/m<sup>3</sup>] es la densidad de carga del explosivo en cuestión,  $\Delta H_{det-HE}$  [kJ/kg] es la energía de detonación del alto-explosivo,  $\Delta H_{det-TNT}$  [kJ/kg] es la energía de detonación del TNT

De esta forma, para un explosivo distinto al TNT, el método de carga equivalente permite estimar las propiedades de la onda de choque a partir de ábacos experimentales confeccionados para TNT, como el que se presenta en la Figura 3-6. En dicha figura, se describen varios parámetros que permiten determinar los efectos de una onda de choque propagada esféricamente, tales como: la presión máxima reflejada en una superficie rígida y plana ( $P_r$ ), la presión de la onda de choque incidente (en el aire) ( $P_{so}$ ), el impulso normalizado por la carga de TNT de una onda reflejada ( $i_r/W^{1/3}$ ), el impulso de onda incidente normalizada por la carga de TNT ( $i_s/W^{1/3}$ ), el tiempo de arribo de la onda normalizada por la carga ( $t_a/W^{1/3}$ ), la duración de la fase positiva de una onda de choque (reflejada o incidente)

normalizada por la carga ( $t_0/W^{1/3}$ ), la velocidad de propagación de la onda de choque ( $U$ ), el largo de onda normalizado de la onda de choque ( $L_w/W^{1/3}$ ). Todas estas variables están en función de la distancia escalada ( $Z=R/W^{1/3}$ ), donde  $R$  corresponde a la distancia [ft] donde se evalúa la onda de choque respectiva al punto de detonación del TNT y  $W$  correspondiente a el peso equivalente de TNT en [lb].

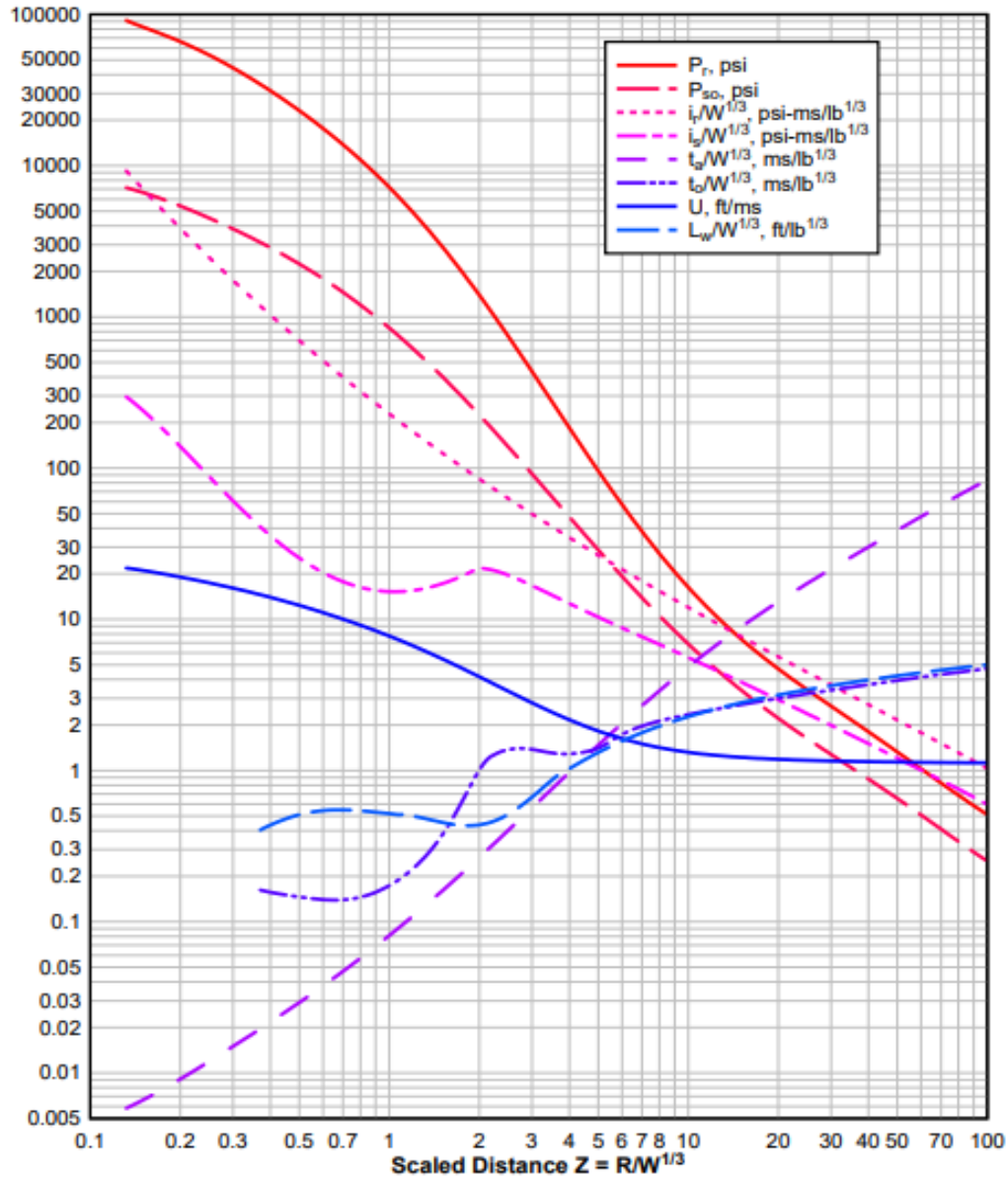


Figura 3-6: Parámetros que caracterizan la fase positiva de la onda de choque para explosiones esférica de TNT en campo abierto al nivel del mar. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).

Posiblemente, el método de carga equivalente de TNT es uno de los más empleados en la industria del diseño anti-explosiones, teniendo en cuenta la complejidad de generar ábacos para otro tipo de explosivos. Sin embargo, existen algunos ábacos para otros tipos de explosivos. Otra alternativa es la modelación de las características de la onda de choque en programas como AUTODYN, cuya posibilidad depende en la medida que se tengan los



parámetros que caracterizan la ecuación de estado del explosivo en cuestión (en general, parámetros de la JWL).

En primera instancia, el método de carga de TNT equivalente es útil para estimar los parámetros asociados a la onda de choque. Sin embargo, la equivalencia no se rige por la ec.(3.29) cuando se estima el efecto de la presión de gas. Es así como Maienschein (2002) realiza estimaciones de la equivalencia en TNT de la presión cuasi-estática de gas, definiéndola como la razón entre las energías de combustión completa, mientras que la UFC 3-340-02 (2008), muestra algo más sofisticado, pues incluye la razón de masa del explosivo y el volumen de cámara en un factor de conversión. Esta expresión, utilizada en dicho documento, se detalla en la ecuación (3.30).

$$W / V_{Eg} = \frac{\phi[\Delta H_{C-HE} - \Delta H_{det-HE}] + \Delta H_{det-HE}}{\phi[\Delta H_{C-TNT} - \Delta H_{det-TNT}] + \Delta H_{det-TNT}} W / V_{HE} \quad (3.30)$$

Donde,  $W / V_{Eg}$  [kg/m<sup>3</sup>] corresponde a la densidad de carga equivalente en TNT para la presión de gas cuasi-estático,  $W / V_{HE}$  [kg/m<sup>3</sup>] es la densidad de carga del explosivo en cuestión,  $\Delta H_{C-HE}$  [kJ/kg] es la energía de combustión completa del alto-explosivo,  $\Delta H_{det-HE}$  [kJ/kg] es la energía de detonación del alto-explosivo,  $\Delta H_{C-TNT}$  [kJ/kg] es la energía de combustión completa del TNT,  $\Delta H_{det-TNT}$  [kJ/kg] es la energía de detonación del TNT y  $\phi$  es el factor de conversión del TNT.

Los valores que toma el factor de conversión del TNT ( $\phi$ ), para distintas densidades de carga corresponden a la Figura 2-166 de la UFC 3-340-02 (2008), y se adjunta en la Figura 3-7 de este trabajo.

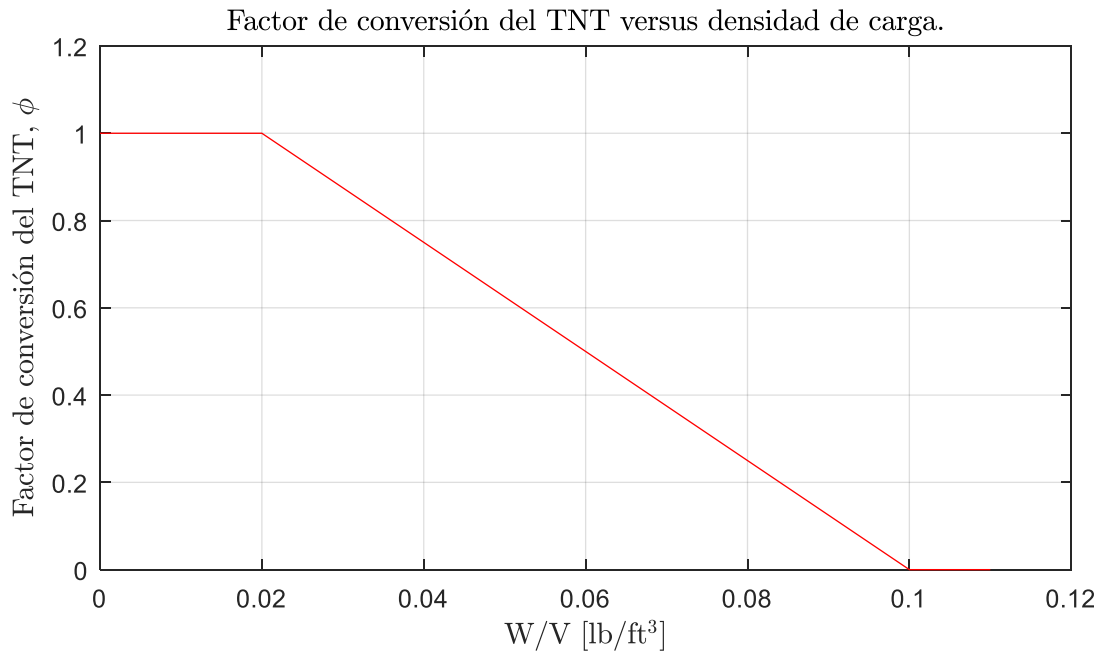


Figura 3-7: Factor de conversión del TNT para distintas densidades de carga. Fuente: UFC 3-340-02 (2008).

### 3.4 Resultados

De los 57 explosivos estudiados, solo a cinco de ellos se les genera la curva de energía de postcombustión adicional para modelar explosiones en AUTODYN, cuyos resultados pueden ser observados en el Capítulo 4. Esto se debe a los grandes tiempos computacionales que requiere analizar cada uno de estos casos, resultando en una limitante. A ello se suma que en algunos casos no se pudo encontrar los parámetros que describen la ecuación de estado JWL de algunos explosivos (ver acápite 4.1) para modelar las explosiones en AUTODYN. Por lo tanto, en este apartado solo se reportarán los resultados de cinco compuestos, y el resto se encuentra adjunto en el Anexo A.

Los cinco explosivos que son estudiados en este apartado corresponden a altos-explosivos con un balance de oxígeno negativo; es decir, requieren oxígeno de su entorno para reaccionar completamente. Los compuestos estudiados son: TNT, C-4, Octol 75/25, PBX-9502 y Pentolite 50/50.

En la Tabla 3-8 se adjuntan los valores de densidad de carga límites para los cuales los altos-explosivos empiezan a desarrollar condiciones oxígeno-deficientes, donde parte de la energía de postcombustión no se libera, es decir, queda combustible sin reaccionar.

Tabla 3-8: Densidad de carga límite para los explosivos en estudio.

Explosivo	TNT	Comp-C4	Octol 75/25	PBX-9502	Pentolite 50/50
$W/V_{lim}$ [kg/m³]	0.386	0.615	0.826	0.521	0.679

### 3.4.1 TNT

El trinitrotolueno (TNT), es un compuesto químico sólido de color amarillo con la fórmula  $C_6H_2(NO_2)_3CH_3$ , y se caracteriza por ser uno de los explosivos más utilizados tanto de uso militar como para aplicaciones industriales. La vasta utilización de este alto-explosivo es debido a su insensibilidad a los golpes y fricción, lo que reduce gran parte del riesgo de detonación accidental, en desmedro de otros explosivos altamente sensibles, como es el caso de la nitroglicerina (NC) (Zou, 2017).

En este apartado, se adjuntan los resultados obtenidos para el explosivo TNT, cuyo procedimiento ya se había llevado a cabo en el documento de Edri, et al. (2013). Además, se comparan los resultados obtenidos con el gráfico de presiones cuasi-estática de la UFC 3-340-02 (2008).

En la Figura 3-8, se adjuntan los resultados de la fracción molar para distintas densidades de cargas del explosivo TNT.

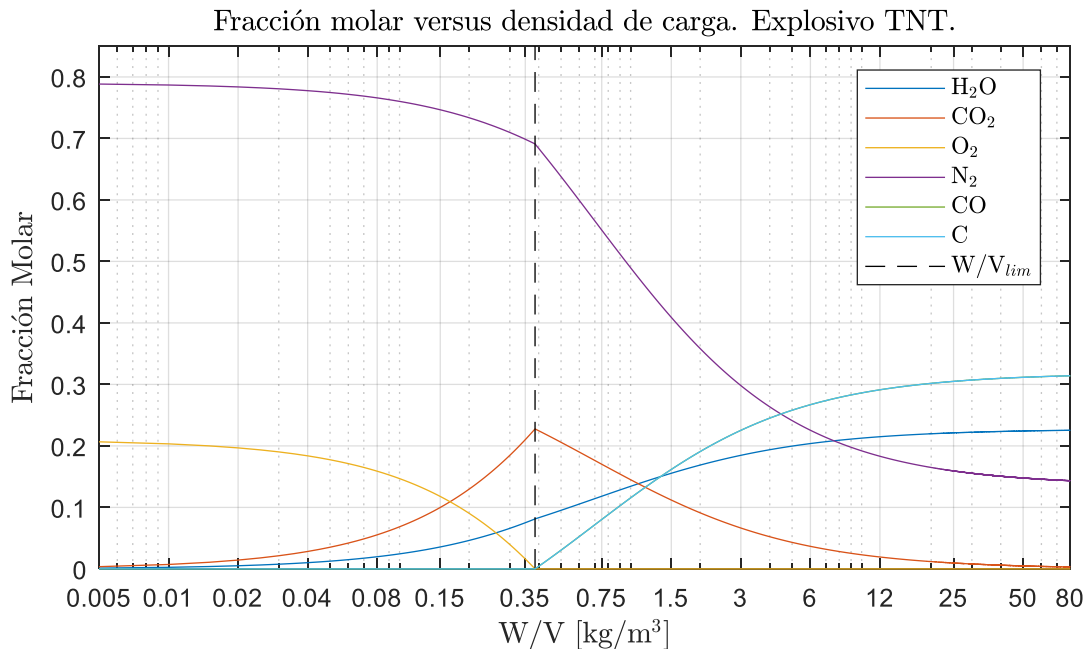


Figura 3-8: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TNT.

En la Figura 3-9, se adjuntan los resultados obtenidos para la energía de combustión liberada en el explosivo TNT. Se desprende que la mayor energía por unidad de masa se obtiene para valores  $W/V$  menores a  $W/V_{lim}$  (correspondiente a  $0.386 \text{ [kg/m}^3\text{]}$  en este caso). Esto es porque para densidades de carga menores, el explosivo tiene el potencial de reaccionar completamente con el oxígeno que lo rodea, liberando toda la energía química contenida en su interior.

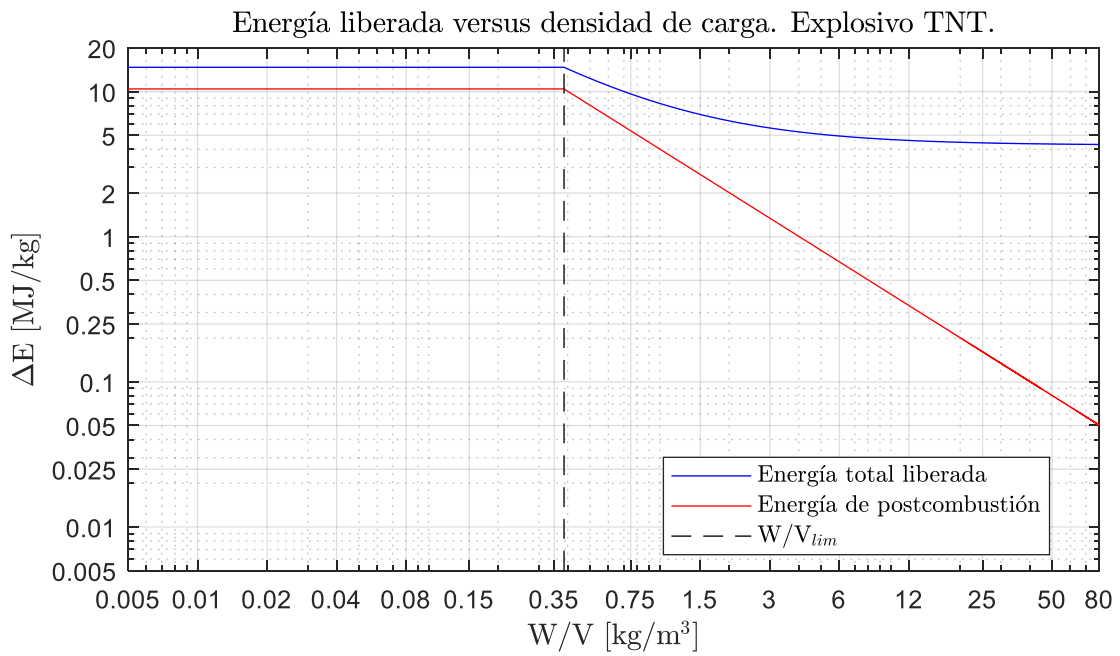


Figura 3-9 Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TNT.

En la Figura 3-10 se entregan los resultados de la temperatura residual en el sistema versus la densidad de carga de explosivo.

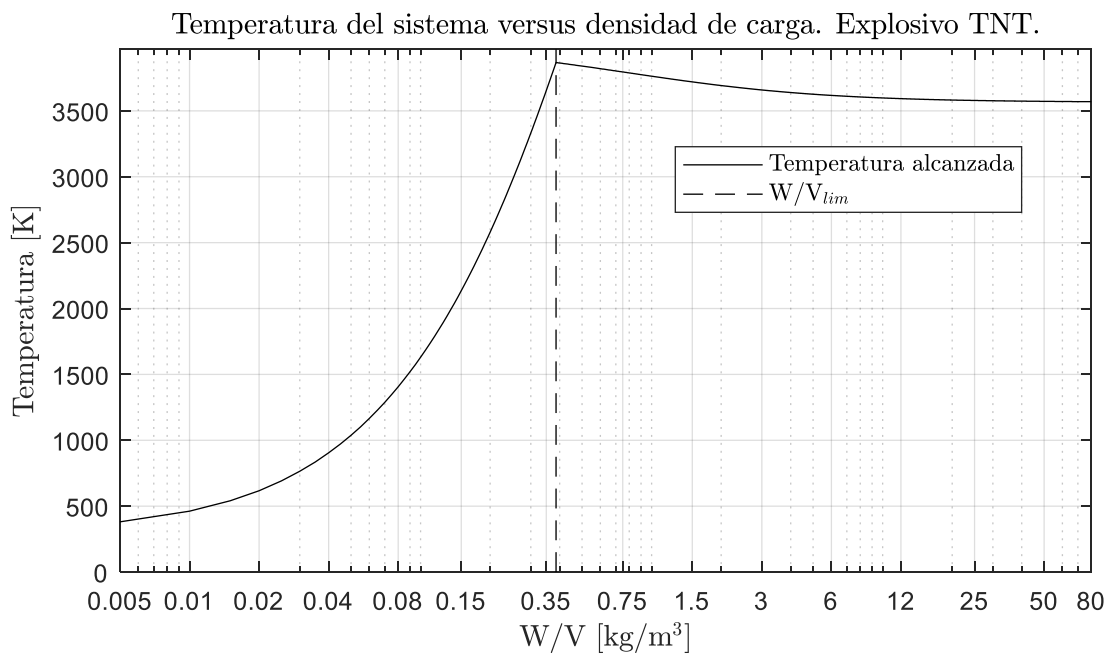


Figura 3-10: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TNT.

En la Figura 3-11, se adjuntan las presiones cuasi-estáticas obtenidas por el modelo termodinámico, acorde a lo señalado en el apartado 3.1, y la curva de presiones residuales máximas de confinamiento que se encuentran en la norma UFC 3-340-02 (2008) (que fue obtenida experimentalmente). De allí se desprende que ambas curvas presentan resultados similares en el rango de densidades de carga menores a 12 [kg/m<sup>3</sup>], donde la curva obtenida por el modelo termodinámico resulta ser mayor en todo el intervalo de estudio. Esto último se debe a que el modelo utilizado, asume conservadoramente que la mayor cantidad posible de combustible reacciona, pues, mientras exista oxígeno libre este se mezclará con reactantes para seguir liberando energía al sistema. Esto en la realidad no ocurre, pues siempre queda algún resto de oxígeno dentro de la cámara y además los compuestos formados no siempre son iguales a los determinados por el modelo.

En la Figura 3-11, se observa que existe un cambio abrupto de pendiente en la curva de presión residual del modelo termodinámico para la densidad de carga igual a  $W/V_{lim}$ , el cual se debe al cambio de una reacción de combustión completa a una oxígeno-deficiente. En cambio, para la curva de la UFC, ese cambio de pendiente se genera aproximadamente a una densidad de carga de 0.56 [kg/m<sup>3</sup>]. Esta diferencia se explica mediante el hecho de que no todo el combustible reacciona con el oxígeno de la cámara, y la deficiencia de oxígeno real se empieza a presentar para valores de densidad de carga algo más elevados.

Además, se adjunta en la Figura 3-11, las presiones obtenidas por Edri, et al. (2013), en cuya metodología fue basado este estudio. Las diferencias, en las sobrepresiones generadas se deben principalmente en modificaciones de la capacidad calorífica utilizada para el elemento  $C_{(s)}$ , de este estudio (basadas en una curva dependiente de la temperatura propuesta por Butland & Maddison (1973)), mientras que Edri, et al. (2013), asume esto como una constante igual a 5.95 [cal/mol K].

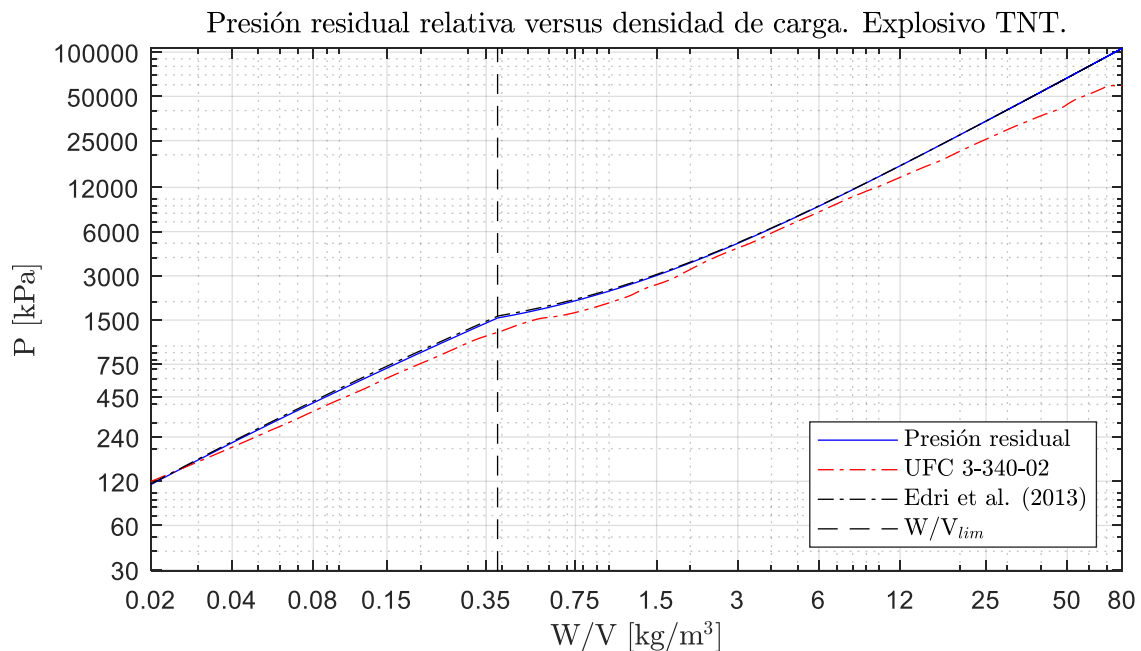


Figura 3-11: Presión residual relativa del sistema para explosivo TNT.

En la Figura 3-12 se calcula la diferencia porcentual entre lo que se determina mediante el modelo termodinámico y los datos experimentales reportados por la UFC 3-340-02, (2008). Se observa que para valores de densidad de carga menores a 12 [kg/m<sup>3</sup>] (lo cual es un valor enorme desde un punto de vista práctico), existen errores de presión menores a 25%, y por lo tanto, hay una buena predicción del modelo. En cambio, para valores de carga sobre el rango anteriormente mencionado, los errores se disparan, alcanzado incluso diferencias de 80% por sobre la UFC. Cabe mencionar que los valores de presión cuasi-estática determinada por el modelo termodinámico simplificado son por lo tanto conservadores al sobrestimar la presión residual.

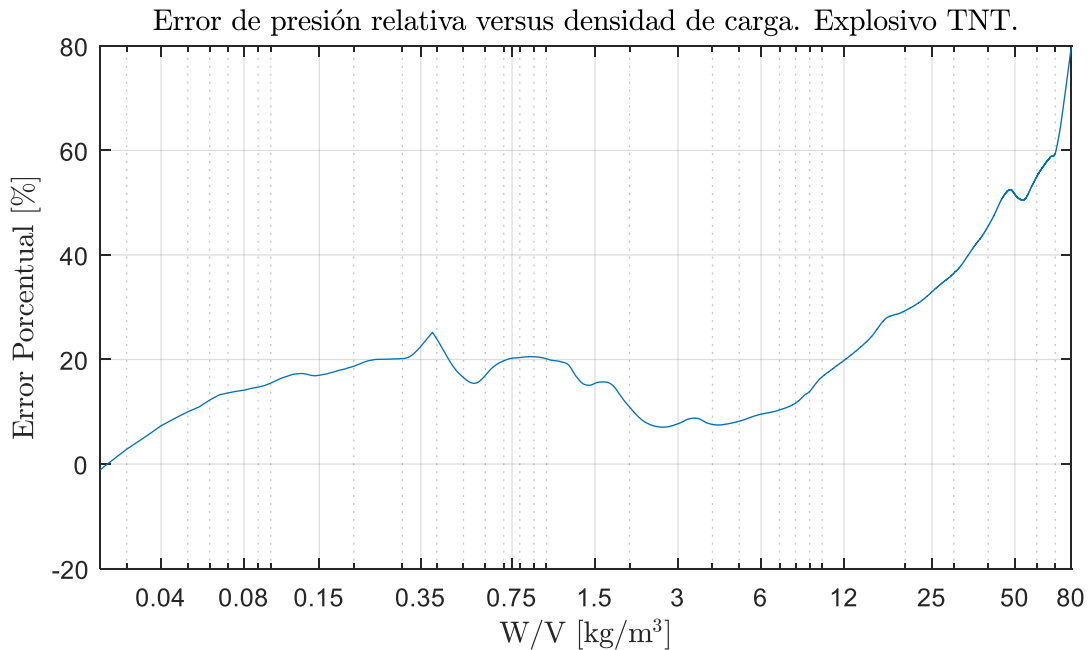


Figura 3-12: Error porcentual de presión relativa. Explosivo TNT.

### 3.4.2 Composición C-4

Los explosivos plásticos o macillas son mezclas de RDX en polvo fino, y plastificantes. Estas mezclas se caracterizan por su capacidad de ser moldeadas por la mano en la forma deseada, tal como se moldearía un trozo de arcilla (Cooper, 1996). El Compuesto C-4 está conformado por un 91% de RDX, 5.3% de Dioctyl sebacate, 2.1% de poliisobutileno, y aceite de motor (1.6%), siendo uno de los explosivos plásticos con mayor uso dentro de la milicia estadounidense por su alto poder de destrucción (Harris, 2002).

En este apartado, se adjuntan los resultados obtenidos para el modelo termodinámico del C-4. En la Figura 3-13, se encuentra la fracción molar de cada producto de la combustión del explosivo, versus densidad de carga.

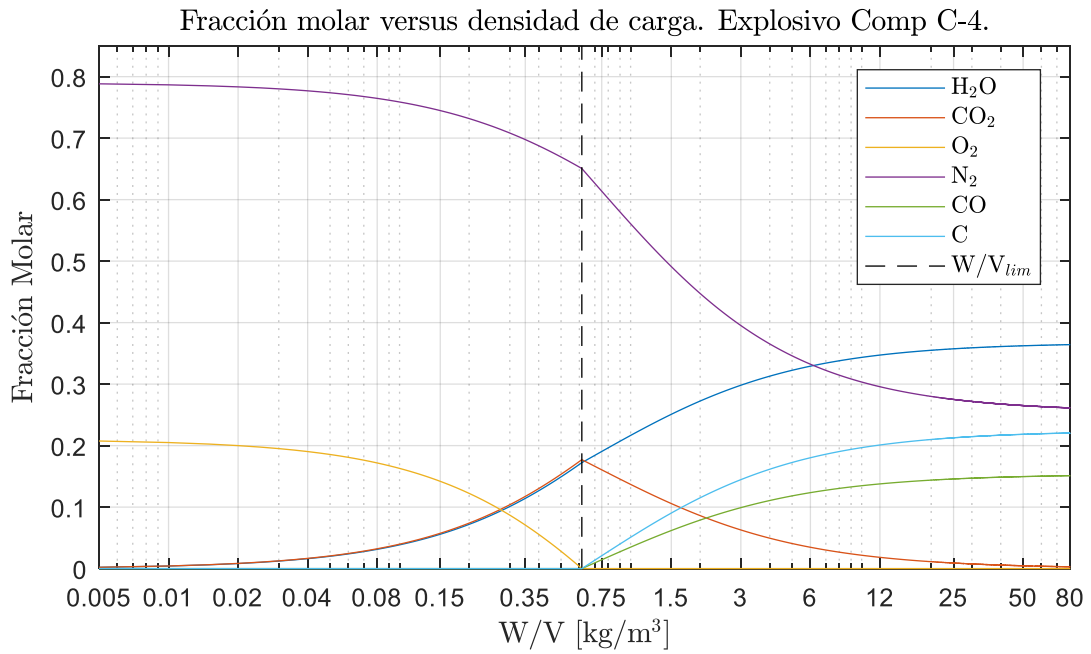


Figura 3-13: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo C-4.

A continuación, se adjunta la energía de combustión liberada para el explosivo C-4, versus densidad de carga.

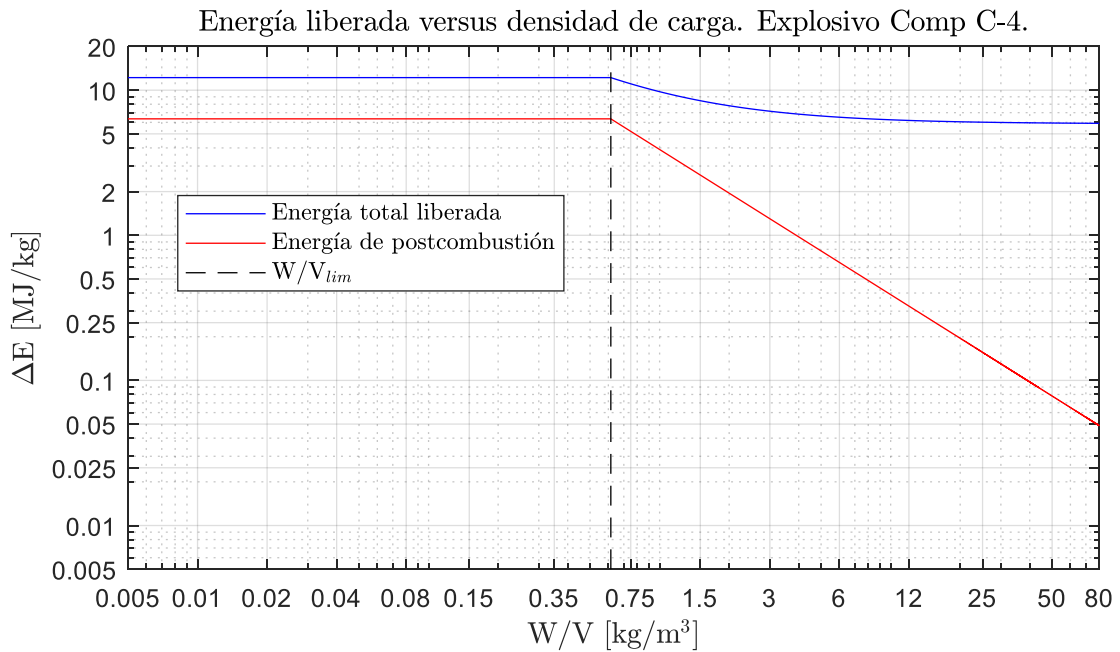


Figura 3-14: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo C-4.

En la Figura 3-15, se entrega la curva de temperatura del sistema versus densidad de carga.

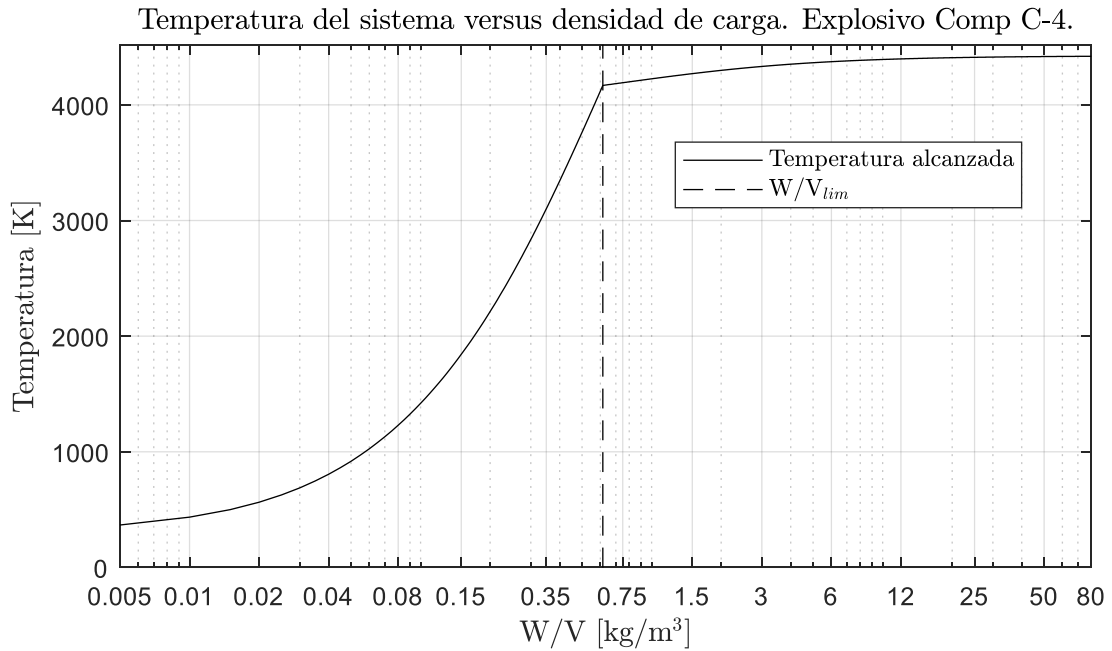


Figura 3-15: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp C-4.

En la Figura 3-16, se puede apreciar la curva de presión residual versus densidad de carga para el explosivo C-4. Adicionalmente, como comparación se muestra la presión cuasi-estática que se determina a partir de carga equivalente de TNT, según la UFC 3-340-02 (2008), y en conformidad a lo descrito por la ec.(3.30).

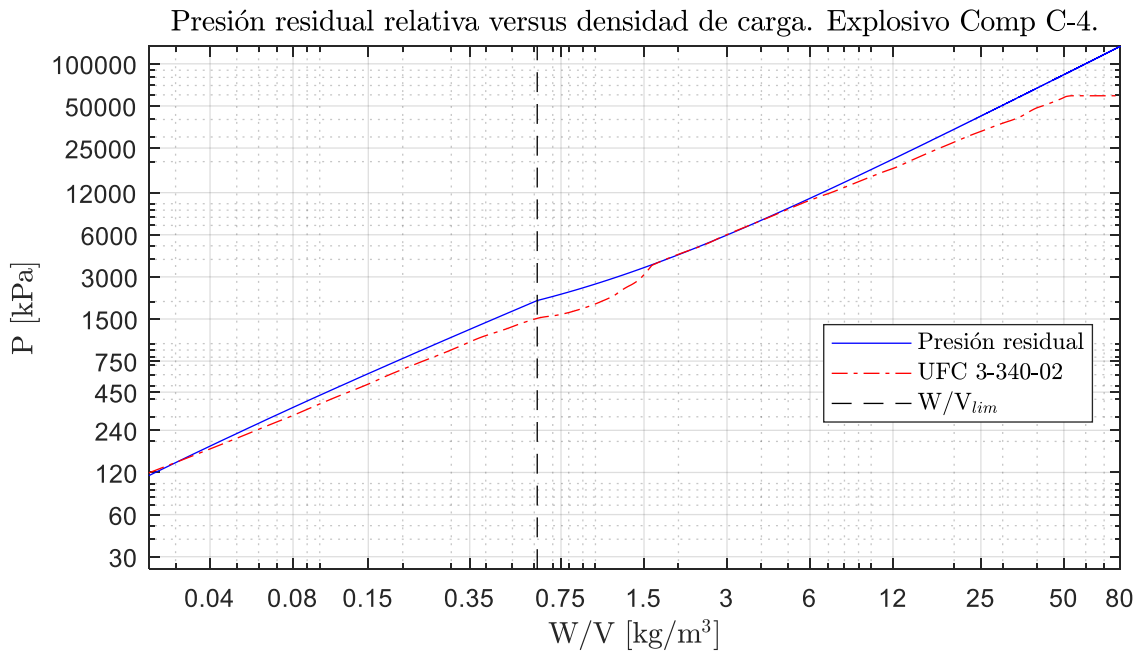


Figura 3-16: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp C-4.



### 3.4.3 Octol 75/25

Formulado en 1952, el Octol es una mezcla conformada por HMX y TNT (Akhavan, 2011), donde para este caso de estudio corresponde a un 75 y 25% respectivamente. Como explosivo fundible y moldeable sus usos son principalmente para fines militares, como proyectiles de artillería, ojivas y misiles, donde el explosivo se funde y se vacía en sus contenedores para posteriormente enfriarse y solidificarse (Monteil-Rivera, et al., 2009).

Se adjuntan los resultados obtenidos para el modelo termodinámico del Octol 75/25, en donde la Figura 3-17 entrega la fracción molar para el resultado de la combustión de este explosivo.

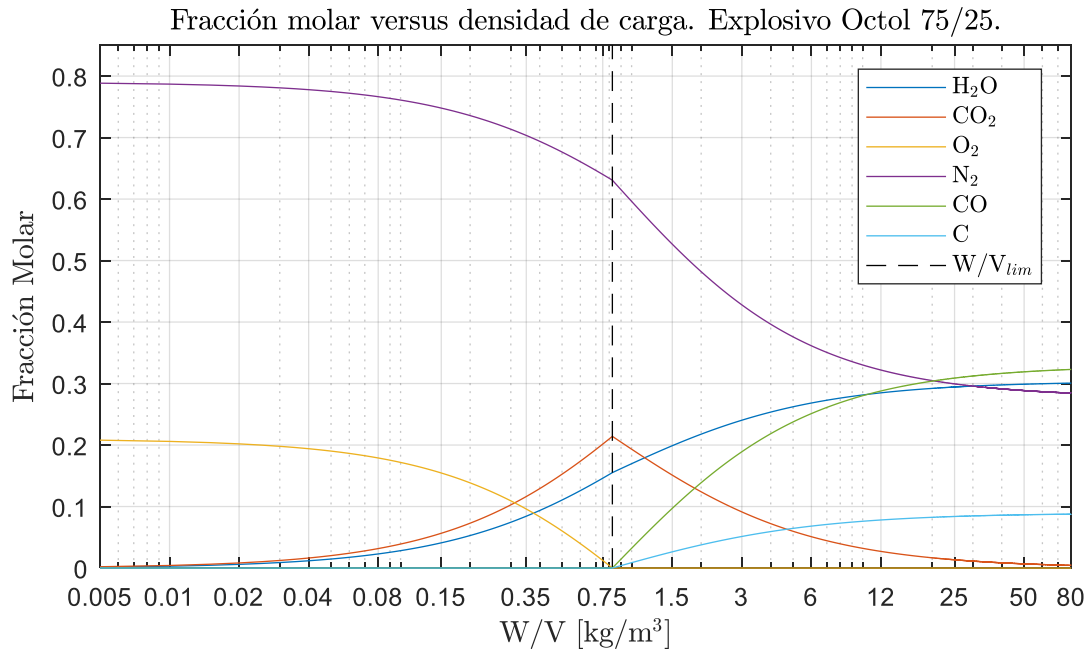


Figura 3-17: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Octol 75/25.

En la Figura 3-18, se entrega el resultado de la energía liberada versus densidad de carga para el explosivo.

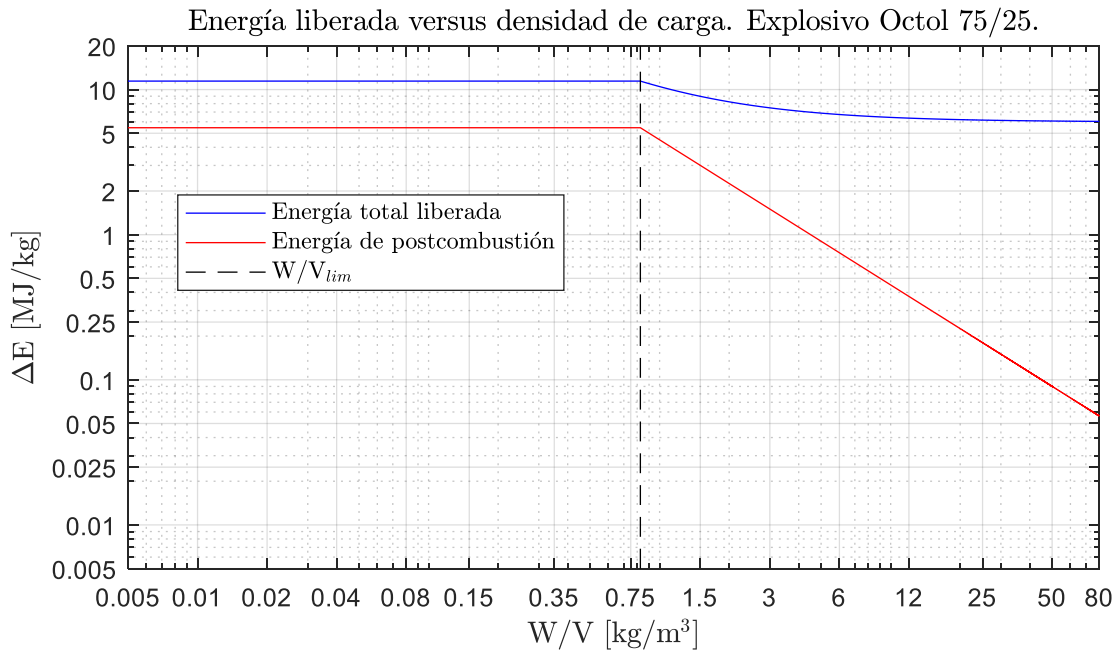


Figura 3-18: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Octol 75/25.

En la Figura 3-19, se puede ver la temperatura que alcanza el sistema versus la densidad de carga para el estado residual o cuasi-estático.

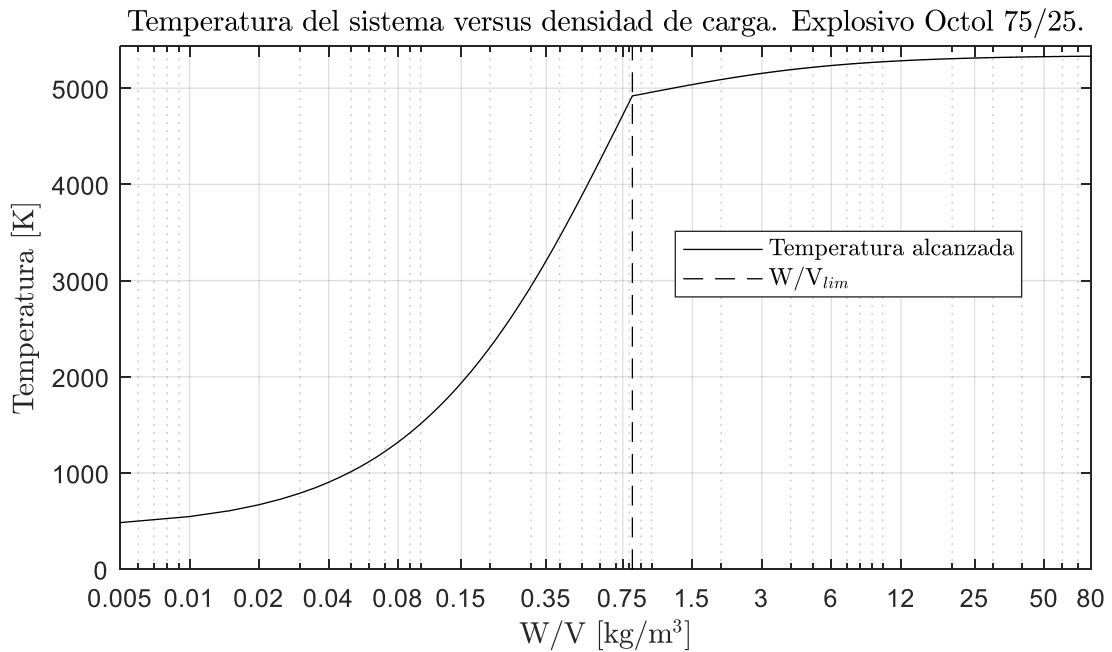


Figura 3-19: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Octol 75/25.

Finalmente, en la Figura 3-20, se adjunta la curva de presiones cuasi-estáticas para el explosivo Octol 75/25. Adicionalmente y con fines comparativos, se muestra la presión cuasi-

estática que se determina a partir de carga equivalente de TNT según la UFC 3-340-02 (2008), y en conformidad a lo descrito por la ec.(3.30).

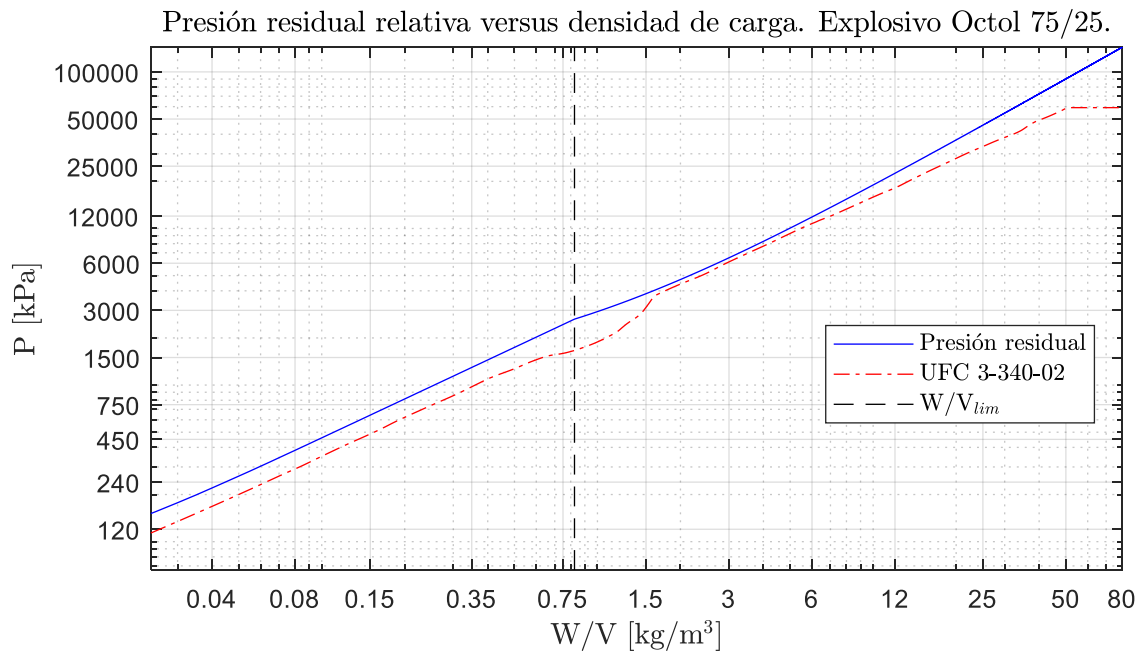


Figura 3-20: Presión residual relativa del sistema para explosivo Octol 75/25.

#### 3.4.4 PBX-9502

Los explosivos plásticos aglutinados o PBX, por sus siglas en inglés (*Plastic Bonded explosives*), son explosivos que se desarrollaron para reducir la sensibilidad de los cristales explosivos recién sintetizados, incrustándolos dentro de una matriz polimérica de tipo caucho (Akhavan, 2011). De color amarillo, y con una formulación de un 95% de TATB y un 5% de Kel-F 800 (Dobratz & Crawford, 1985), es un compuesto insensible, por lo cual su principal aplicación es en armas nucleares, reequipando de forma preventiva misiles que contienen explosivos menos seguros (Yan, et al., 2012).

Se adjunta en este apartado, los resultados obtenidos del modelo termodinámico para este explosivo, donde la Figura 3-21, contiene la fracción molar versus la densidad de carga.

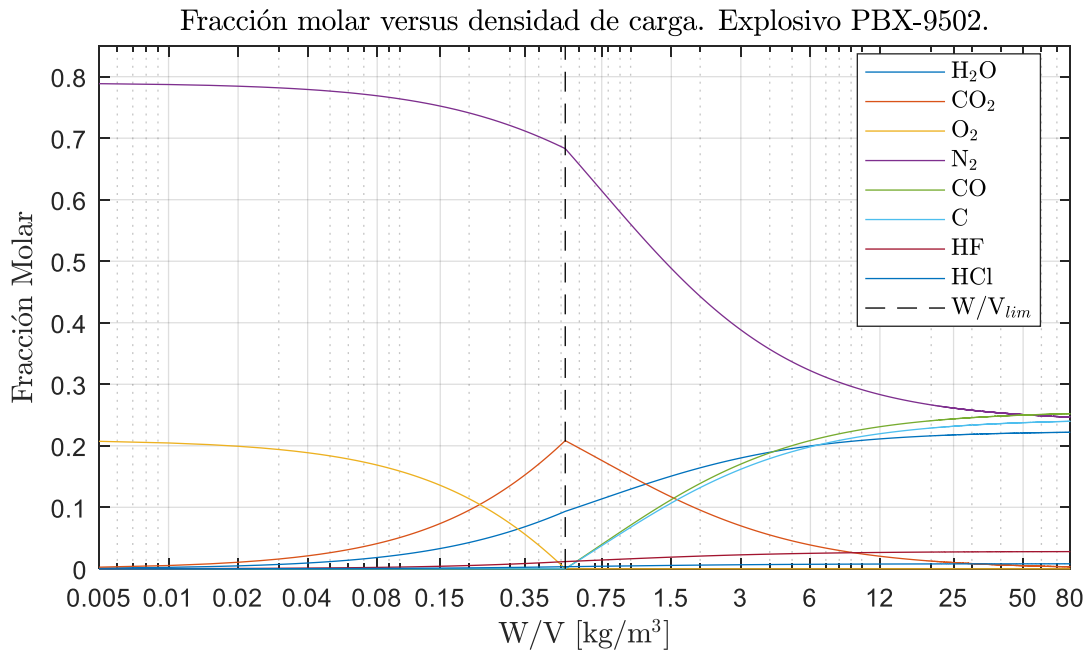


Figura 3-21: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9502.

En la Figura 3-22, se entregan los resultados de la energía de combustión por unidad de masa liberada por el explosivo, para distintas densidades de carga.

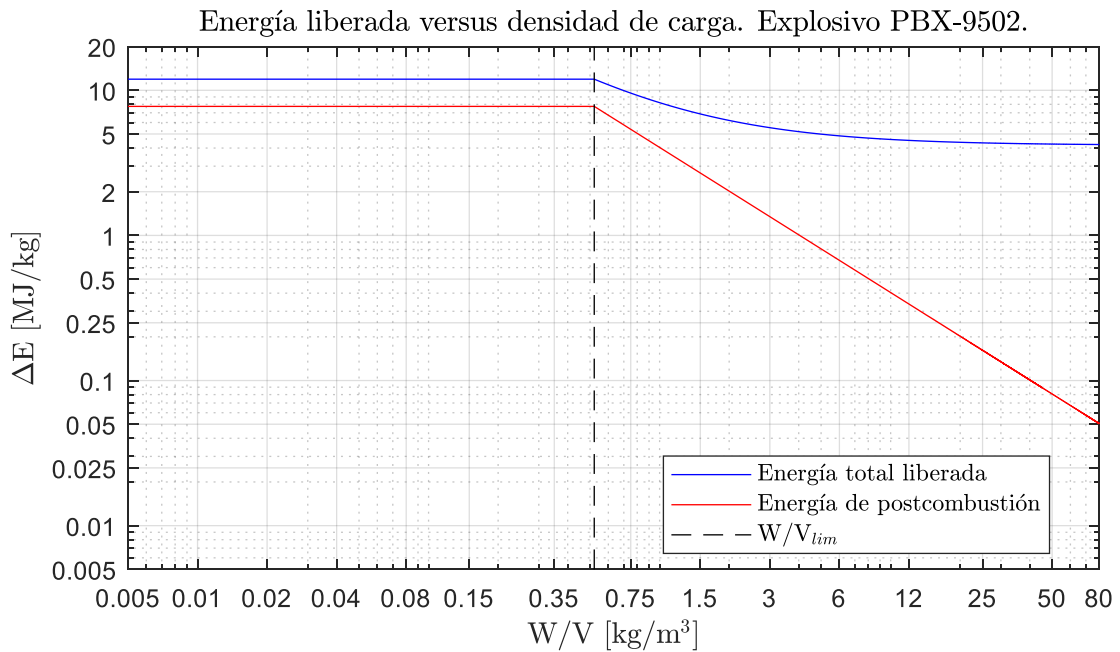


Figura 3-22: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9502.

En la Figura 3-23, se entregan los resultados de la temperatura alcanzada por el sistema.

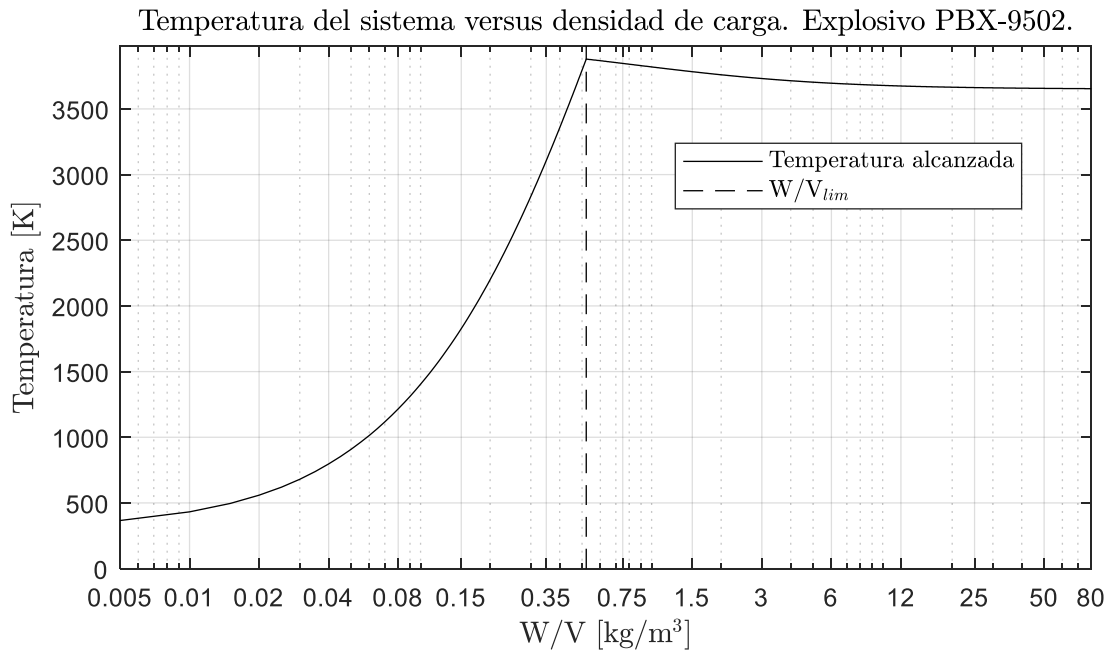


Figura 3-23: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9502.

Se entrega en la Figura 3-24, la curva de presiones residuales que alcanza el explosivo para distintos valores de  $W/V$ . Al igual que los demás explosivos, se aprecia un abrupto cambio de pendiente cuando la densidad de carga está en  $W/V_{lim}$ , es decir  $0.521 \text{ [kg/m}^3\text{]}$  para este caso. Adicionalmente y con fines comparativos, se muestra la presión cuasi-estática que se determina a partir de carga equivalente de TNT según la UFC 3-340-02 (2008), y en conformidad a lo descrito por la ec.(3.30).

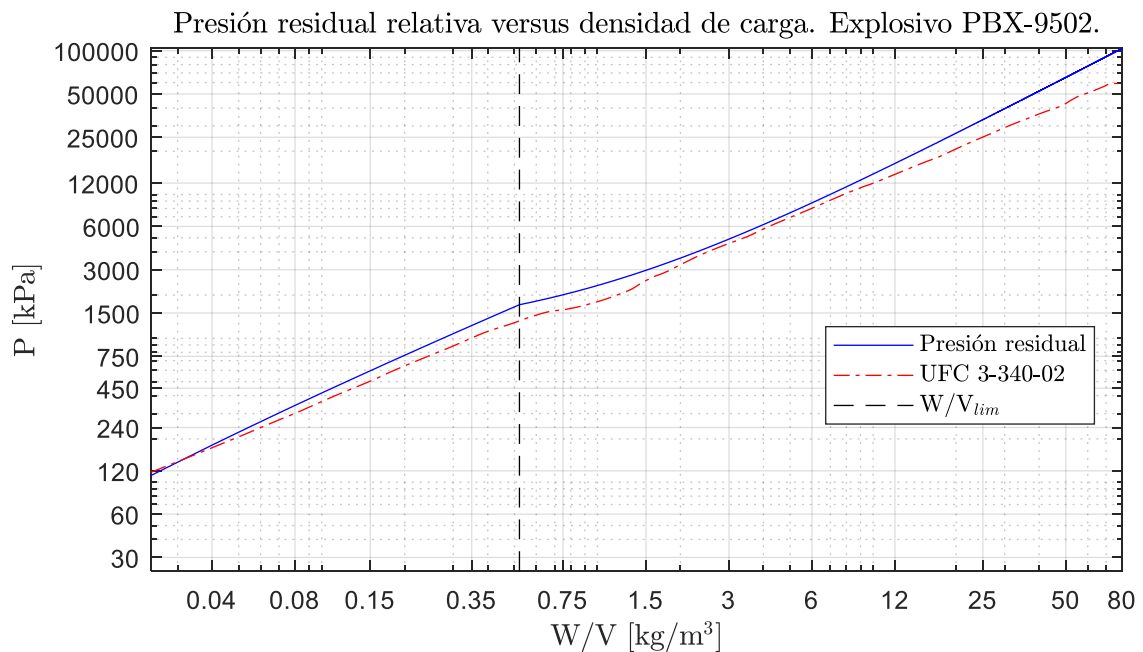


Figura 3-24: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9502.

### 3.4.5 Pentolite 50/50

Formulado por dos compuestos puros (TNT y PETN), el Pentolite es un explosivo fundible-moldeable que es utilizado principalmente como detonador de explosivos más insensibles como el ANFO (Meyer, et al., 2007), en explosiones de tipo comercial.

A continuación, se entregan los valores de la fracción molar versus densidad de carga para todos los productos generados, cuyos resultados se pueden observar en la Figura 3-25.

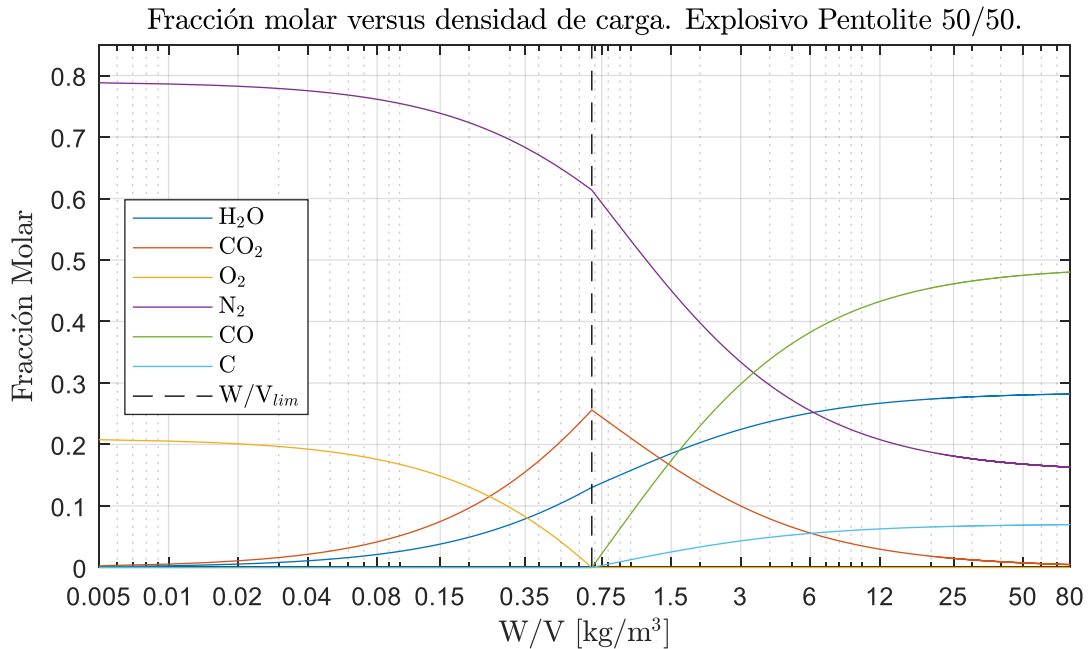


Figura 3-25: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Pentolite 50/50.

En la Figura 3-26, se entregan los valores de energía específica liberada para el Pentolite 50/50 en función de las densidades de carga del explosivo.

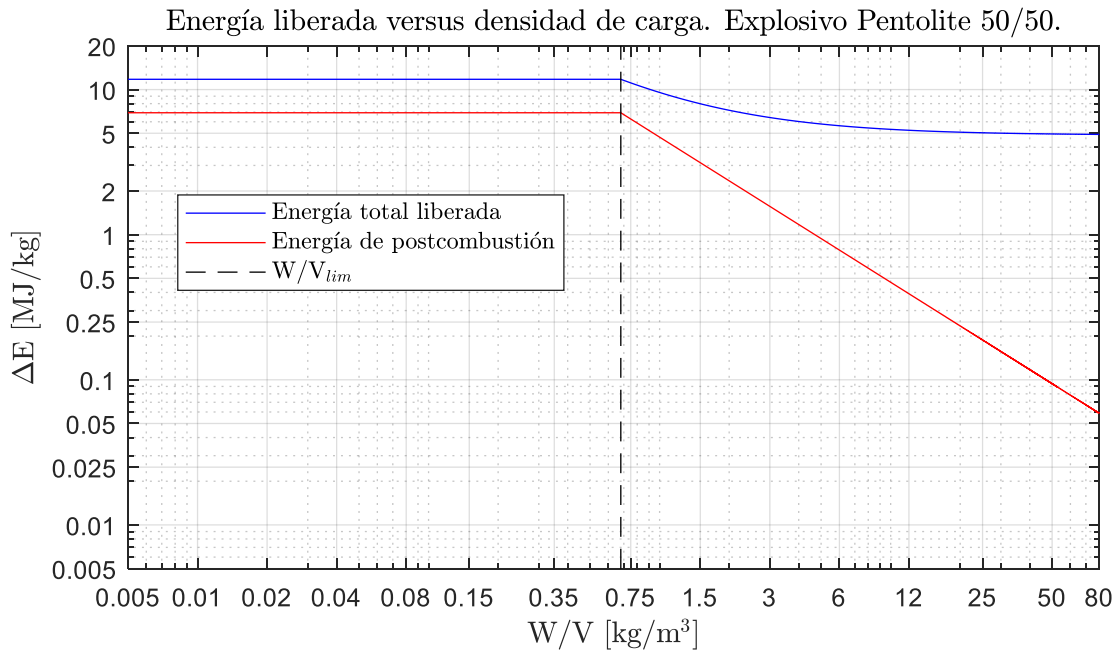


Figura 3-26: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Pentolite 50/50.

En la Figura 3-27, se entregan los resultados de la temperatura que alcanza el sistema para distintos valores de densidad de carga.

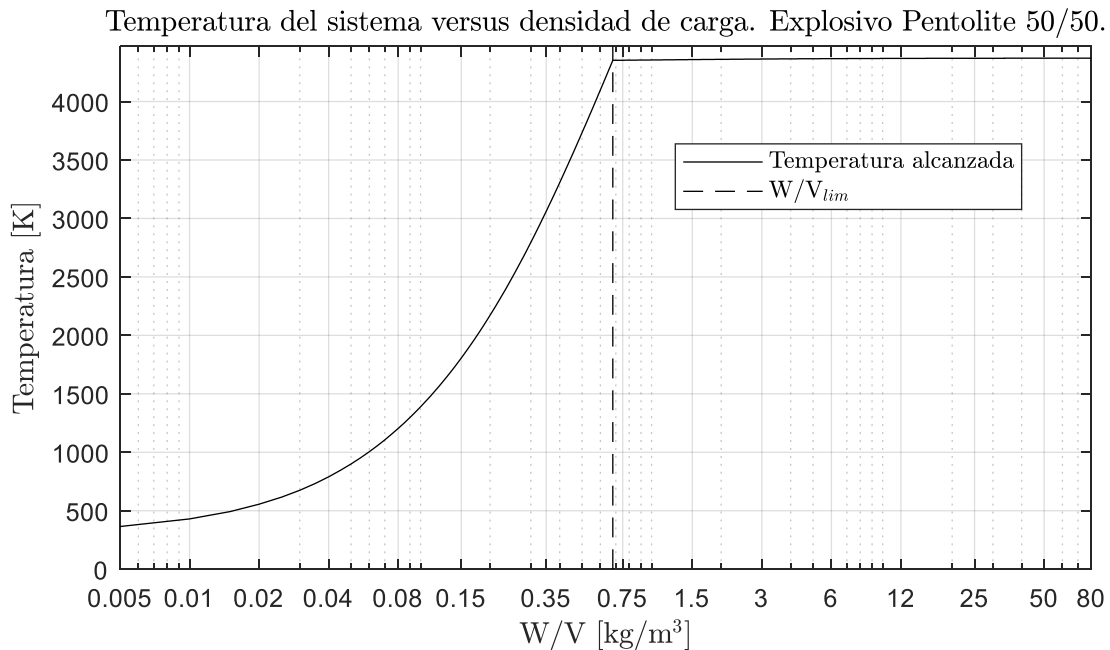


Figura 3-27: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Pentolite 50/50.

Finalmente, en la Figura 3-28, se entregan los resultados de la presión cuasi-estática generada mediante el modelo termodinámico para el explosivo estudiado. Adicionalmente y con fines comparativos, se muestra la presión cuasi-estática que se determina a partir de

carga equivalente de TNT según la UFC 3-340-02 (2008), y en conformidad a lo descrito por la ec.(3.30).

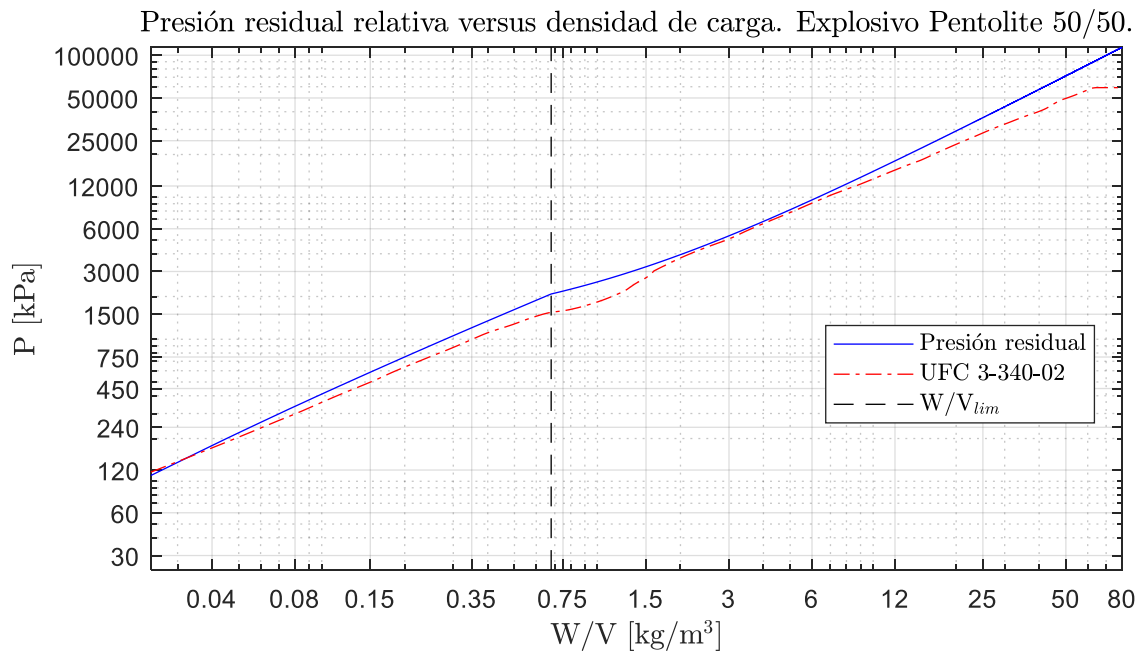


Figura 3-28: Presión residual relativa del sistema para explosivo Pentolite 50/50.

### 3.4.6 Resumen de los resultados

En este apartado se entrega el resumen de los resultados obtenidos para los 5 altos-explosivos, con el objetivo de sintetizar los gráficos generados.

En la Figura 3-29, se entregan las energías de combustión completa para los 5 explosivos estudiados.



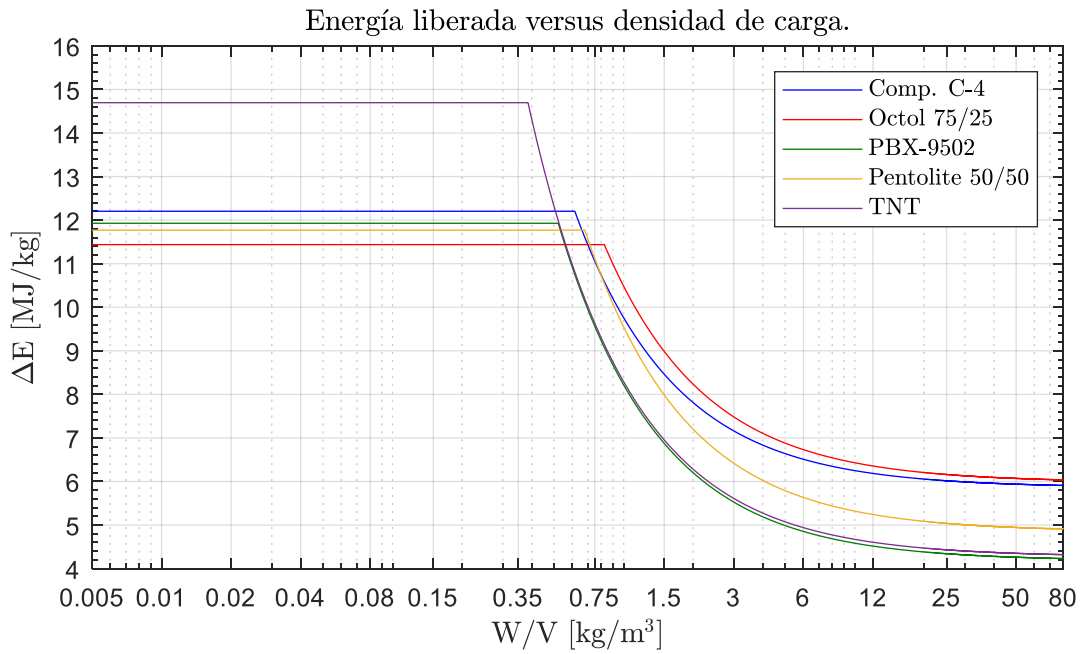


Figura 3-29: Energía total liberada por el sistema para distintas densidades de carga

En la Figura 3-30 se entrega la temperatura alcanzada por el sistema para distintas densidades de carga.

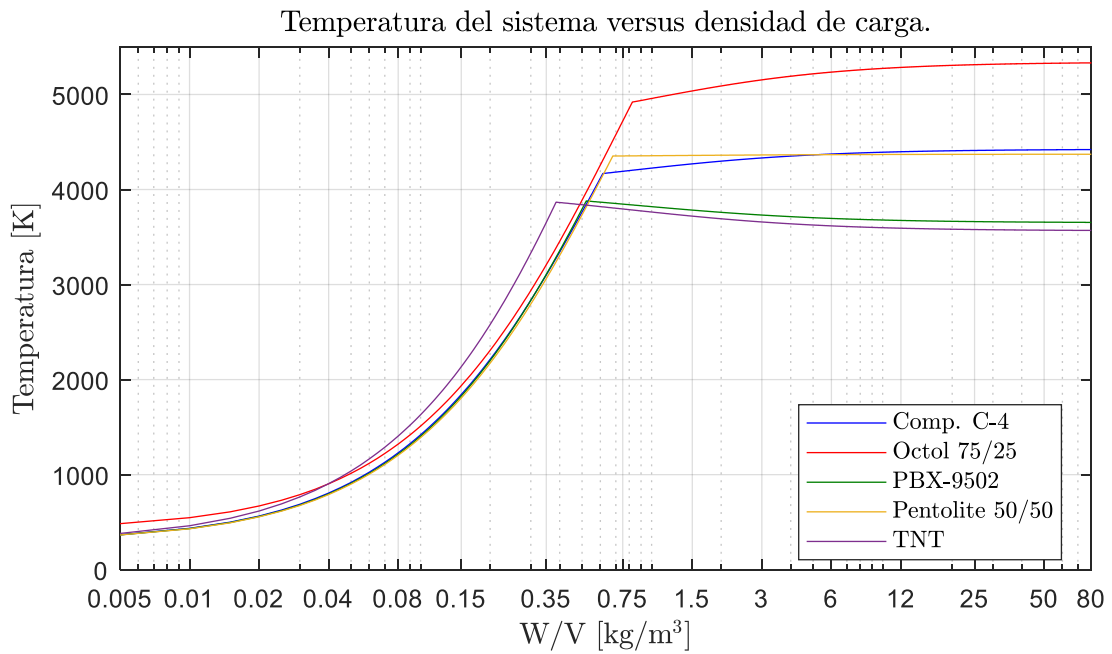


Figura 3-30: Temperatura alcanzada en el sistema versus densidad de carga.

En la Figura 3-31 y la Figura 3-32, se entregan los resultados de la sobrepresión de gas generada para distintas cantidades de alto-explosivo por volumen de cámara (para diversas escalas de densidad de carga).

Presión residual relativa versus densidad de carga.

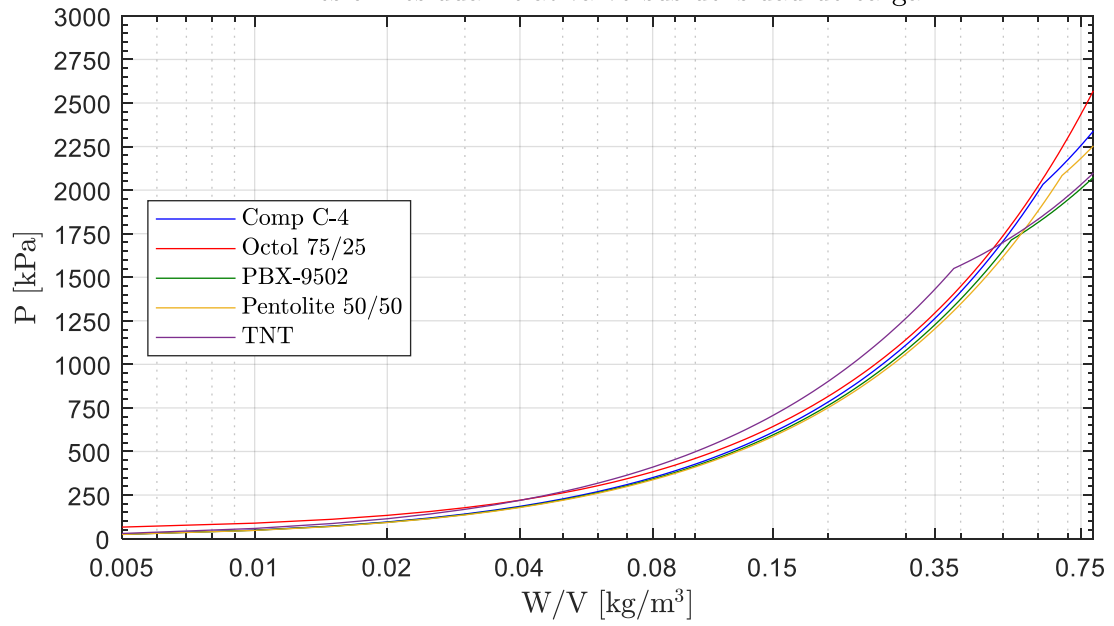


Figura 3-31: Presión residual relativa del sistema para distintos tipos de explosivos.

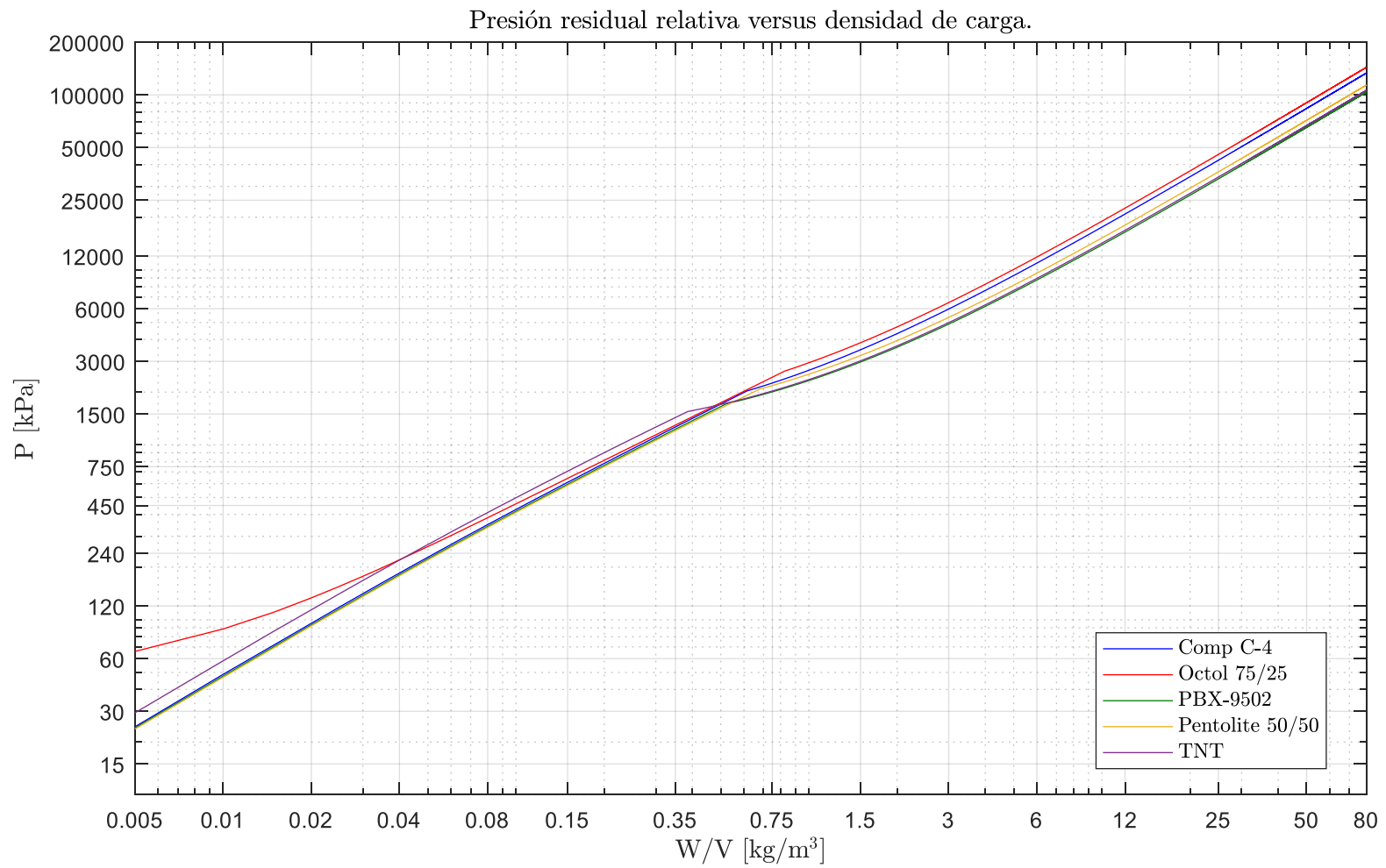


Figura 3-32: Presión residual relativa del sistema para distintos tipos de explosivos.

# Capítulo 4. Curvas de energía de postcombustión ajustadas para análisis en AUTODYN

A partir de las presiones residuales obtenidas en el Capítulo 3 con el equilibrio termodinámico simplificado, se obtendrán las curvas de energía de postcombustión adicional que deben ser usadas en el programa AUTODYN para la correcta modelación de la componente de presión de gas generada en espacios totalmente confinados.

## 4.1 Ecuaciones de estado

Una ecuación de estado relaciona variables de un material tales como, presión, volumen, temperatura y energía interna de un gas, líquido o sólido. Útiles para describir y relacionar las propiedades hidrodinámicas de un material, AUTODYN (ANSYS Inc., 2016) se vale de ellos para poder caracterizar los materiales y llevar a cabo la simulación de una explosión.

Para materiales sólidos se observa que la ecuación de estado no contempla la componente desviadora de tensiones, más bien se relaciona la deformación volumétrica (densidad) con la presión de confinamiento (modulo volumétrico) y la energía interna. En cambio, la componente desviadora, asociada a la capacidad de responder y resistir corte de un sólido, se describe por su modelo constitutivo (que se suele considerar no lineal y elasto-plástico) y cuya plasticidad se define por medio de modelos de resistencia del material. Ejemplo de ello es la de Von Mises, utilizada para materiales metálicos (el cual no es aplicable para gases o fluidos). Dado que para el análisis de las cámaras se considerarán materiales infinitamente rígidos, no se entregarán mayores detalles respecto al efecto desviador en materiales sólidos.

Para el caso de un alto- explosivo, la ecuación de estado que suele describir su comportamiento es la Jones-Wilkins-Lee (JWL), la cual ha sido ampliamente usada para describir el comportamiento de presión, volumen y energía que presentan los gases de la detonación (Dobratz & Crawford, 1985). La ecuación que relaciona estas tres variables resulta ser la siguiente:

$$P_{HE}(E_{HE}, \nu) = A \cdot e^{-R_1 \nu} \cdot \left(1 - \frac{\omega}{\nu R_1}\right) + B \cdot e^{-R_2 \nu} \cdot \left(1 - \frac{\omega}{\nu R_2}\right) + \frac{\omega \cdot \rho_{0-HE} \cdot E_{HE}}{\nu}; \quad \nu = \frac{\rho_{0-HE}}{\rho_{HE}} \quad (4.1)$$

Donde  $P_{HE}$  [kPa] es la presión del gas de los productos de la reacción del explosivo,  $E_{HE}$  [kJ/kg] corresponde a la energía interna del gas explosivo por unidad de masa,  $A$  [kPa] y  $B$  [kPa] corresponden a coeficientes de ajuste lineal que dependen de cada explosivo,  $R_1$ ,  $R_2$  y  $\omega$  corresponden a coeficientes no lineales que dependen del explosivo,  $\nu$  corresponde a la razón entre el volumen ocupado por la detonación del explosivo, y su volumen inicial, o también expresado de otra forma, corresponde a la razón entre la densidad inicial del explosivo  $\rho_{0-HE}$  [kg/m<sup>3</sup>], y la densidad ocupada posterior a la detonación  $\rho_{HE}$  [kg/m<sup>3</sup>].

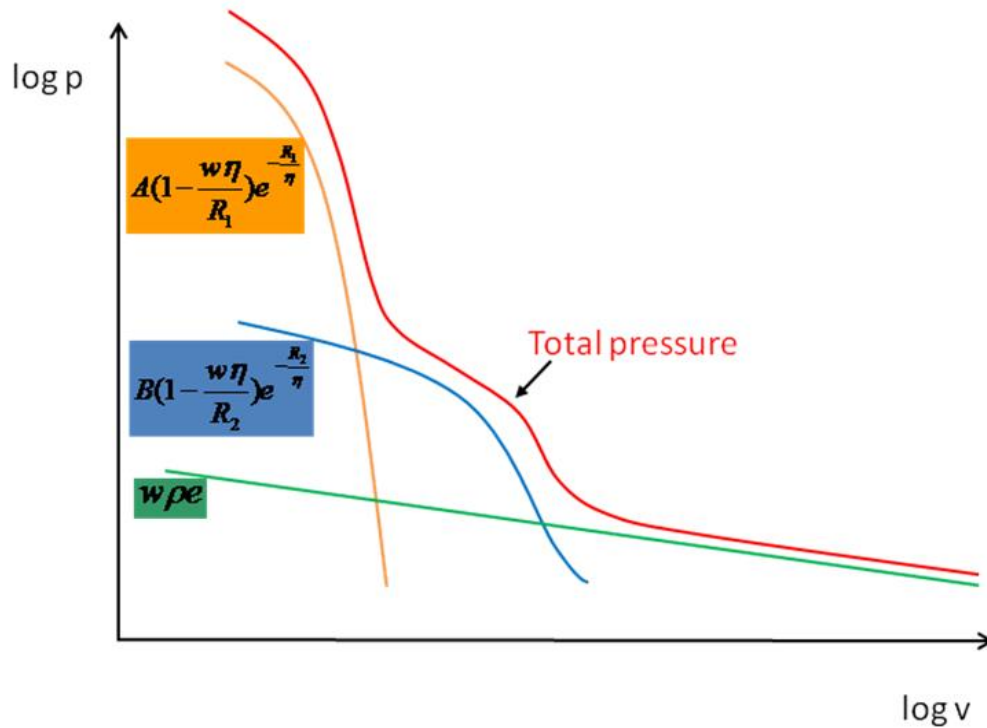


Figura 4-1: Esquema de EOS de JWL usada para explosivo, que relaciona la presión con la densidad.  
Fuente: ANSYS Inc. (2016).

Para el caso del aire, se utilizará la ecuación de estado de gas ideal, donde la ecuación (3.1) se puede expresar en forma equivalente en función de la energía interna como:

$$P_{air}(\rho_{air}, E_{air}) = \rho_{air}(\gamma_{air} - 1)E_{air} \quad (4.2)$$

Donde  $P_{air}$  [kPa] es presión del aire,  $\rho_{air}$  [kg/m<sup>3</sup>] corresponde a su densidad,  $E_{air}$  [kJ/kg] corresponde a la energía interna y  $\gamma_{air}$  corresponde a la razón de capacidades caloríficas y es igual a 1.4.

## 4.2 Descripción del método

Basados en el principio de conservación de energía, la energía interna del gas almacenado al interior de la cámara (aire y alto-explosivo) permanecerá constante en todo instante de tiempo, pues al tratarse de una explosión en una habitación cerrada e indeformable, los gases están aislados del exterior y no transfieren energía a las paredes confinantes por concepto de deformación. Asumiendo que la explosión ocurre en instantes de tiempo muy cortos, los gases no intercambiarán calor con el exterior, y por lo tanto al sistema se le puede suponer un comportamiento adiabático. Luego, la energía interna del sistema se mantiene invariante y puede ser calculada como la suma de la energía desde el estado inicial de cada gas.

$$U_{total} = E_{0-HE} \cdot m_{HE} + E_{0-air} \cdot m_{air}; \quad m_{air} = \rho_{0-air}(V - V_{0-HE}) \quad (4.3)$$

Donde  $U_{total}$  es la energía total interna de los gases [kJ],  $E_{0-HE}$  [kJ/kg] corresponde a la energía específica interna inicial del alto explosivo en estudio,  $E_{0-air}$  es la energía específica

interna inicial del aire (igual a 206.8 [kJ/kg]) en condiciones de presión y temperatura estándar,  $m_{HE}$  [kg] y  $m_{air}$  [kg] corresponden a la masa del alto-explosivo y del aire, respectivamente,  $V$  es el volumen de la cámara [m<sup>3</sup>],  $V_{0-HE}$  es el volumen inicial ocupado por el alto-explosivo [m<sup>3</sup>], y  $\rho_{0-air}$  corresponde a la densidad inicial del aire a condiciones stp (1.225 [kg/m<sup>3</sup>]).

Basados en el hecho de que el volumen y la energía permanecen constantes dentro de la cámara, y mediante la primera ley de la termodinámica, se puede determinar que la variación de energía interna de un gas corresponde al trabajo externo que realiza éste.

$$dU = dW + dQ = -PdV \Rightarrow \Delta U = \Delta W = -\int PdV \quad (4.4)$$

En particular, y dado que se tienen dos gases a distinta presión, el trabajo que realiza un gas debido a su expansión será igual al del otro gas, pero con signo opuesto. Por lo tanto:

$$\Delta U_{HE} = \Delta W_{HE} = -\int PdV_{HE} = -\left(-\int PdV_{air}\right) = -\Delta W_{air} = -\Delta U_{air} \quad (4.5)$$

Donde  $\Delta U_{HE}$  [kJ] corresponde a la variación de energía interna del alto-explosivo,  $\Delta U_{air}$  [kJ] corresponde a la variación de energía interna del aire,  $\Delta W_{HE}$  [kJ] es la variación de trabajo externo hecho por el alto-explosivo y  $\Delta W_{air}$  es la variación del trabajo externo hecho por el aire.

De la ecuación (4.5) se desprende que:

$$\Delta W_{air} + \Delta W_{HE} = 0 \quad (4.6)$$

Debido a que el trabajo hecho por los gases durante la detonación no es reversible (no isentrópico), a causa del rápido y turbulento movimiento entre las partículas de la interface aire-explosivo, el supuesto de un comportamiento isentrópico no son aplicables durante el tiempo en que el tren de ondas de choque es predominante. Por lo tanto, para poder considerar que los gases dentro de la cámara se pueden relacionar por medio un supuesto de comportamiento isentrópico, es necesario alcanzar una fase cercana a la cuasi-estática (QS), en donde las ondas de choque han sido significativamente atenuadas o equivalentemente en un instante donde la energía cinética de los gases haya sido disipada de forma tal que se pueda considerar despreciable (en comparación a su energía interna o cuasi-estática, expresada en un aumento de temperatura y presión).

#### 4.2.1 Predicción de la presión cuasi-estática ( $P_{QS}$ )

Debido al elevado tiempo computacional que puede llegar a tomar el poder lograr que toda la energía cinética del tren de ondas de choque sea disipada, Hernández, et al., (2016), propone una metodología con el objetivo de estimar la presión cuasi-estática sin energía adicional de postcombustión a la cual debería llegar el sistema.

Tomando en cuenta que, a cierto paso avanzado de tiempo, la energía cinética del sistema se ha disipado significativamente, ésta puede ser considerada de segundo orden, y que para ese tiempo los gases se comportarán preferentemente de manera isentrópica, se puede calcular la presión residual de los gases almacenados dentro de la cámara confinada para el estado cuasi-estático suponiendo un comportamiento isentrópico.

Los supuestos que se utilizan para obtener este valor se resumen a continuación:

1. El aire se comporta de manera isentrópica después de que la energía cinemática del sistema ha sido substancialmente atenuada, considerando que se satisface la condición de energía cinética menor o igual a un 1% de la energía interna, es decir, se está en un paso avanzado de tiempo.
2. Existe conservación de energía dentro del sistema, es decir, el trabajo realizado por el alto-explosivo y el aire deben ser de igual magnitud, pero de signo opuesto (ecuación (4.6)).
3. Ambos gases al estar en equilibrio alcanzan la misma presión cuasi-estática.
4. Los gases son descritos por sus respectivas ecuaciones de estado (Jones-Wilkins-Lee para el explosivo y gas ideal para el aire).

El procedimiento propuesto por Hernández et al. (2016) consiste en un procedimiento iterativo que consta de los siguientes pasos:

1. Se selecciona un valor de presión cuasi-estática,  $P_{QS}$  [kPa], cuyo valor inicial puede ser un valor similar a la presión media del aire en el paso avanzado de tiempo del modelo de AUTODYN.
2. Se calcula el volumen de aire en estado cuasi-estático,  $V_{air-QS}$  [m<sup>3</sup>], asumiendo que, para un gas ideal, en un proceso adiabático e isentrópico se tiene la siguiente relación:

$$PV_{air}^{\gamma_{air}} = cte \quad (4.7)$$

Y por lo tanto, se puede realizar la igualdad entre el estado cuasi-estático y el estado del modelo en un paso de tiempo avanzado de cálculo:

$$V_{air-QS} = V_{air-AD} \cdot \left( \frac{P_{air-AD}}{P_{QS}} \right)^{1/\gamma_{air}} \quad (4.8)$$

Donde  $\gamma_{air}$  corresponde a la razón de capacidades caloríficas del aire, igual a 1.4,  $V_{air-AD}$  [m<sup>3</sup>] es el volumen de aire obtenido de un paso de tiempo avanzado, y  $P_{air-AD}$  [kPa] es la presión de aire media en ese mismo tiempo.

3. Se calcula el volumen del explosivo en estado cuasi-estático,  $V_{HE-QS}$  [m<sup>3</sup>], utilizando la ecuación de conservación de volumen, es decir:

$$V_{HE-QS} = V - V_{air-QS} \quad (4.9)$$

4. La densidad de los gases es calculada de las masas iniciales de cada compuesto y de los volúmenes cuasi-estáticos.

$$\rho_{HE-QS} = \frac{m_{HE}}{V_{HE-QS}}; \quad \rho_{air-QS} = \frac{m_{air}}{V_{air-QS}} \quad (4.10)$$

Donde  $\rho_{HE-QS}$  [kg/m<sup>3</sup>] y  $\rho_{air-QS}$  [kg/m<sup>3</sup>] son las densidades del alto explosivo y el aire en el estado cuasi-estático.

5. Mediante el uso de las ecuaciones de estado (ecuación (4.1) y (4.2)) se determina la energía específica del alto-explosivo,  $E_{HE-QS}$  [kJ/kg] y del aire,  $E_{air-QS}$  [kJ/kg], cuyos valores se calculan utilizando la presión cuasi-estática asumida  $P_{QS}$  y la densidad de los gases,  $\rho_{HE-QS}$  y  $\rho_{air-QS}$  calculadas en el paso anterior.
6. Se calcula el trabajo realizado por los gases, utilizando la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}\Delta W_{HE} &= (E_{HE-QS} - E_{0-HE}) \cdot m_{HE} \\ \Delta W_{air} &= (E_{air-QS} - E_{0-air}) \cdot m_{air}\end{aligned}\tag{4.11}$$

7. El trabajo externo realizado por ambos gases debe mostrar el mismo valor, pero con distinto signo (i.e. la suma de ambos trabajos debe ser 0). En caso de que eso no ocurriera, se debe seleccionar otra presión cuasi-estática.

Como referencia para la convergencia de la iteración, si la suma de los trabajos es positiva, entonces se debe disminuir la presión cuasi-estática supuesta, en caso contrario se debe aumentar.

#### 4.2.2 Cálculo de la energía adicional de postcombustión para uso en AUTODYN

Debido a que explosiones en espacios confinados no pueden ser modeladas de manera precisa por AUTODYN (Hernández, et al., 2016), se debe incorporar una energía adicional de postcombustión al material explosivo al momento de modelarlo, la cual, permite alcanzar las presiones cuasi-estáticas deseadas.

La liberación de la energía de postcombustión (*AB - After Burning*) se puede describir como una deflagración, es decir una combustión subsónica, y, en consecuencia, se puede considerar a este proceso como pseudo-estático en comparación con el proceso de detonación. Como resultado, el trabajo realizado por la energía de postcombustión puede ser supuesto como isentrópico, a pesar del hecho que modifique ligeramente las ondas de choque secundarias (Hernández, et al., 2016).

Con este supuesto, es posible estimar el estado cuasi-estático en que se debiese encontrar el aire cuando la energía de postcombustión se incluye en la modelación. Es decir, se puede estimar la presión cuasi-estática de un modelo que incluye energía de postcombustión de los resultados de un modelo que no la incluya. En consecuencia, mediante la derivación del estado cuasi-estático de la cámara sin la incorporación de la energía adicional, cuyo estado se puede obtener directamente de la modelación realizada en AUTODYN y de la metodología que fue descrita en el apartado 4.2.1, se puede determinar la energía necesaria adicional de postcombustión necesaria para lograr la presión residual que fue determinada en el Capítulo 3 o cualquier otro valor empírico.

Por lo tanto, asumiendo que el proceso de postcombustión es una combustión de tipo deflagrante e isentrópica, se puede utilizar la ecuación (4.7), válida para gases ideales en un proceso adiabático. Entonces, siguiendo el siguiente procedimiento, es posible determinar el valor de energía adicional necesario para calibrar el programa AUTODYN y obtener las presiones que se alcanzan en explosiones confinadas al momento de realizar una modelación.



1. Se debe seleccionar una presión residual absoluta, que sea obtenida de datos experimentales o a partir del modelo termodinámico simplificado (sección 3.4),  $P_{obj}$  [kPa].
2. Se calcula el volumen de aire en estado cuasi-estático con energía de postcombustión,  $V_{air-AB}$  [m<sup>3</sup>], asumiendo que, para un gas ideal en un proceso isentrópico, conforme a la siguiente relación:

$$V_{air-AB} = V_{air-QS} \cdot \left( \frac{P_{QS}}{P_{obj}} \right)^{1/\gamma_{air}} \quad (4.12)$$

3. Se calcula el volumen del explosivo con AB,  $V_{HE-AB}$  [m<sup>3</sup>], utilizando la ecuación de conservación de volumen, es decir:

$$V_{HE-AB} = V - V_{air-AB} \quad (4.13)$$

4. La densidad de los gases es calculada de las masas utilizadas para el caso sin postcombustión de cada compuesto, y de los volúmenes de estos en el estado con postcombustión.

$$\rho_{HE-AB} = \frac{m_{HE}}{V_{HE-AB}}; \quad \rho_{air-QS} = \frac{m_{air}}{V_{air-AB}} \quad (4.14)$$

Donde  $\rho_{HE-AB}$  [kg/m<sup>3</sup>] y  $\rho_{air-AB}$  [kg/m<sup>3</sup>] son las densidades del alto explosivo y el aire en el estado cuasi-estático con AB.

5. Mediante el uso de las ecuaciones de estado (ecuación (4.1) y (4.2)) se determina la energía específica del alto-explosivo  $E_{HE-AB}$  [kJ/kg] y del aire,  $E_{air-AB}$  [kJ/kg], en donde se utiliza la presión residual absoluta asumida  $P_{obj}$  y la densidad de los gases,  $\rho_{HE-AB}$  y  $\rho_{air-AB}$ .
6. Cuando se incorpora la energía de postcombustión, esta proviene del explosivo, por lo tanto, el trabajo realizado por los gases se obtiene de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \Delta W_{HE} &= (E_{HE-AB} - E_{0-HE} - \Delta E_{AB}) \cdot m_{HE} \\ \Delta W_{air} &= (E_{air-AB} - E_{0-air}) \cdot m_{air} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Mediante la ecuación (4.6) se determina que la suma de los trabajos realizados por los gases debe ser nulo, cuyo resultado se desprende del criterio de conservación de energía. Con ello, se puede despejar la energía adicional específica liberada por el alto-explosivo durante la reacción de postcombustión,  $\Delta E_{AB}$  [kJ/kg], la cual resulta de la siguiente expresión:

$$\Delta E_{AB} = (E_{HE-AB} - E_{0-HE}) + (E_{air-AB} - E_{0-air}) \frac{m_{air}}{m_{HE}} \quad (4.16)$$

La metodología propuesta por Hernández, et al. (2016), permite determinar de forma apropiada la energía adicional que se debe considerar para la modelación de una explosión confinada dentro de una cámara indeformable, independiente de la geometría que esta tenga, pues lo que importa es el estado cuasi-estático del modelo. Dicho de otro modo, la geometría

no afecta de manera significativa el proceso de postcombustión, sino que afecta en el tren de ondas de choque. Además, Hernández, et al. (2016) comprobó esta aseveración empleando tanto cámaras esféricas como cúbicas, obteniendo resultados idénticos, que validan la hipótesis.

Cabe señalar que en la sección Anexo B de la presente memoria se adjunta un ejemplo de cálculo utilizando la metodología descrita en esta sección.

Por último, en caso de ser necesaria la modelación de una explosión confinada en una cámara altamente deformable, el mismo autor propone una metodología alternativa, pero que a su vez es bastante similar a lo ya expuesto en este apartado.

### 4.3 Modelación realizada en AUTODYN

En este apartado, se describe de forma detallada la modelación de las explosiones confinadas, las cuales fueron realizadas en AUTODYN.

#### 4.3.1 Forma de la cámara de confinamiento

Resultados mostrados por Hernández, et al. (2016), señalan que las presiones cuasi-estáticas alcanzadas por un modelo en AUTODYN, no dependen de la geometría de la cámara que confina la explosión. Mientras esta sea rígida o tenga un comportamiento en la cual las deformaciones ante las cargas dinámicas generadas puedan considerarse despreciables, los procedimientos anteriormente mostrados y resultados que serán posteriormente adjuntos pueden ser utilizados sin mayor inconveniente.

Entonces, y a modo de simplificación, solo un tipo de cámara es utilizado en el desarrollo de la presente memoria. Aprovechando la simetría triaxial que se puede utilizar en Autodyn, un octavo de cáscara esférica es generado en el programa ANSYS Workbench versión 17.2, la cual posee un radio de 1525 [mm] y un espesor de 10 [mm]. El material de dicha cámara corresponde a un acero estructural, al cual se le asigna un comportamiento estructural rígido. Un mallado uniforme con predominancia de cuadriláteros de dimensiones de 20 mm por lado es realizado y modelados con elementos tipo *shell*.

En la Figura 4-2 se puede ver la cámara utilizada para realizar las simulaciones.

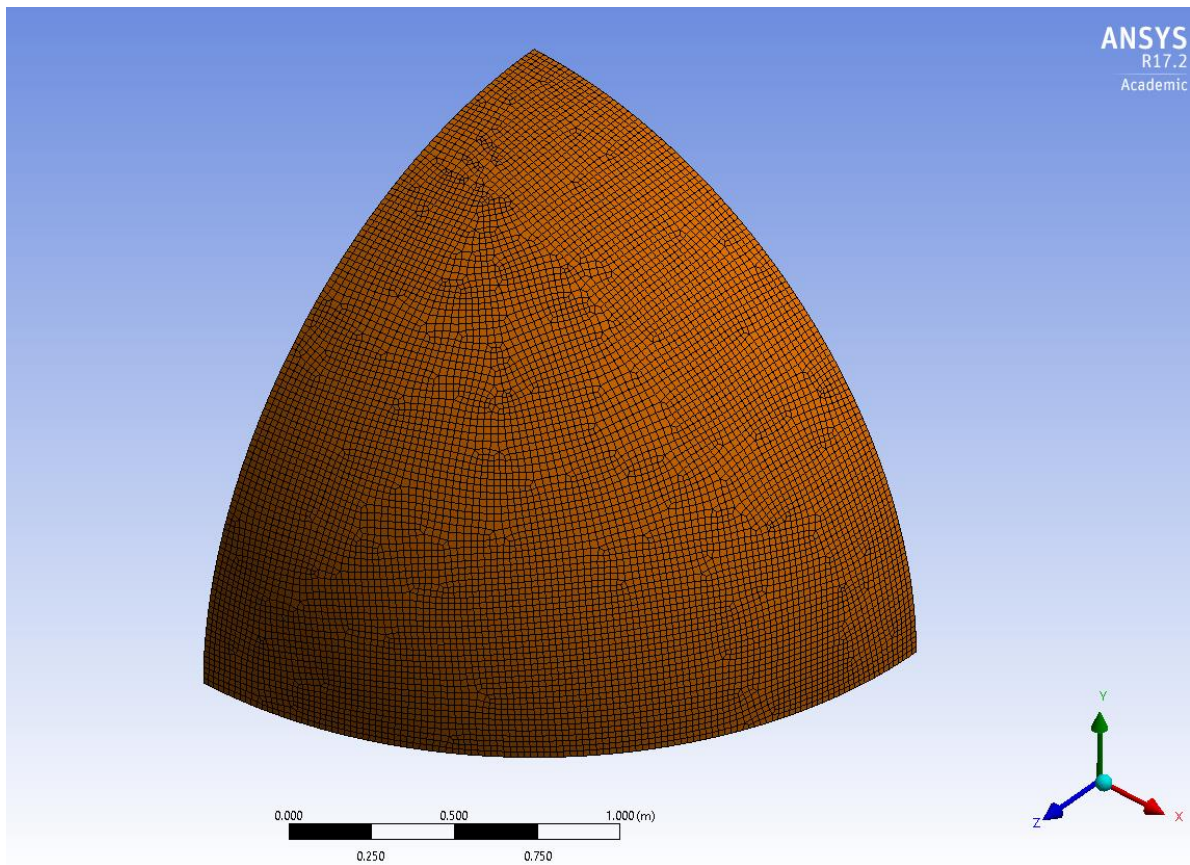


Figura 4-2: Cámara utilizada en la modelación.

#### 4.3.2 Simulación de las explosiones confinadas en Autodyn

Con el objetivo de generar un ahorro en los tiempos de cálculo, se utilizan técnicas de remapeo, que consisten en simular una explosión unidimensional, donde el explosivo se expande hasta un paso de tiempo previo a que la primera onda de choque impacte las paredes de la cámara de confinamiento. Esto se realiza teniendo en cuenta que una onda de choque no afecta las condiciones de los gases aguas arriba, puesto que esta viaja a una velocidad mayor a la velocidad del sonido. Posteriormente se exportan las propiedades de la cuña unidimensional a un modelo tridimensional, donde un octavo de esfera es utilizado como cámara de confinamiento, aprovechando la triple simetría que se puede emplear en AUTODYN para obtener los resultados.

La utilización de una cuña unidimensional para modelar los primeros instantes de la explosión significa para efectos prácticos, la suposición de que la carga explosiva es esférica. Dentro de la modelación de esta etapa, se utilizan elementos Eulerianos para simular el espacio en donde ocurre la explosión, donde la dimensión del mallado es uniforme y corresponde a un tamaño de 0.2 [mm]. El espacio es limitado también por un radio máximo de 1500 [mm] y un radio mínimo de 1 [mm]. El punto de detonación de la carga se coloca en el origen de la cuña (0,0).

En la Figura 4-3 se muestra una cuña que simula la detonación de unos 28 kg de TNT, donde el radio de la carga explosiva son aproximadamente 161 [mm]. El punto rojo corresponde al punto donde se inicia la detonación.

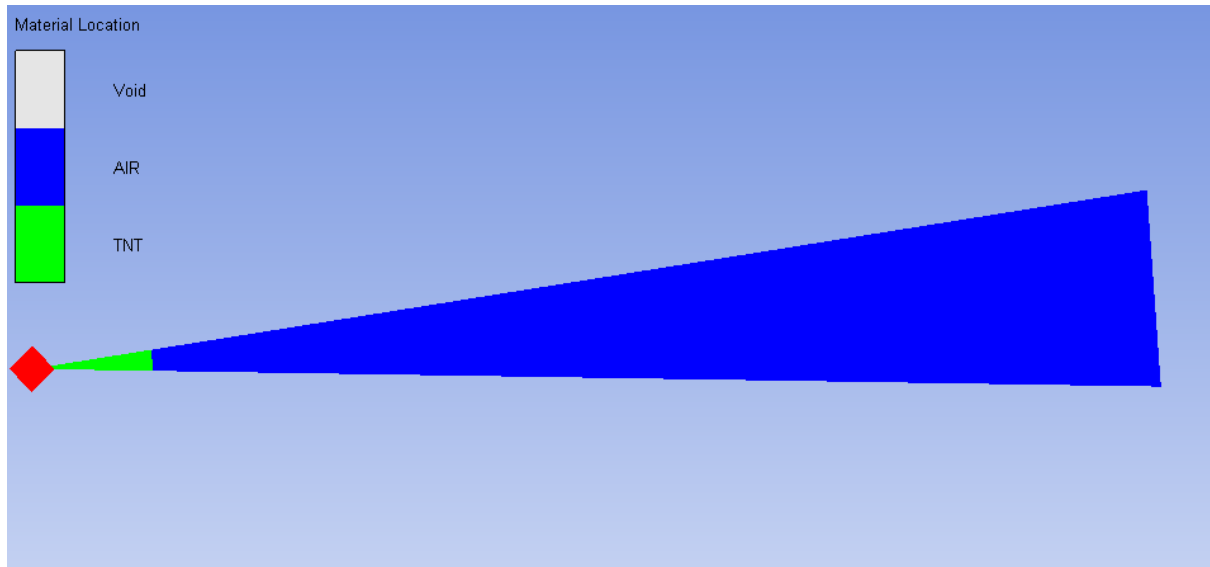


Figura 4-3: Cuña unidimensional para explosión de TNT. Estado inicial.

En la Figura 4-4 se observa las presiones generadas por la onda de choque justo previo a que ésta alcance el extremo de la cuña, donde posteriormente después del remapeo, se encontrarán cercanas a las paredes de la cámara.

Cabe señalar que, para este caso, la modelación 1D se efectuó hasta los 0.446 [ms].

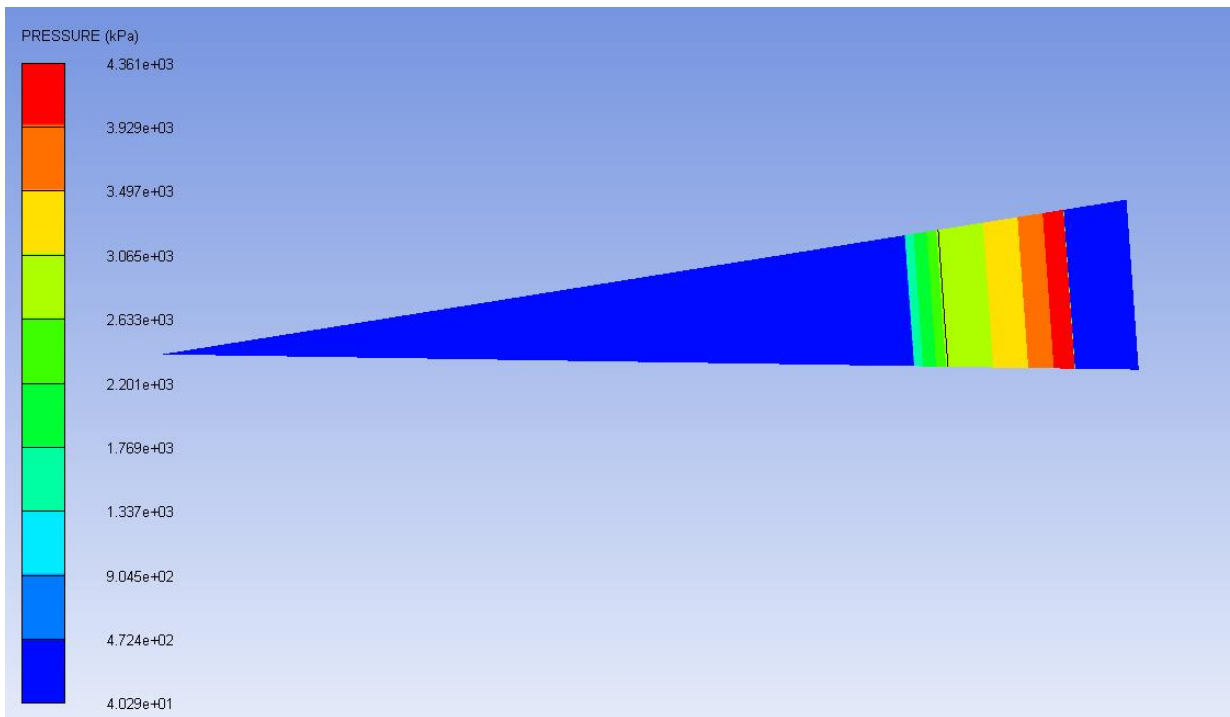


Figura 4-4: Cuña unidimensional para explosión de TNT. Estado previo al remapeo.

Para la modelación tridimensional, se utiliza un dominio de 1.6 [m] x 1.6 [m] x 1.6 [m], es decir un volumen total de 4.096 [m<sup>3</sup>] correspondientes a elementos Eulerianos, cuyo mallado corresponde a cubos de 20 [mm] de lado (consistiendo en total 512 mil elementos). En un principio este espacio es llenado completamente de aire a condiciones stp (presión y temperatura estándar). En su interior, además se encuentra la cámara rígida, la cual corresponde a un conjunto de elementos Lagrangianos. Un espesor ficticio centrado de 50 [mm] es generado para la cáscara esférica, con el fin de asegurar que la interacción Euler-Lagrange sea adecuada. Esto se realiza debido a que una malla Euleriana tiene una reflexión total en un mallado Lagrangiano sí y solo sí la frontera del mallado Euleriano está completamente ocupado por el mallado Lagrangiano. Por lo tanto, el radio de la esfera donde el gas queda confinado según el modelo se reduce a 1500 [mm], haciéndose notar que el espesor ficticio es solo empleado para considerar la interacción entre la cámara y los gases almacenados.

La Figura 4-5 muestra el modelo tridimensional del espacio y la cámara, previo al remapeo, mientras que la Figura 4-6, muestra al sistema posterior a este proceso.

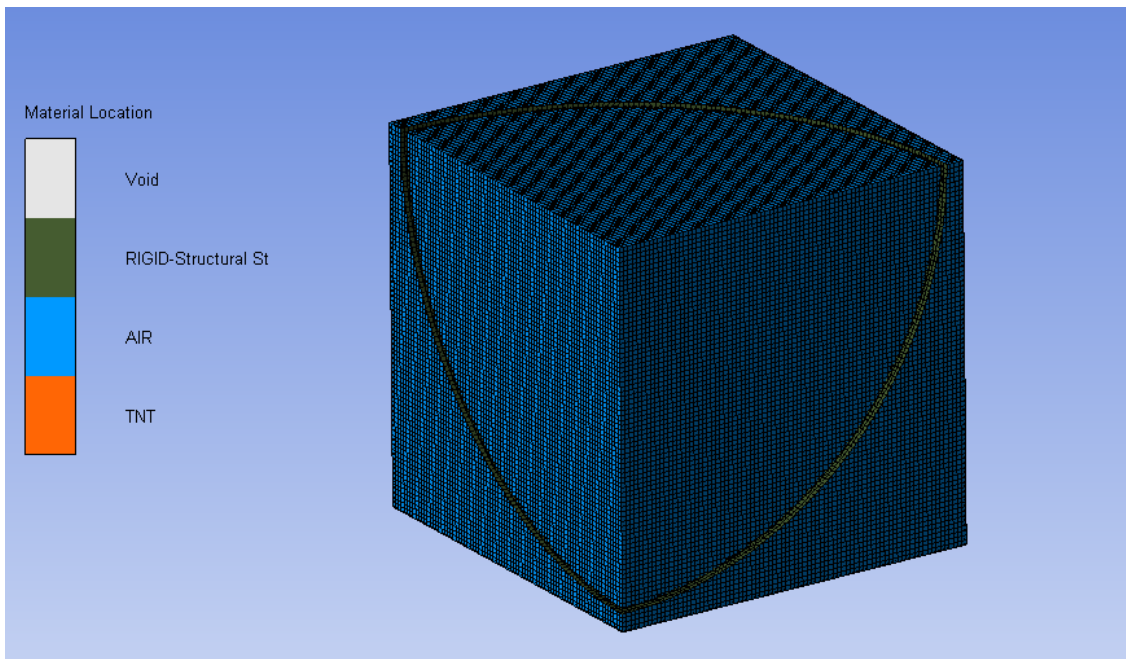


Figura 4-5: Sistema espacio-cámara previo al remapeo.

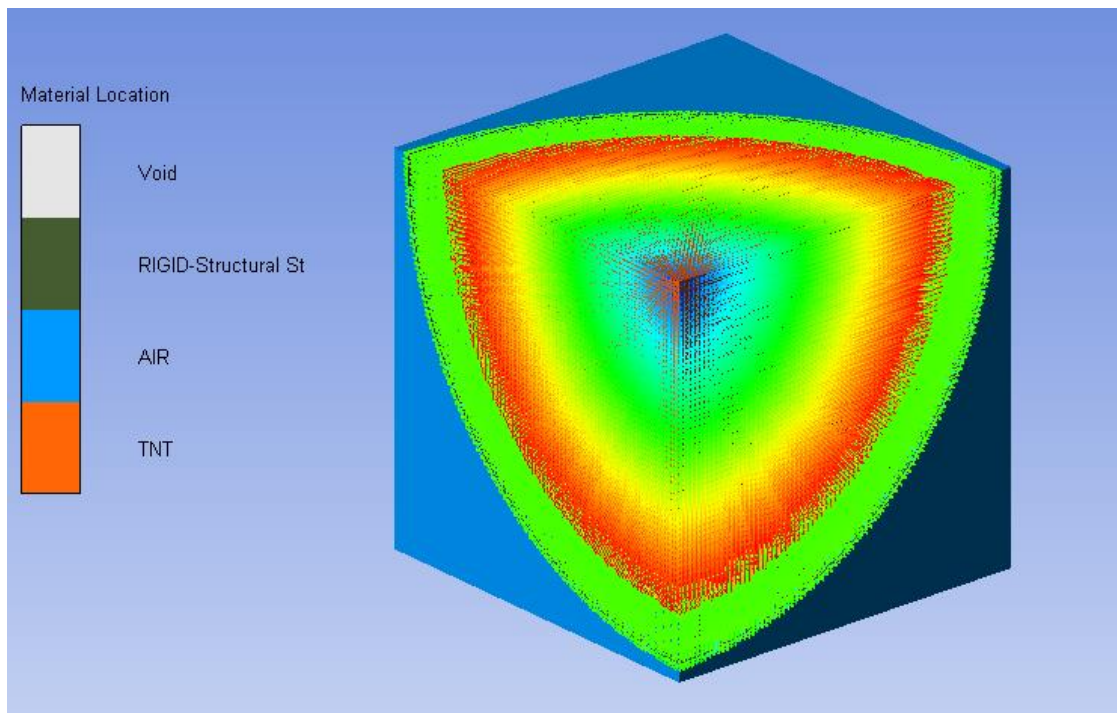


Figura 4-6: Explosión de TNT posterior al remapeo desde el modelo 1D (esquema de velocidades de la onda de choque).

Con el fin de lograr que la energía cinética del tren de ondas de choque sea lo suficientemente pequeña y con ello utilizar la metodología expuesta en el apartado 4.2, todos los modelos son corridos hasta los 20 [ms] cumpliendo así, los requisitos necesarios para

asumir que el comportamiento de los gases comienza a ser aproximadamente isentrópico (i.e., la energía cinética alojada en los gases es menor a 1% de la energía interna en éstos).

#### 4.3.3 Incorporación de la energía adicional de postcombustión

El software AUTODYN permite la incorporación de la energía adicional de postcombustión de manera simplificada, incorporando energía por unidad de masa, la cual se libera de forma lineal entre un periodo de tiempo inicial y final, que debe ser determinado por el usuario. En base a ello, Hernández, et al. (2016), supone que para la modelación en AUTODYN la energía de postcombustión comienza a ser liberada justo después de la llegada de la primera onda de choque y finaliza cuando la tercera onda de choque ha terminado de afectar a los muros de la cámara, en conformidad a las modelaciones simplificadas basadas en observaciones experimentales realizadas por Baker (1987).

#### 4.4 Explosivos utilizados y sus propiedades

Como se menciona en el Capítulo 3, se realiza las modelaciones en AUTODYN y sus posteriores curvas de ajuste para 5 explosivos: Composición C-4, Octol 75/25, PBX-9502, Pentolite 50/50 y TNT.

En este apartado se adjuntan las propiedades de la ecuación de estado JWL de cada explosivo, cuyos datos son necesarios para calcular la energía adicional de postcombustión necesaria para obtener la presión cuasi-estática deseada.

Tabla 4-1: Parámetros de la JWL para los altos-explosivos en estudio.

Explosivo	Comp C-4	Octol 75/25	PBX-9502	Pentolite 50/50	TNT
Densidad inicial, $\rho_{0-HE}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	1601	1821	1895	1700	1630
Parámetro $A$ [MPa]	609770	748600	460300	540940	373770
Parámetro $B$ [MPa]	12950	13380	9544	9372.6	3747.1
Parámetro $R_1$	4.5	4.5	4	4.5	4.15
Parámetro $R_2$	1.4	1.2	1.7	1.1	0.9
Parámetro $\omega$	0.25	0.38	0.48	0.35	0.35
Energía interna inicial, $E_{0-HE}$ [kJ/kg]	5621.487	5271.829	3730.871	4764.706	3680.982

Cabe señalar que AUTODYN posee una biblioteca de casi 60 compuestos altos-explosivos que se modelan mediante la ecuación de estado de Jones-Wilkins-Lee. Además, diversas referencias bibliográficas poseen un vasto compendio de éstas (Dobratz, 1972; Dobratz & Crawford, 1985; Lee, et al., 1973).

## 4.5 Resultados

Como ya se ha mencionado en apartados anteriores, solo un tipo de cámara es utilizado para simular las explosiones, correspondiente a una cáscara esférica de radio interno de 1.5 [m] (Volumen de 14.137 [m<sup>3</sup>]). En ella se llevan a cabo todas las modelaciones, correspondientes al estudio de 5 altos-explosivos.

### 4.5.1 Energía de Postcombustión para el explosivo TNT

Utilizando como referencia los resultados mostrados por Hernández, et al. (2016), donde se realiza el cálculo de la energía de postcombustión utilizando como base las presiones de confinamiento que entrega la guía de diseño UFC 3-340-02 (2008), se calcula la energía necesaria para lograr la presión confinada en base a los resultados obtenidos del modelo termodinámico simplificado del Capítulo 3.

Seis configuraciones de relación masa explosivo y volumen de cámara son estudiadas para el TNT, donde primeramente se modelan las explosiones sin incorporar la energía de postcombustión. Obteniéndose las presiones cuasi-estáticas para estos casos, se genera una regresión lineal, la cual presenta un buen ajuste al comportamiento del explosivo (con un factor  $R^2 = 0.9999$  para el caso de TNT). En base a esto, se determina que a pesar de usar en la modelación un tamaño de elementos finitos Eulerianos de casi el doble a los usados por Hernández et al. (2016) (20 [mm] versus 13.3 [mm]), los resultados no varían significativamente cuando se trata de calcular la presión cuasi-estática.

En la Figura 4-7 se entregan los resultados de las presiones tanto para los modelos en AUTODYN con y sin postcombustión (círculos azules y rojos, respectivamente), además de las presiones de confinamiento tanto de la UFC 3-340-02 (2008) (línea negra punteada), como la de los resultados obtenidos en el Capítulo 3 (línea azul continua) a través de un modelo simplificado.

Cabe mencionar que las simulaciones fueron analizadas en un computador con un procesador Intel Core™ i7-4770 y demoraron entre 7 y 12 horas incluyendo análisis en paralelo de 4 núcleos. De esta forma la simulación numérica de cada uno de estos casos requiere de un alto costo computacional.



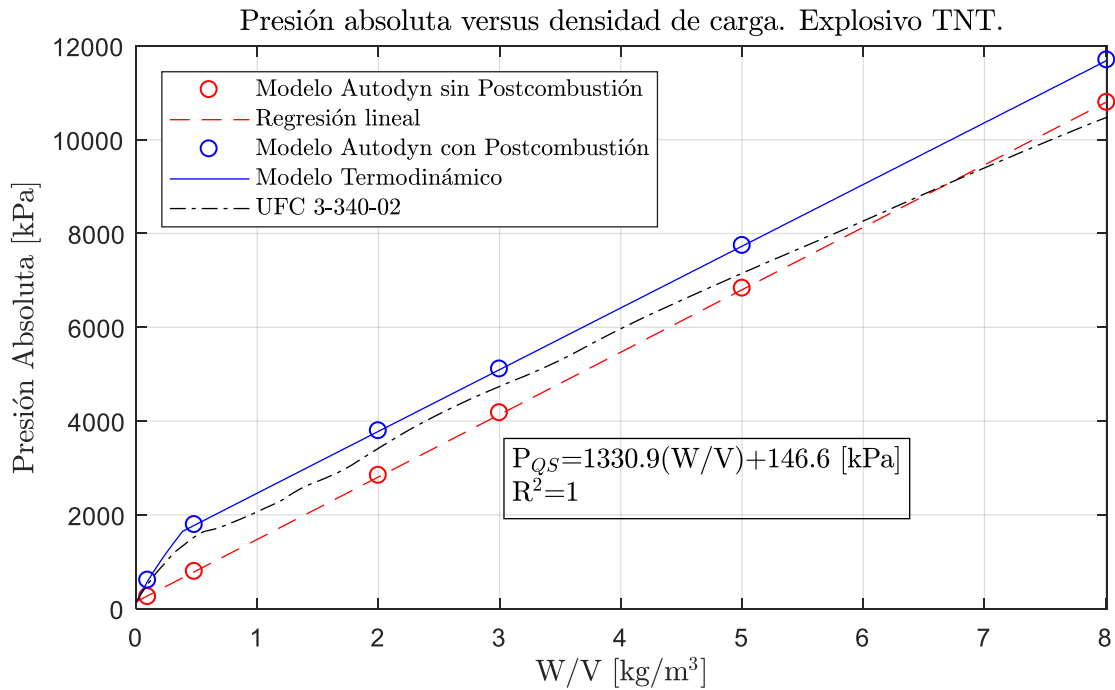


Figura 4-7: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo TNT.

En la Figura 4-8, se muestra la energía interna liberada por el TNT, que se calcula como  $\Delta E_{int-TNT} = -(E_{TNT-QS} - E_{0-TNT})$ , la cual representa el trabajo externo que realiza el TNT por unidad de masa. Se observa que, a mayores valores de densidad de carga de explosivo, menor es la energía que entrega el explosivo por unidad de masa, puesto que dentro de la cámara existe una menor cantidad de aire, y más de explosivo, y por lo tanto, para llegar a un equilibrio la cantidad de energía a ceder en el sistema por unidad de masa es menor.

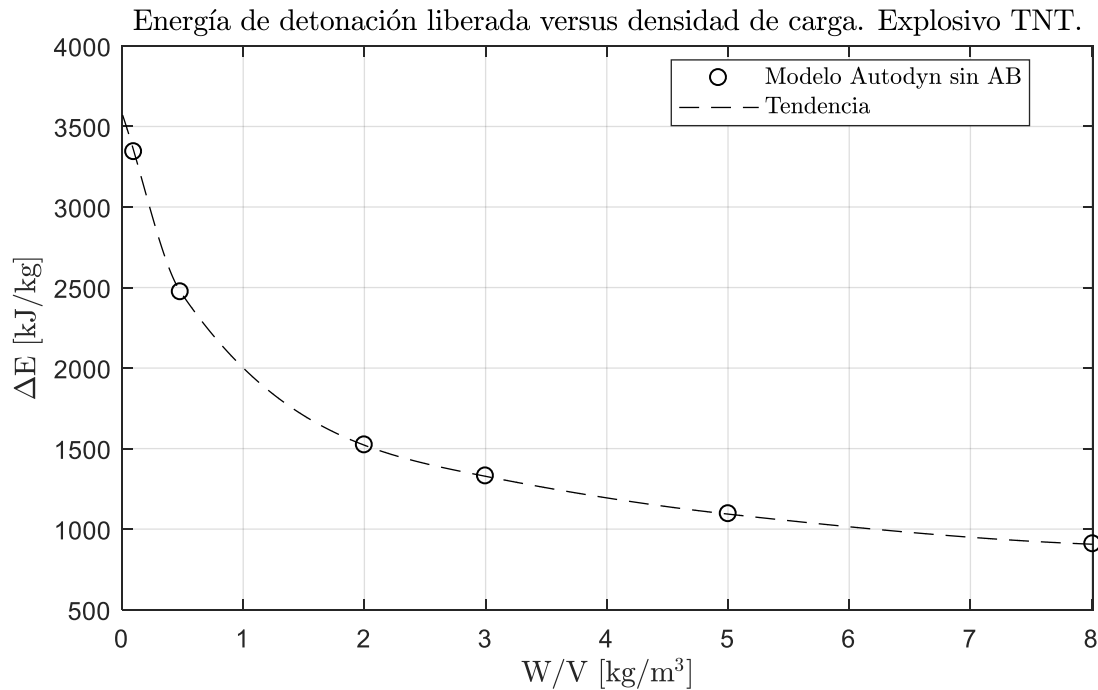


Figura 4-8: Energía interna cedida por el explosivo TNT. Modelos Autodyn sin AB.

Para la incorporación de la postcombustión, se calcula la energía adicional necesaria para conseguir las presiones residuales de confinamiento adecuadas. Es decir, las presiones cuasi-estáticas determinadas por el modelo termodinámico o por las presiones que se establecen en la UFC 3-340-02 (2008). Se generan ambas curvas con un método simplificado que propone Hernández, et al. (2016), en la cual, de forma resumida, se utiliza la relación lineal expuesta en la Figura 4-7 para calcular la presión cuasi-estática sin post-combustión, y con ello se itera hasta encontrar los valores que se ajusten al estado cuasi-estático de los gases (volúmenes ocupados por el alto-explosivo y el aire). Con estos resultados asociados al estado cuasi-estático sin la inclusión de energía de postcombustión, se realiza el procedimiento detallado en el apartado 4.2.2 para encontrar la energía de postcombustión necesaria para ajustar la presión cuasi-estática al valor objetivo (valores del modelo termodinámico o a partir de la UFC).

En la Figura 4-9, se muestran los resultados logrados, donde se observa que la energía de postcombustión necesaria para obtener las presiones cuasi-estáticas definidas por la UFC son siempre menores a la energía de post-combustión que permite obtener las presiones cuasi-estáticas del modelo termodinámico, lo cual se debe a que las presiones de confinamiento del modelo termodinámico resultan ser conservadoras (Figura 3-11), y por lo tanto, mayores a la de la UFC (cuyos resultados son más realistas al ser experimentales).

Para el caso de los modelos de AUTODYN sin postcombustión, se calcula la energía adicional necesaria para lograr las presiones de confinamiento solo para el caso termodinámico (cruces azules de la Figura 4-9), donde se aprecia que los resultados del método simplificado de postcombustión se ajustan de buena forma a lo calculado directamente usando la metodología del apartado 4.2.2.

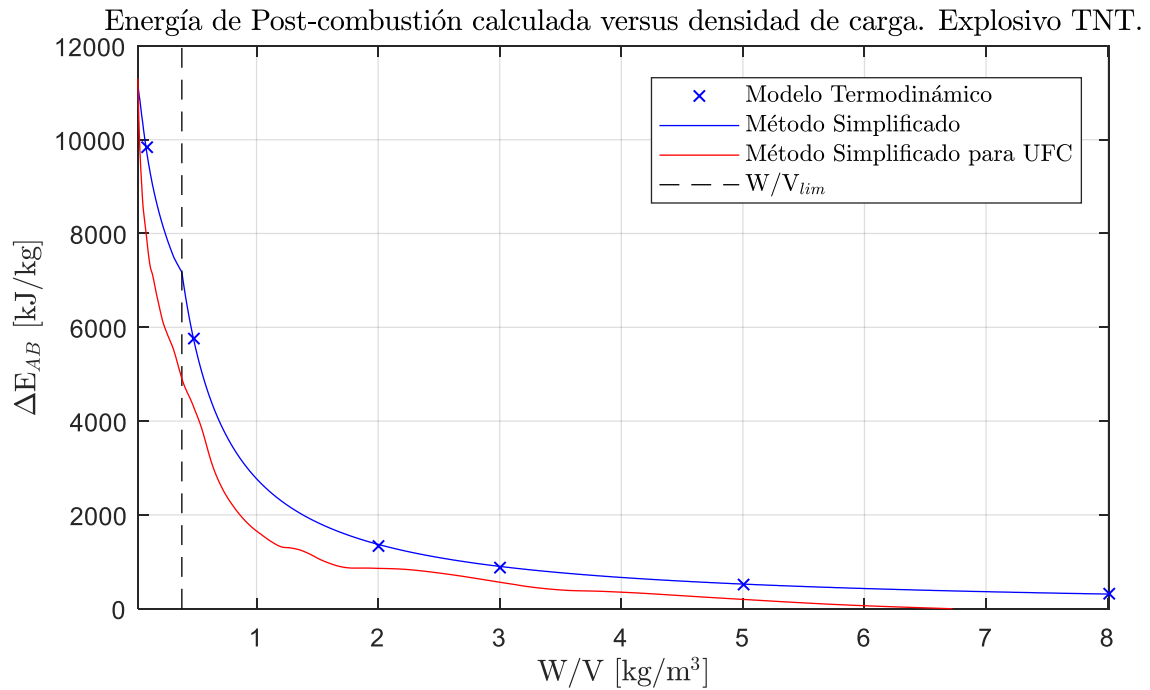


Figura 4-9: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo TNT.

Para verificar que la metodología propuesta sea consistente, y que la presión cuasi-estática con postcombustión de los modelos de AUTODYN sean acordes al valor que se debe llegar, se vuelve a modelar las explosiones de TNT esta vez incorporando la energía adicional específica calculada (Figura 4-9). En la Figura 4-7 se desprende que las presiones cuasi-estáticas de los modelos de AUTODYN con postcombustión dan acorde a lo esperado por las presiones del modelo termodinámico del Capítulo 3 (círculos y línea azul, respectivamente), donde las diferencias entre la presión del modelo AUTODYN y la objetivo, son menores a un 0.1%.

En el apartado 4.5.6, se adjuntan el resumen de los resultados de los 6 casos utilizados para generar la curva de postcombustión para este explosivo.

#### 4.5.2 Energía de Postcombustión para el Compuesto C-4

Para el caso de la Composición C-4, 12 casos de densidad de carga se estudian, donde sus valores se pueden revisar en la Tabla 4-3.

A continuación, se adjuntan los resultados obtenidos de las presiones cuasi-estáticas de los modelos AUTODYN con y sin postcombustión, y los resultados de la presión residual del modelo termodinámico obtenido del Capítulo 3.

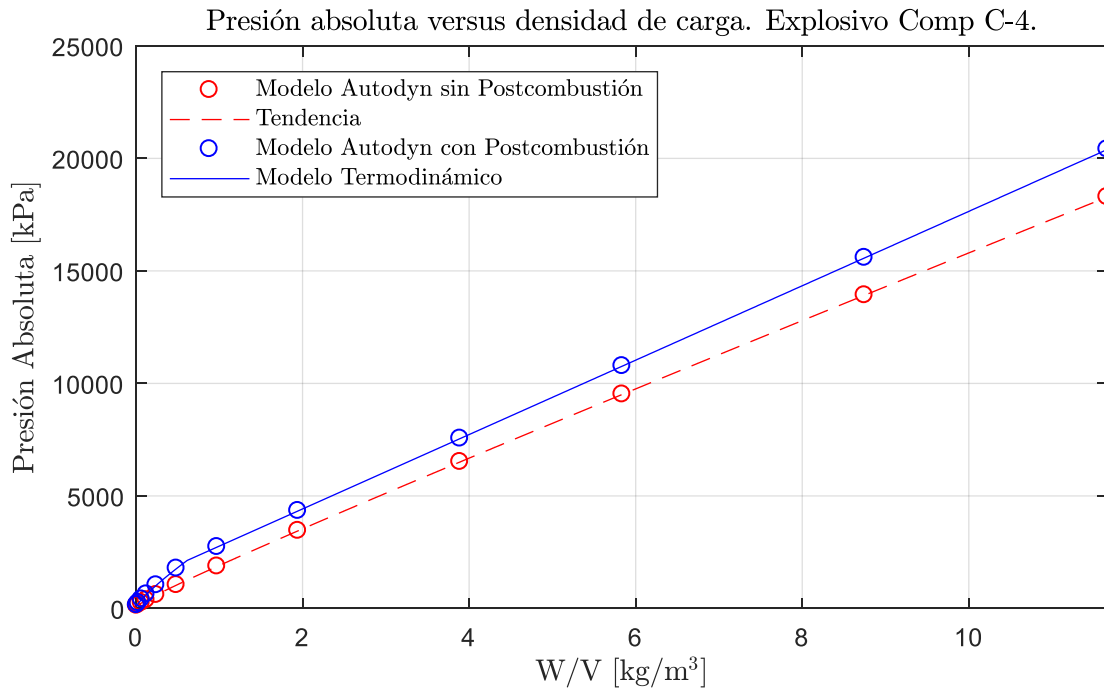


Figura 4-10: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo C-4.

Cabe señalar, que para conseguir el modelo simplificado de energía de postcombustión (ver Figura 4-12), la tendencia de presión cuasi-estática sin energía de postcombustión, correspondiente a la línea azul de la Figura 4-10, no corresponde exactamente a una regresión lineal (como fue el caso de TNT), sino que a un ajuste polinomial cúbico local que realiza con el comando *pchip* en el programa MATLAB. De igual forma, esto se realiza para los explosivos Octol 75/25, PBX-9502 y Pentolite 50/50. La motivación de realizar esto, es que, para algunos explosivos, la tendencia lineal no se ajusta bien en puntos donde la densidad de carga explosiva es pequeña, lo que trae como consecuencia problemas numéricos al momento de generar la curva de energía de postcombustión en esas zonas.

Al comparar las presiones residuales de los modelos de AUTODYN con postcombustión (círculos azules) versus la presión objetivo extraída del modelo termodinámico (línea azul), se determina que con la metodología planteada se obtiene un buen resultado, donde en el peor caso, la variación porcentual es menor al 0.2%.

En la Figura 4-11, se adjuntan los resultados de la energía de detonación liberada por el Compuesto C-4 para diferentes densidades de carga.

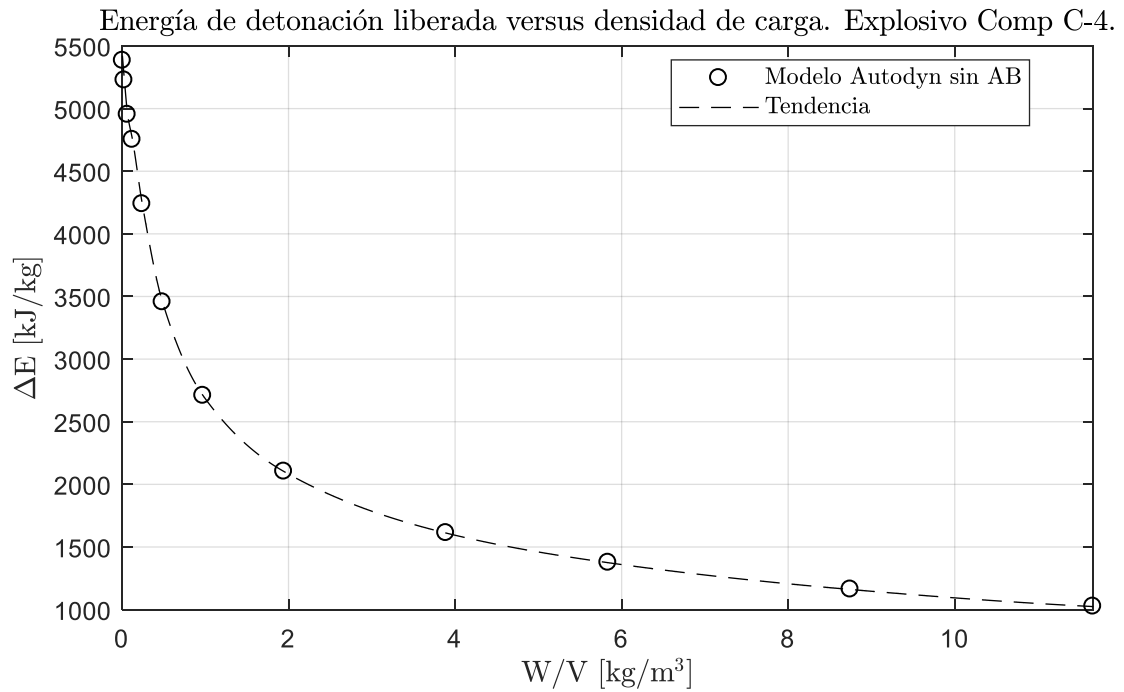


Figura 4-11: Energía interna cedida por el explosivo C-4. Modelo Autodyn sin AB.

En la Figura 4-12, se adjuntan los resultados de la curva de energía de postcombustión generada para el explosivo C-4. En la curva, se observa una clara discontinuidad en  $W/V$  igual a  $0.615$  [kg/m<sup>3</sup>], cuyo valor corresponde al cambio entre una densidad de carga con una potencial liberación de energía de postcombustión completa, a una de postcombustión parcial, lo que explicaría esta abrupta caída en la energía adicional a incorporar en AUTODYN. Este comportamiento también se presenta en los otros altos-explosivos analizados en este estudio, cuyas discontinuidades se generan en  $W/V_{lim}$ , valores que son detallados en la Tabla 3-8.

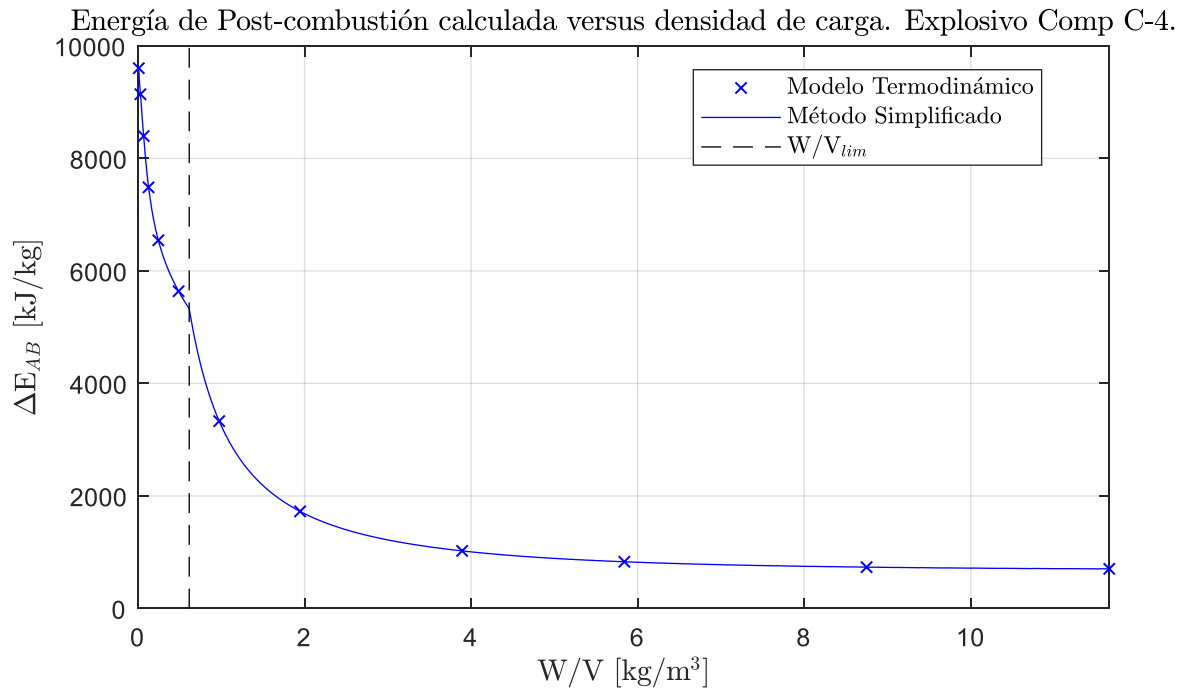


Figura 4-12: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo C-4.

#### 4.5.3 Energía de Postcombustión para el explosivo Octol 75/25

Para el caso de este explosivo, 12 configuraciones de densidad de carga de explosivo son utilizadas para generar la curva de energía de postcombustión, cuyos valores pueden verse en la Tabla 4-4.

En la Figura 4-13, se adjuntan los resultados obtenidos de las presiones cuasi-estáticas de los modelos en AUDTODYN con y sin postcombustión, y los resultados de la presión residual del modelo termodinámico.

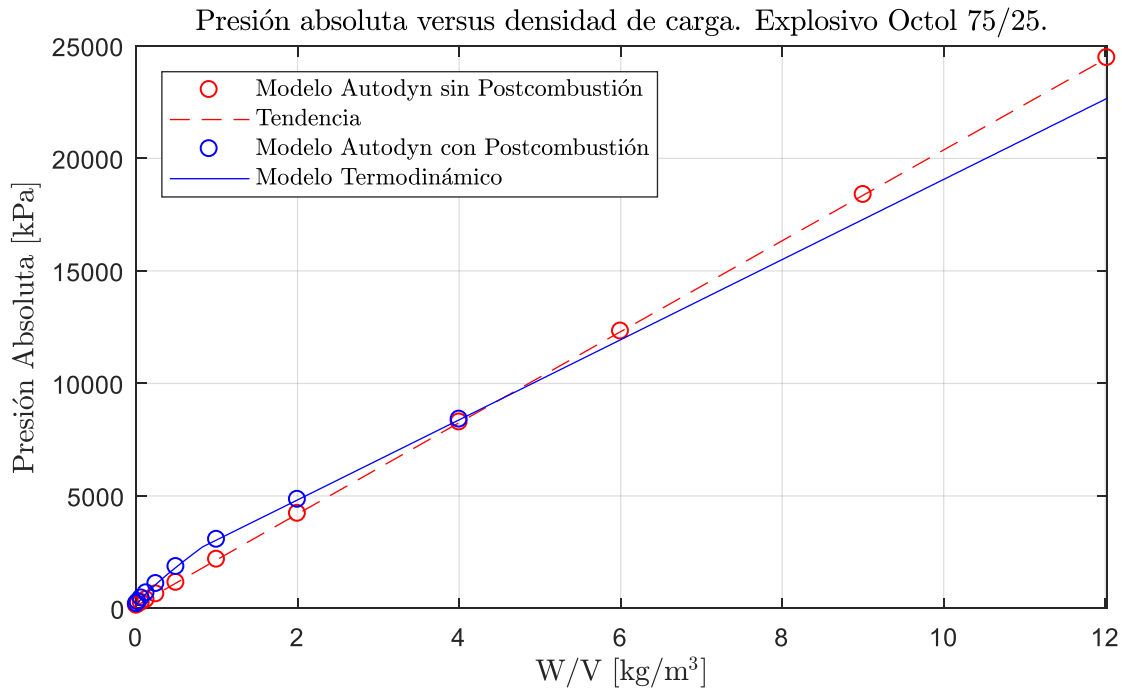


Figura 4-13: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo Octol 75/25.

En la Figura 4-13 se observa que para valores de densidad de carga mayores a  $4.525 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ , la tendencia de la presión del modelo sin postcombustión (línea punteada roja) es mayor a las presiones generadas por el modelo termodinámico del Capítulo 3 (línea azul continua). Por lo tanto, el modelo de AUTODYN sin energía de postcombustión sobreestima las presiones residuales para esas razones de alto-explosivo por volumen de cámara. Por lo tanto, no es necesario realizar un ajuste. En la Figura 4-15 no se entrega el valor de energía de postcombustión adicional por sobre el rango señalado, pues para esos casos la energía a incorporar resulta en una cantidad negativa y AUTODYN no permite añadir energía adicional con valores menores a cero. En consecuencia, solo en donde la energía de postcombustión calculada resulta ser positiva, se vuelve a modelar la explosión por una segunda vez en el programa. De los resultados obtenidos, se desprende que las presiones cuasi-estáticas allí conseguidas (círculos azules de la Figura 4-13), resultan ser concordantes con la presión objetivo del modelo termodinámico (curva azul), donde la mayor diferencia porcentual es menor a 0.1%.

En la Figura 4-14, se entregan los resultados de la energía de detonación liberada por el Octol 75/25 para diferentes densidades de carga.

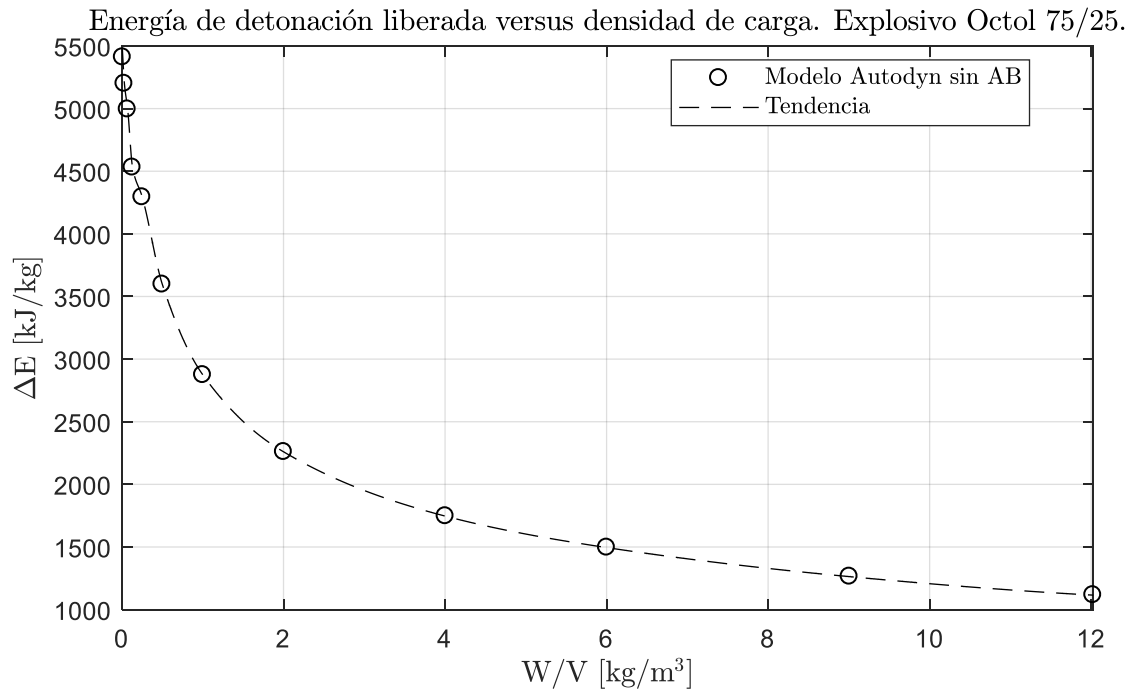


Figura 4-14: Energía interna cedida por el explosivo Octol 75/25. Modelos Autodyn sin AB.

En la Figura 4-15, se adjuntan los resultados para la energía de postcombustión adicional para modelar explosiones confinadas en AUTODYN. Como ya se ha mencionado, para valores de  $W / V$  mayores a  $4.525 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ , los valores de energía pasan a ser negativos, y, en consecuencia, no se muestran en la curva, entendiéndose que la modelación para densidades de carga mayores a este valor, serán sobreestimadas por el modelo sin la inclusión de energía de postcombustión.



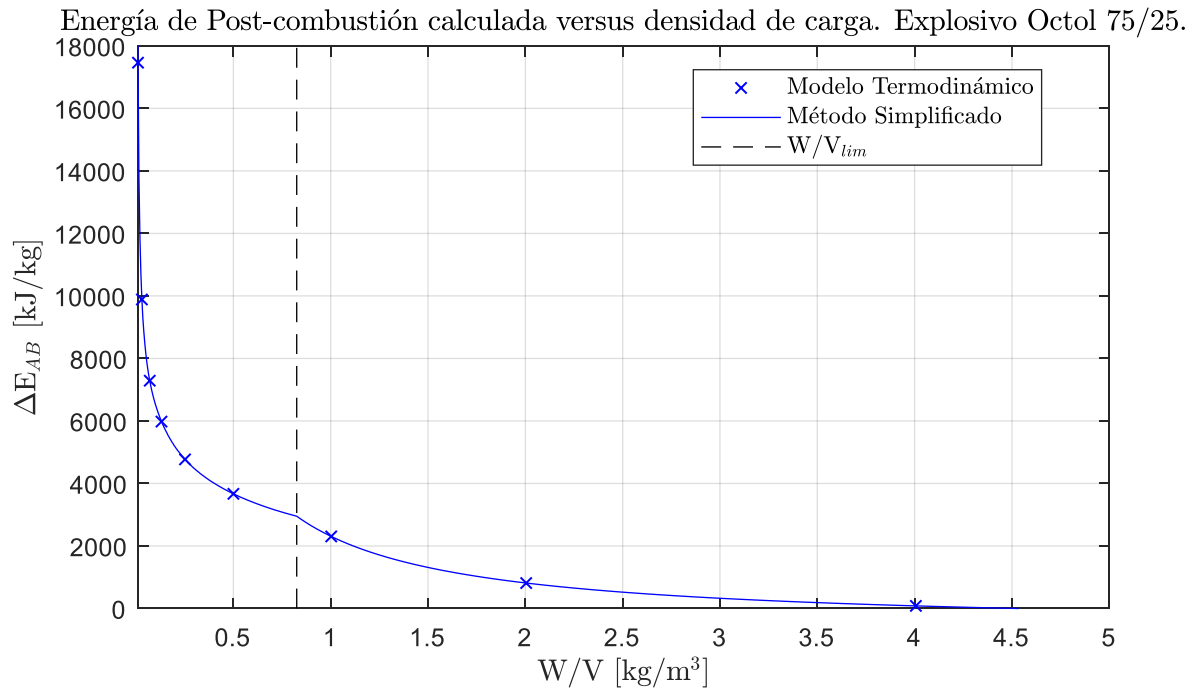


Figura 4-15: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo Octol 75/25.

#### 4.5.4 Energía de Postcombustión para el explosivo PBX-9502

Para el caso de este explosivo, 11 configuraciones de densidad de carga de explosivo son utilizadas para generar la curva de energía de postcombustión, cuyos valores se resumen en la Tabla 4-5.

En la Figura 4-16, se muestran los resultados obtenidos de las presiones cuasi-estáticas de los modelos AUTODYN con y sin postcombustión, y se compara con la presión residual del modelo termodinámico generado en el Capítulo 3. Para valores de  $W/V$  mayores a  $2.73 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ , AUTODYN sobre predice la presión cuasi-estática y por lo tanto la energía de postcombustión adicional a incorporar pasa a ser negativa. De igual forma que en el caso del explosivo Octol 75/25, solo se generan los modelos con energía interna adicional para las densidades de carga de explosivo menores a  $2.73 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ .

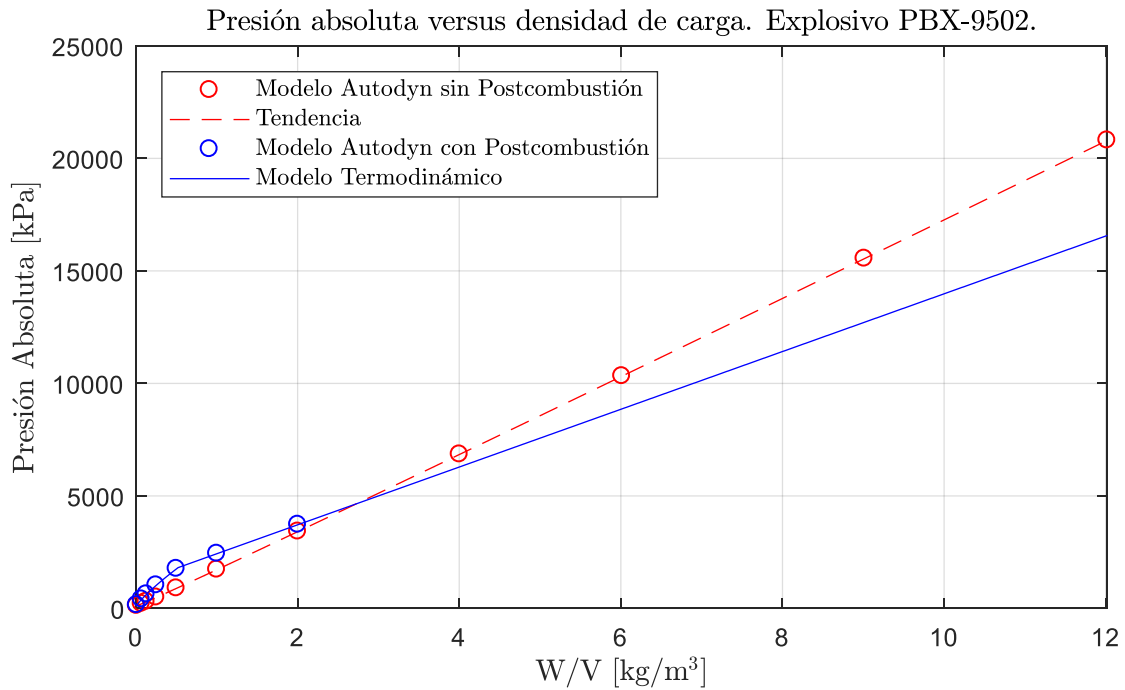


Figura 4-16: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo PBX-9502.

En la Figura 4-17 se entregan los resultados de la energía de detonación liberada por el explosivo, para diferentes densidades de carga.

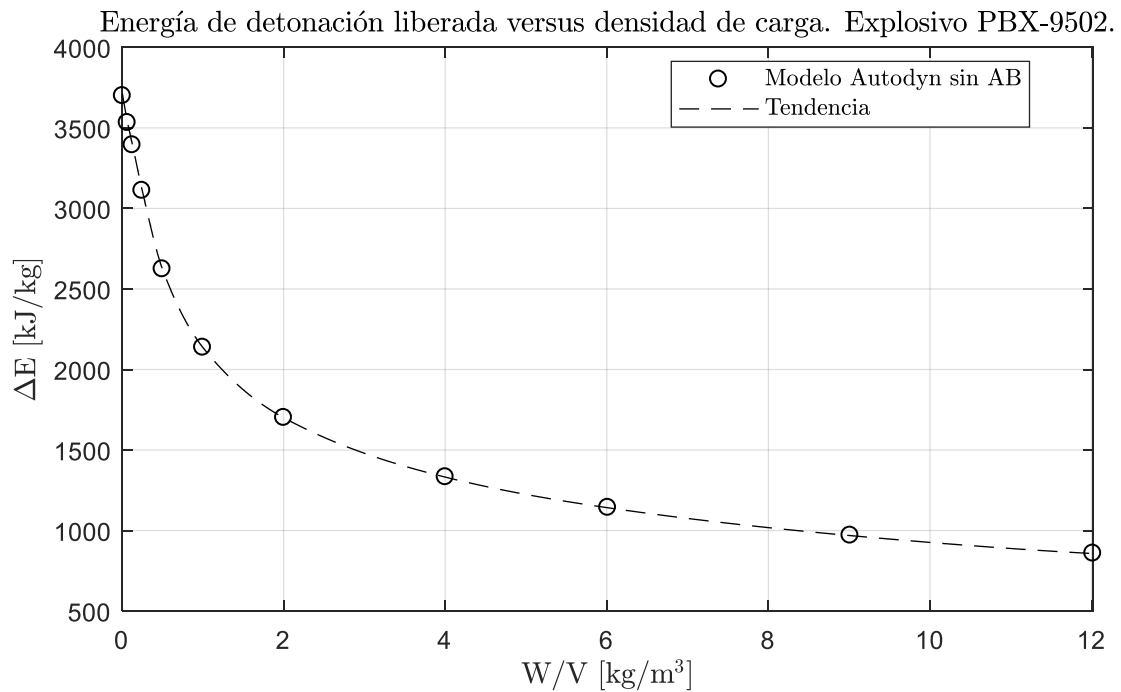


Figura 4-17: Energía interna cedida por el explosivo PBX-9502. Modelos Autodyn sin AB.

Finalmente, en la Figura 4-18, se entrega la curva de energía de postcombustión adicional para diferentes densidades de carga.

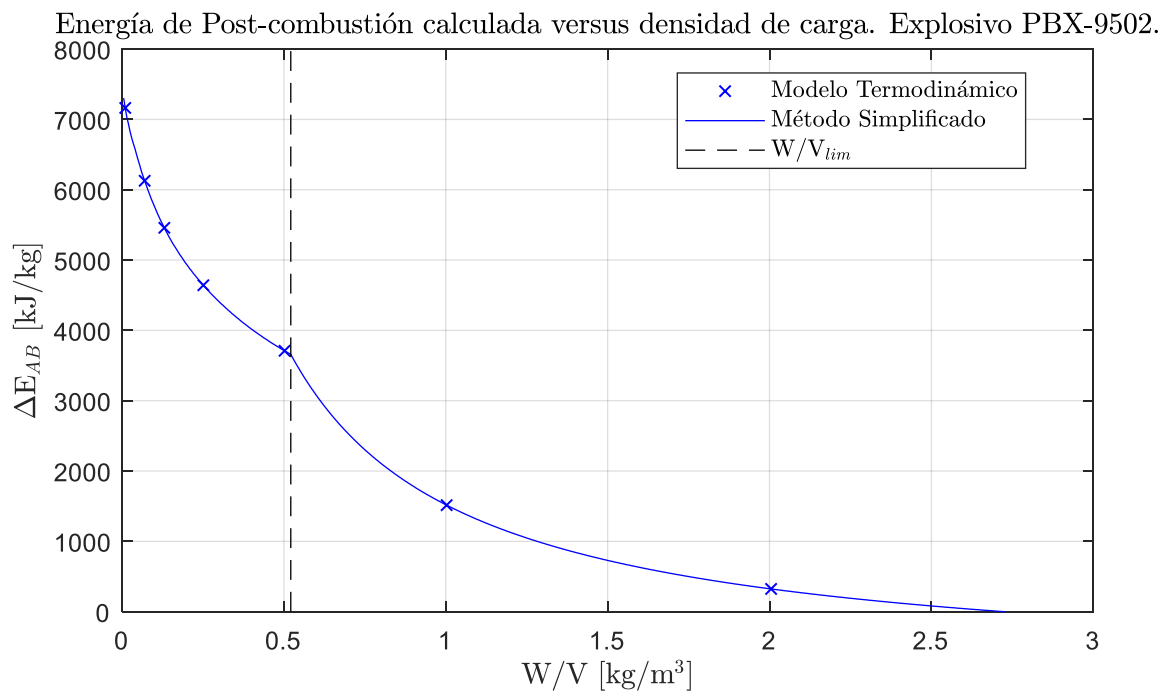


Figura 4-18: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo PBX-9502.

#### 4.5.5 Energía de Postcombustión para el explosivo Pentolite 50/50

Para el caso del explosivo Pentolite 50/50, 12 configuraciones de densidad de carga de explosivo son utilizadas para generar la curva de presión cuasi-estáticas sin postcombustión, cuyos valores pueden verse en la Tabla 4-6.

En la Figura 4-19, se adjuntan los resultados obtenidos de las presiones cuasi-estáticas de los modelos AUTODYN con y sin postcombustión, y se compara con la presión residual del modelo termodinámico generado en el Capítulo 3. Para valores de  $W/V$  mayores a 3.3 [kg/m<sup>3</sup>], AUTODYN sobre predice la presión cuasi-estática y por lo tanto la energía de postcombustión adicional a incorporar pasa a ser negativa. Del mismo modo que el caso del explosivo Octol 75/25 y el explosivo PBX-9502, solo se generan los modelos de AUTODYN con energía interna adicional para las densidades de carga de explosivo menores a 3.3 [kg/m<sup>3</sup>].

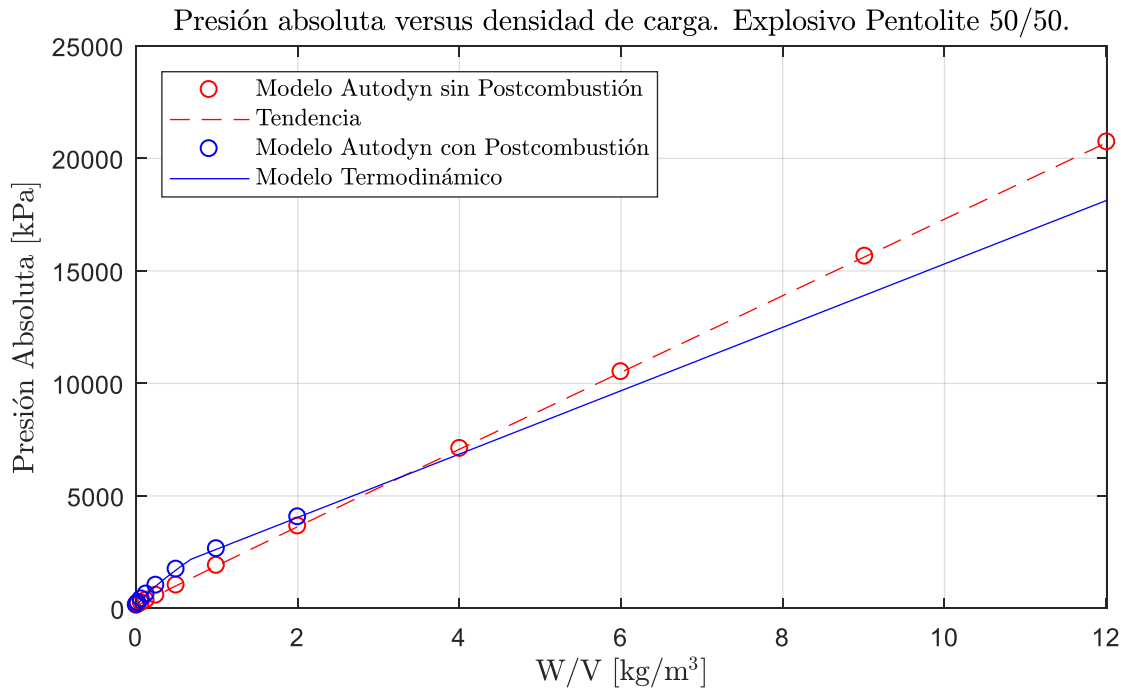


Figura 4-19: Presiones residuales cuasi-estáticas obtenidas para el explosivo Pentolite 50/50.

En la Figura 4-20 se entregan los resultados de la energía de detonación liberada por el explosivo, para diferentes densidades de carga.

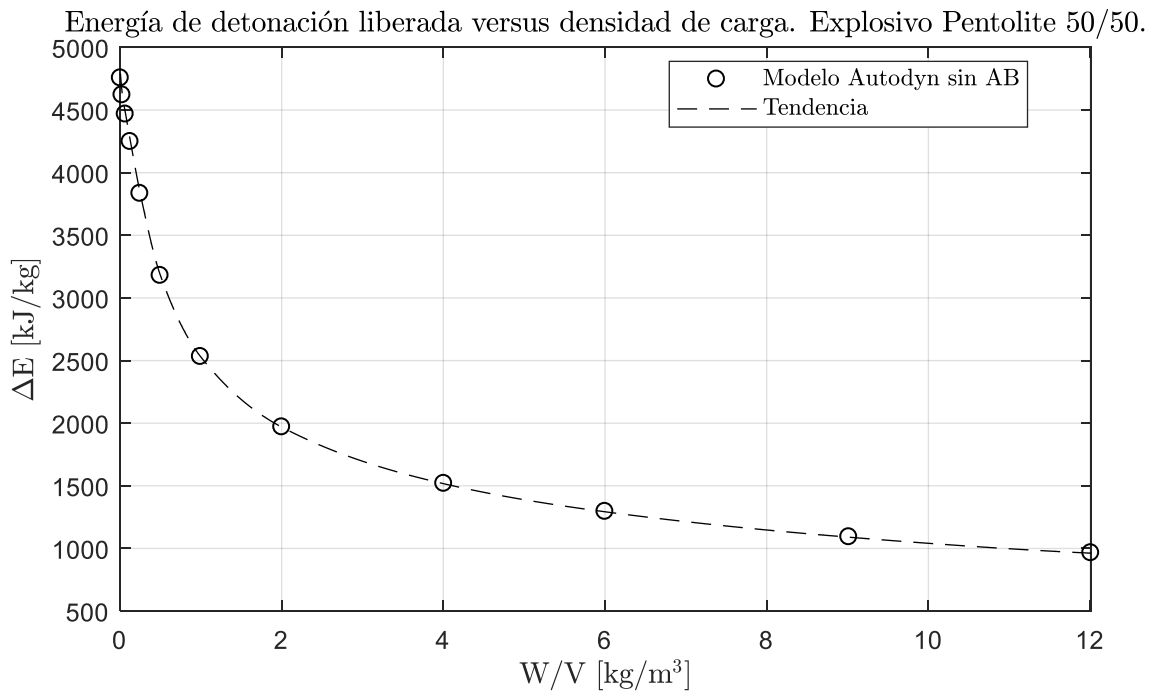


Figura 4-20: Energía interna cedida por el explosivo Pentolite 50/50. Modelos Autodyn sin AB.

En la Figura 4-21, se entrega la curva de energía de postcombustión específica que debe ser utilizada para modelar explosiones confinadas en Autodyn. Como se mencionó anteriormente, para valores de densidad de carga mayores a 3.3 [kg/m<sup>3</sup>], no es necesario incorporar energía adicional.

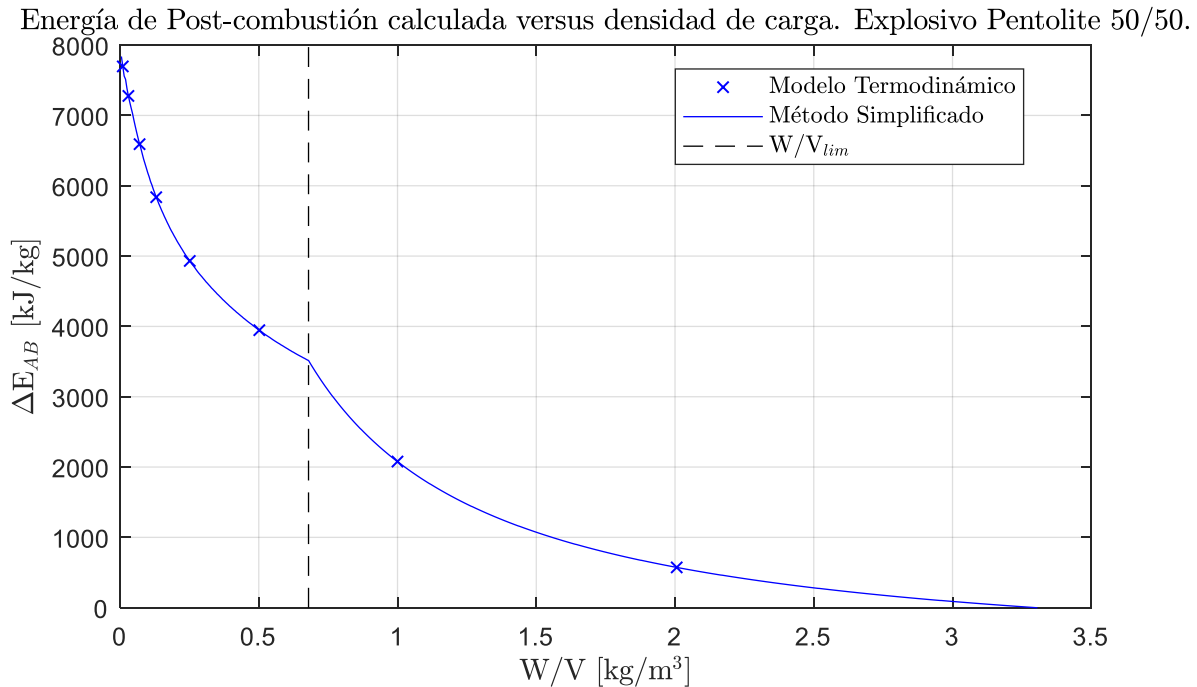


Figura 4-21: Curvas de energía de postcombustión adicional para el explosivo Pentolite 50/50.

#### 4.5.6 Resumen de los resultados

En este apartado se entrega el resumen de los resultados obtenidos para cada explosivo y cada caso utilizado para generar como elemento final, las energías de postcombustión adicional, las cuales sirven para modelar de una forma más correcta explosiones confinadas dentro de cámaras indeformables. Cabe señalar que  $\Delta E_{int}$  [kJ/kg], representa la energía interna específica liberada en promedio por el alto explosivo para el caso sin postcombustión,  $P_{QS}$  [kPa] la presión cuasi-estática a la que llegó el modelo sin postcombustión,  $P_{obj}$  [kPa] la presión residual objetivo a la que se debería llegar con energía de post-combustión,  $\Delta E_{AB}$  [kJ/kg], corresponde a la energía de postcombustión adicional necesaria para llegar a la presión residual objetivo,  $P_{obj\ AutoDyn}$  [kPa] corresponde a la presión cuasi-estática a la que llega el modelo de AUTODYN incorporando la postcombustión calculada al modelo y finalmente el error porcentual [%], corresponde a la diferencia normalizada entre la presión alcanzada por el modelo de AUTODYN con  $\Delta E_{AB}$ , con respecto a la presión objetivo a la que debiese haber llegado.

Es importante señalar que, para aquellos casos en que la Energía de postcombustión es negativa, esto se debe a que la presión residual absoluta obtenida por el modelo

termodinámico es menor a la que se obtiene en una modelación realizada en AUTODYN sin postcombustión, significando entonces que, para esos casos, el programa AUTODYN sobre predice la presión residual. Por lo tanto, para esas situaciones, no se modela por una segunda vez la explosión en el software.

Entonces, en la Tabla 4-2, se adjunta el resumen de los resultados de la modelación realizada para el explosivo TNT.

Tabla 4-2: Resumen de resultados para el caso TNT.

Caso	$m_{TNT}$ [kg]	$V_{camara}$ [m <sup>3</sup> ]	$W / V$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$P_{QS}$ [kPa]	$\Delta E_{int}$ [kJ/kg]	$P_{obj}$ [kPa]	$\Delta E_{AB}$ [kJ/kg]	$P_{obj AutoDyn}$ [kPa]	error porcentual [%]
1	1.414	14.137	0.100	246.894	-3340.877	599.838	9839.858	599.624	-0.036
2	6.854	14.137	0.485	785.815	-2470.867	1782.262	5759.526	1783.739	0.083
3	28.320	14.137	2.003	2834.310	-1520.081	3785.207	1335.966	3785.208	0.000
4	42.448	14.137	3.003	4168.786	-1327.410	5101.607	875.661	5101.416	-0.004
5	70.768	14.137	5.006	6823.731	-1092.743	7736.141	514.810	7735.959	-0.002
6	113.280	14.137	8.013	10787.176	-905.903	11691.180	319.223	11691.665	0.004

En la Tabla 4-3, se adjunta el resumen de los resultados de la modelación realizada para el explosivo Compuesto C-4.

Tabla 4-3: Resumen de resultados para el caso del Comp C-4.

Caso	$m_{C-4}$ [kg]	$V_{camara}$ [m3]	$W / V$ [kg/m3]	$P_{QS}$ [kPa]	$\Delta E_{int}$ [kJ/kg]	$P_{obj}$ [kPa]	$\Delta E_{AB}$ [kJ/kg]	$P_{obj AutoDyn}$ [kPa]	error porcentual [%]
1	0.138	14.137	0.010	122.880	-5381.974	148.843	9603.246	148.871	0.019
2	0.415	14.137	0.029	165.525	-5225.259	239.305	9140.158	239.573	0.112
3	0.963	14.137	0.068	247.675	-4950.701	403.997	8397.137	403.964	-0.008
4	1.789	14.137	0.127	369.317	-4750.794	627.035	7485.598	627.485	0.072
5	3.453	14.137	0.244	599.792	-4237.255	1031.744	6543.861	1032.016	0.026
6	6.892	14.137	0.488	1039.014	-3454.022	1774.258	5638.815	1774.265	0.000
7	13.784	14.137	0.975	1867.497	-2707.374	2728.759	3329.578	2730.781	0.074
8	27.520	14.137	1.947	3450.755	-2102.037	4334.412	1725.616	4334.966	0.013
9	55.024	14.137	3.892	6511.768	-1611.370	7549.509	1023.092	7549.263	-0.003
10	82.560	14.137	5.840	9512.320	-1374.538	10768.710	829.860	10771.397	0.025
11	123.680	14.137	8.749	13919.147	-1160.844	15576.148	734.299	15582.928	0.044
12	164.880	14.137	11.663	18283.440	-1024.419	20395.522	704.466	20402.345	0.033



En la Tabla 4-4, se adjunta el resumen de los resultados de la modelación realizada para el explosivo Octol 75/25.

Tabla 4-4: Resumen de resultados para el caso del Octol 75/25.

Caso	$m_{octol}$ [kg]	$V_{camara}$ [m <sup>3</sup> ]	$W / V$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$P_{QS}$ [kPa]	$\Delta E_{int}$ [kJ/kg]	$P_{obj}$ [kPa]	$\Delta E_{AB}$ [kJ/kg]	$P_{obj AutoDyn}$ [kPa]	error porcentual [%]
1	0.142	14.137	0.010	123.130	-5409.449	190.255	17462.588	190.290	0.018
2	0.424	14.137	0.030	164.603	-5198.523	278.728	9885.795	278.788	0.022
3	0.996	14.137	0.070	249.502	-4993.610	446.786	7287.165	446.826	0.009
4	1.849	14.137	0.131	375.154	-4529.469	675.348	5978.501	675.337	-0.002
5	3.557	14.137	0.252	626.929	-4292.274	1087.412	4768.989	1087.433	0.002
6	7.072	14.137	0.500	1139.408	-3595.490	1842.648	3667.690	1842.611	-0.002
7	14.176	14.137	1.003	2167.687	-2872.742	3052.384	2304.875	3052.392	0.000
8	28.336	14.137	2.004	4207.088	-2258.555	4830.059	812.864	4830.075	0.000
9	56.640	14.137	4.006	8267.130	-1745.917	8392.980	82.251	8392.998	0.000
10	84.880	14.137	6.004	12308.385	-1495.164	11948.328	-157.131	-	-
11	127.360	14.137	9.009	18375.910	-1263.423	17301.992	-312.542	-	-
12	170.000	14.137	12.025	24458.715	-1115.793	22675.822	-388.891	-	-

En la Tabla 4-5, se adjunta el resumen de los resultados de la modelación realizada para el explosivo PBX-9502.

Tabla 4-5: Resumen de resultados para el caso del PBX-9502.

Caso	$m_{PBX-9502}$ [kg]	$V_{camara}$ [m <sup>3</sup> ]	$W/V$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$P_{QS}$ [kPa]	$\Delta E_{int}$ [kJ/kg]	$P_{obj}$ [kPa]	$\Delta E_{AB}$ [kJ/kg]	$P_{obj AutoDyn}$ [kPa]	error porcentual [%]
1	0.142	14.137	0.010	116.382	-3697.931	149.283	7163.456	149.216	-0.045
2	0.990	14.137	0.070	206.911	-3531.056	404.347	6127.474	404.343	-0.001
3	1.849	14.137	0.131	300.027	-3392.585	629.542	5458.847	629.394	-0.024
4	3.552	14.137	0.251	488.754	-3110.049	1028.963	4641.978	1029.195	0.023
5	7.098	14.137	0.502	895.156	-2622.309	1762.435	3709.774	1762.750	0.018
6	14.176	14.137	1.003	1725.680	-2135.826	2434.988	1514.826	2434.912	-0.003
7	28.344	14.137	2.005	3419.064	-1699.700	3723.226	323.558	3723.188	-0.001
8	56.624	14.137	4.005	6847.328	-1331.367	6291.716	-294.548	-	-
9	85.040	14.137	6.015	10324.145	-1141.375	8870.819	-511.706	-	-
10	127.440	14.137	9.015	15545.644	-968.714	12718.313	-662.679	-	-
11	169.920	14.137	12.019	20801.063	-857.107	16575.117	-741.682	-	-

En la Tabla 4-6 se adjunta el resumen de los resultados de la modelación realizada para el explosivo Pentolite 50/50.

Tabla 4-6: Resumen de resultados para el caso del Pentolite 50/50.

Caso	$m_{Pentolite}$ [kg]	$V_{camara}$ [m <sup>3</sup> ]	$W/V$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$P_{QS}$ [kPa]	$\Delta E_{int}$ [kJ/kg]	$P_{obj}$ [kPa]	$\Delta E_{AB}$ [kJ/kg]	$P_{obj AutoDyn}$ [kPa]	error porcentual [%]
1	0.142	14.137	0.010	120.534	-4753.055	148.614	7697.175	148.619	0.003
2	0.427	14.137	0.030	158.701	-4617.851	238.082	7277.306	238.130	0.020
3	0.997	14.137	0.071	234.652	-4464.480	402.043	6591.556	401.969	-0.019
4	1.845	14.137	0.130	346.640	-4245.392	620.552	5837.316	620.640	0.014
5	3.554	14.137	0.251	568.768	-3831.587	1013.599	4930.945	1013.629	0.003
6	7.097	14.137	0.502	1018.180	-3176.341	1726.588	3946.307	1726.474	-0.007
7	14.136	14.137	1.000	1895.217	-2528.909	2636.298	2078.248	2636.273	-0.001
8	28.360	14.137	2.006	3643.919	-1967.115	4052.689	572.970	4052.666	-0.001
9	56.688	14.137	4.010	7092.086	-1516.106	6873.962	-153.415	-	-
10	84.880	14.137	6.004	10501.583	-1292.474	9682.529	-385.392	-	-
11	127.520	14.137	9.020	15634.771	-1089.721	13928.805	-535.179	-	-
12	169.840	14.137	12.014	20713.219	-962.155	18145.311	-605.496	-	-

## Capítulo 5. Conclusiones

Curvas de presiones residuales para explosiones en cámaras completamente confinadas fueron desarrolladas para 57 altos-explosivos, siendo la mayor parte de estos explosivos del tipo secundario. Se utilizó como base un modelo termodinámico simplificado, que considera que la cámara es indeformable (proceso isocórico), y que no hay un intercambio de calor con el exterior de la cámara (proceso adiabático). Se supuso que los productos de la detonación siguen un orden de formación predeterminado en función del oxígeno interno que posee el explosivo (reglas de Kistiankowsky-Wilson modificadas), mientras que para la postcombustión se supone que los productos de la detonación reaccionan de forma proporcional al oxígeno disponible en la cámara. Esto último resulta en una gran simplificación, pues la postcombustión es un proceso complejo, que depende de la presión, la temperatura y la turbulencia interna que se gatilla en el contacto entre los productos aún inflamables de la detonación y el oxígeno circundante.

Ante la dificultad de conseguir un programa termodinámico que pudiera modelar el equilibrio químico del estado residual de los gases almacenados, se utiliza un modelo termodinámico simplificado que resulta en una buena alternativa, el cual no es complejo de implementar utilizando la metodología numérica y datos propuestos en esta memoria.

Si bien, la poca existencia de datos experimentales no permite realizar una comparación concluyente de los resultados, se estima que la información expuesta está dentro de un análisis conservador conforme a los siguientes motivos:

- Para el explosivo TNT, la diferencia porcentual en la presión cuasi-estática de confinamiento obtenida por el modelo termodinámico es siempre mayor que la de la UFC 3-340-02 (2008), por ejemplo, para rangos de densidad de carga entre 0.025 [kg/m<sup>3</sup>] y 12 [kg/m<sup>3</sup>] se observa una sobre-estimación de la presión cuasi-estática menor a un 25%.
- El hecho de suponer que no existe deformación de la cámara significa que la energía del sistema no es disipada hacia un medio externo, lo cual en la realidad resulta un supuesto conservador teniendo en cuenta que la sobrepresión requerida para estudiar la respuesta dinámica de una estructura sujeta a una explosión parcial o totalmente confinada tiene una duración de milisegundos, por lo cual no existe suficiente tiempo para irradiar calor al medio externo. Ello trae como consecuencia que las presiones de confinamiento obtenidas por el modelo sean mayores a las reales, pues parte de la energía siempre es disipada como energía interna, cinética y visco elástica de deformación de la cámara.
- El modelo termodinámico supone que todo el oxígeno disponible al interior de la cámara es utilizado para oxidar la mayor cantidad de explosivo posible, por lo tanto, el monto de energía química liberada en la explosión corresponde a una cota superior, lo cual no se ajusta exactamente a la realidad debido a que siempre existirán bolsas de oxígeno atrapadas dentro de la cámara que no reaccionan totalmente con los productos aún inflamables de la detonación. En base a esta discusión, la energía de detonación y combustión calculada con el equilibrio termodinámico es mayor o igual a la experimental pues, por el cambio de temperatura dentro de la explosión y la no homogeneidad del explosivo se generan

concentraciones de productos diferentes a los más estables que se han supuesto por las reglas de formación química utilizadas en este estudio. En este contexto se podría estudiar en trabajos posteriores la incorporación de un factor de eficiencia que considere que la combustión no es perfecta.

El modelo termodinámico puede ser mejorado, pues, para el desarrollo de la memoria se utiliza como ecuación de estado la del gas ideal, la cual no se ajusta correctamente para gases sujetos a altas presiones (dado que las partículas de gases están próximas, escapándose del supuesto que las partículas están lejanas, según el principio de gas ideal). De hecho, sobre 200 [atm], la ecuación de gas ideal predice valores lejanos a lo que se obtienen experimentalmente (Cooper, 1996). Otro punto que puede ser mejorable es la incorporación de constantes de equilibrio químico al momento de calcular los compuestos obtenidos en la detonación y postcombustión. Sin embargo, estas constantes suelen depender de la temperatura y presión, convirtiendo el problema original en uno altamente no lineal, escapándose de los alcances de esta memoria.

La ecuación de estado de Jones-Wilkins-Lee, corresponde a una ecuación que relaciona los parámetros de energía interna, presión y volumen de los gases asociados al producto de la detonación. Esto significa que, al momento de modelar una explosión confinada, la energía de postcombustión debe ser considerada incorporándola de alguna forma. Diversas ecuaciones de estado se han utilizado para modelar una explosión con postcombustión en la que se transita de una ecuación de estado asociada a altos-explosivos y gases circundantes (aire en este caso) a una ecuación de estado que considera el comportamiento conjunto de los gases y su concentración (Donahue, et al., 2013), siendo este tipo de modelaciones sumamente complejas y demandantes de un alto tiempo computacional. Por otro lado, softwares de uso comercial no contemplan este nivel sofisticado de modelaciones y por tanto consideran una ecuación de estado independiente para los productos de los altos-explosivos (JWL) y para el aire (gas ideal). En consecuencia, la metodología empleada en este estudio permite adecuar AUTODYN (con sus herramientas disponibles) para modelar en forma correcta la componente de presión de gas.

Los métodos utilizados por AUTODYN para la inclusión de la energía de postcombustión corresponden a incorporar la energía específica interna en la ecuación de estado del alto-explosivo considerando una tasa de liberación constante (aumento de la energía interna en un intervalo de tiempo definido) o exponencial (extensión de Miller), observándose que en ambos modelos se libera un valor residual único de energía de postcombustión. Se observa que la tasa de liberación de energía de postcombustión no influye en el estado cuasi-estático obtenido en pasos avanzados de la simulación. En consecuencia, las energías de postcombustión obtenidas son aplicables tanto para el método de liberación lineal (empleado en este estudio) como en el caso de liberación exponencial (extensión de Miller). El software AUTODYN, permite de forma simple incorporar estos procedimientos, los cuales no solo sirven para modelar los efectos de la postcombustión del mismo explosivo, sino que también son útiles para modelar explosivos no ideales, que contengan aluminio o perclorato de amonio, como los explosivos termobáricos, que suelen poseer una alta liberación de energía de postcombustión. De esta forma, se propone llevar a cabo estudios posteriores que permitan determinar la energía de postcombustión en este tipo de explosivos en los cuales es fundamental modelar adecuadamente la componente de presión de gas.

En base a la modelación realizada en AUTODYN, se observa que a pesar de usar simulaciones con un tamaño de elementos finitos eulerianos de casi el doble que los usados por Hernández, et al. (2016), (20 [mm] versus 13.3 [mm]), los resultados no varían significativamente en relación a la presión cuasi-estática determinada para TNT. Se observa que un mallado menos fino subestima significativamente las presiones asociadas a las ondas de choque, pero no afecta mayormente a la presión residual. Usualmente el tamaño del mallado afecta los máximos del tren de ondas de choque. Sin embargo, el objetivo de la memoria es obtener una adecuada presión cuasi-estática, por lo tanto, se privilegia una minimización de los tiempos de cálculo, por sobre la modelación detallada de la presión que afecta a la estructura, pues no cambia los resultados finales de este trabajo.

Suponiendo que las presiones residuales del modelo termodinámico resultan ser confiables, se calcularon las curvas de energía de postcombustión que deben ser empleadas en AUTODYN para cinco explosivos: TNT, Compuesto C-4, Octol 75/25, PBX-9502 y Pentolite 50/50. En base a modelaciones realizadas sin incorporar el efecto de la energía adicional, se determinó una curva de presión cuasi-estática para cada explosivo. Si bien, los resultados obtenidos por los modelos realizados en AUTODYN para la presión cuasi-estática sin postcombustión tienden a asimilarse a una función lineal, se opta por generar un ajuste polinómico local para los explosivos. La motivación de realizar esto, es que para algunos compuestos la tendencia lineal no se ajusta bien en puntos donde la densidad de carga explosiva es pequeña, lo que trae como consecuencia problemas numéricos al momento de generar la curva de energía de postcombustión para esos valores.

Los principales supuestos para utilizar la metodología planteada por Hernández, et al., (2016), consiste en suponer que el sistema no intercambia calor con el medio exterior; es decir, es un sistema adiabático, y que la cámara es indeformable. Esto implica modelar una cámara totalmente rígida, significando que los gases solo pueden intercambiar trabajo externo entre ellos, y en consecuencia la energía interna del sistema permanece constante. Cabe mencionar que este supuesto se condice con los supuestos del modelo termodinámico simplificado (proceso isocórico). Como extensión a este estudio, el valor de energía adicional de postcombustión podría ser aplicado en cámaras flexibles, donde el propio programa (AUTODYN) calcula la energía de deformación absorbida por la cámara, reduciendo de esta forma la presión cuasi-estática de los gases almacenados.

En una línea similar, una correcta modelación en AUTODYN permite la inclusión de ventilaciones (o perforaciones), con lo cual se puede modelar la atenuación de la componente de presión de gas debido a la despresurización ocasionada a través de la abertura debido a la ventilación (Edri, et al., 2013). Se infiere que sería correcto emplear la misma energía de postcombustión que la utilizada para el caso completamente confinado, en la medida que el proceso de ventilación este correctamente modelado, siendo este un aspecto que es necesario revisar en estudios posteriores.

Luego de la generación de las curvas de energía de postcombustión, se simuló por una segunda vez cada modelo en AUTODYN incorporando la energía adicional de postcombustión. De los resultados obtenidos, se observa que las presiones cuasi-estáticas se ajustan al valor objetivo. Es decir, los valores de las presiones residuales coinciden con las obtenidas del modelo termodinámico simplificado. La mayor diferencia es menor a un 0.2% del valor buscado, lo cual valida la metodología y los supuestos empleados.

La metodología utilizada, es aplicable a cualquier forma de cámara, pues la postcombustión es un proceso que afecta principalmente a la presión residual, y no al tren de ondas de choque. Por lo tanto, una adecuada presión de gas se hace importante durante el proceso final de una explosión, es decir, cuando la energía cinética es despreciable. El procedimiento descrito puede ser extensible a cualquier ecuación de estado de un alto-explosivo, teniendo en cuenta que en el desarrollo de la memoria se utilizó únicamente altos-explosivos modelados con la JWL (que es la más utilizada en la modelación de altos-explosivos).

En la práctica actual, si bien considerar una carga de TNT equivalente basada en las energías de detonación y postcombustión (UFC 3-340-02, 2008) permite estimar las propiedades de la presión de gas, este procedimiento no es muy adecuado por las siguientes razones:

- No todos los altos-explosivos tienen una estequiometría similar al TNT, y por tanto, no todos presentan similares balances de oxígeno, ni tampoco generan concentraciones de productos gaseosos parecidos. Ello trae como consecuencia que las temperaturas y presiones de gas generadas no sean equivalentes en gran parte de los casos.
- Al existir altos-explosivos que tienen un balance de oxígeno muy distintos al del TNT, los valores de la densidad de carga límite ( $W / V_{lim}$ ), también variarán en gran medida. Por lo tanto, la utilización de un factor de conversión del TNT ( $\phi$ ), que depende principalmente de la densidad de carga del TNT y de que tan posible sea la reacción de postcombustión, no resulta ser suficiente para capturar la variación desde una explosión rica en oxígeno a una oxígeno-deficiente, pues este factor no incorpora parámetros del alto-explosivo en cuestión.

En base a lo anterior y a los resultados obtenidos en este estudio, se concluye que el método termodinámico simplificado sugerido, es más adecuado para la obtención de la componente de presión de gas que utilizar un método de carga de TNT equivalente.

# Glosario

$A$ : Parámetro lineal de la ecuación de estado JWL, y que depende del alto-explosivo.

AB: Postcombustión.

$B$ : Parámetro lineal de la ecuación de estado JWL, y que depende del alto-explosivo.

BO: Balance de oxígeno.

$C_p$ : Calor específico a presión constante.

$C_{pi}$ : Calor específico a presión constante del compuesto  $i$ .

$C_v$ : Calor específico a volumen constante.

$C_{vi}$ : Calor específico a volumen constante del compuesto  $i$ .

$E_{air}$ : Energía interna del aire.

$E_{air-AB}$ : Energía interna del aire considerando la postcombustión.

$E_{air-QS}$ : Energía específica interna del aire en estado cuasi-estático.

$E_{HE}$ : Energía interna del gas explosivo.

$E_{HE-AB}$ : Energía interna del alto-explosivo considerando la postcombustión.

$E_{HE-QS}$ : Energía específica interna del alto-explosivo en estado cuasi-estático.

$E_{0-air}$ : Energía específica interna inicial del aire a condiciones stp (206.8 [kJ/kg]).

$E_{0-HE}$ : Energía específica interna inicial de un alto explosivo.

HE: Alto-explosivo.

JWL: Jones-Wilkins-Lee. Referido a la ecuación de estado de un alto-explosivo.

$MW$ : Masa molecular.

$MW_{HE}$ : Masa molecular de un alto-explosivo cualquiera.

$MW_0$ : Masa atómica del oxígeno, igual a 16 [g/mol].

$P$ : Presión de gas.

$P_{air}$ : Presión del gas aire.

$P_{air-AD}$ : Presión del aire media, en un paso avanzado de tiempo.

$P_{HE}$ : Presión de gas del alto-explosivo.

$P_{obj}$ : Presión residual objetivo que debería alcanzar una explosión confinada.



$P_{QS}$  : Presión del sistema en estado cuasi-estático.  
 $Q$  : Energía en forma de calor.  
 QS: cuasi-estático.  
 $R$  : Constante de los gases ideales, igual a  $8.314 \times 10^{-3}$  [kJ/mol K].  
 $R_1$  : Coeficiente no lineal de la ecuación de estado JWL que depende del alto-explosivo.  
 $R_2$  : Coeficiente no lineal de la ecuación de estado JWL que depende del alto-explosivo.  
 $T$  : Temperatura del sistema.  
 $T_1$  : Temperatura inicial del sistema a 298 K.  
 $T_2$  : Temperatura del final del sistema en la etapa cuasi-estática.  
 $U_{total}$  : Energía total interna de los gases.  
 $V$  : Volumen de la cámara.  
 $V_{air}$  : Volumen de aire dentro de la cámara.  
 $V_{air}^{FC}$  : Volumen de aire necesario para que reaccione totalmente un alto-explosivo.  
 $V_{air-AB}$  : Volumen cuasi-estático del aire con la energía AB incorporada.  
 $V_{air-AD}$  : Volumen ocupado por el aire en un paso avanzado de tiempo.  
 $V_{air-QS}$  : Volumen ocupado por el aire en el estado cuasi-estático.  
 $V_{HE}$  : Volumen ocupado por un alto-explosivo.  
 $V_{HE-AB}$  : Volumen cuasi-estático de un alto-explosivo con la energía AB incorporada.  
 $V_{HE-QS}$  : Volumen de un alto- explosivo en estado cuasi-estático.  
 $V_{lim}$  : Volumen de cámara necesario para que reaccione totalmente un alto-explosivo.  
 $V_{0-HE}$  : Volumen inicial ocupado por el alto-explosivo.  
 $W$  : Masa de alto-explosivo que combustiona.  
 $W / V$  : Densidad de carga de explosivo.  
 $W / V_{Eg}$  : Densidad de carga equivalente en TNT para la presión de gas cuasi-estático.  
 $W / V_{HE}$  : Densidad de carga del alto-explosivo.  
 $W / V_{lim}$  : Densidad de carga límite para obtener una combustión completa.

$a$  : Número de moles de carbono de un compuesto.

$a_s$  : Número de moles de oxígeno extra para que reaccione completamente un mol de alto-explosivo.

$b$  : Número de moles de hidrógeno de un compuesto.

$b'$  : Número de moles de hidrógeno de un compuesto, que potencialmente puede reaccionar con oxígeno.

$c$  : Número de moles de oxígeno de un compuesto.

$d$  : Número de moles de nitrógeno de un compuesto.

$e$  : Número de moles de flúor de un compuesto.

$f$  : Número de moles de cloro de un compuesto.

$m_{air}$  : Masa de aire.

$m_{air}^{FC}$  : Masa de aire necesaria para lograr una combustión completa de un alto-explosivo.

$m_{HE}$  : Masa del alto-explosivo.

$n$  : Número de moles del gas.

$n_i$  : Número de moles del compuesto  $i$ .

$n_{total}$  : Suma total de moles de los gases dentro de la cámara.

stp : Condición de presión y temperatura estándar, a 1 [atm] y 298 [K] respectivamente.

$\Gamma$  : Volumen de cámara necesario para que un 1 [kg] de alto-explosivo reaccione completamente.

$\Delta E_{AB}$  : Energía adicional de postcombustión específica que debe ser incorporada en un modelo Autodyn con el objetivo de conseguir una presión residual deseada.

$\Delta H_{AB}$  : Energía de postcombustión parcial.

$\Delta H_{AB}^{FC}$  : Energía de postcombustión completa.

$\Delta H_C$  : Energía de combustión liberada en la explosión.

$\Delta H_C^{FC}$  : Energía de combustión, cuando el explosivo reacciona completamente.

$\Delta H_{C-HE}$  : Energía de combustión completa del alto-explosivo.

$\Delta H_{C-TNT}$  : Energía de combustión completa del TNT.

$\Delta H_{det}$  : Energía o calor de detonación.

$\Delta H_{det-HE}$  : Energía de detonación del alto-explosivo.

$\Delta H_{det-TNT}$  : Energía de detonación del TNT

$\Delta H_r^{C \rightarrow CO_2}$  : Energía química liberada por la combustión de 1 mol de carbono a dióxido de carbono.

$\Delta H_r^{CO \rightarrow CO_2}$  : Energía química liberada por la combustión de 1 mol de monóxido de carbono a dióxido de carbono.

$\Delta H_r^{H_2 \rightarrow H_2O}$  : Energía química liberada por la combustión de 1 mol de hidrógeno a vapor de agua.

$\Delta H_{r_i}$  : Energía liberada por la postcombustión del compuesto  $i$ .

$\Delta U$  : Variación de energía interna de los gases.

$\Delta U_{air}$  : Variación de energía interna del aire.

$\Delta U_{HE}$  : Variación de energía interna de un alto explosivo.

$\Delta W$  : Variación del trabajo externo de los gases.

$\Delta W_{air}$  : Variación del trabajo externo del aire.

$\Delta W_{HE}$  : Variación del trabajo externo de un alto-explosivo.

$\Omega$  : Balance de oxígeno.

$\gamma$  : Razón de capacidades caloríficas.

$\gamma_{air}$  : Razón de capacidades caloríficas del aire, cuyo valor es 1.4.

$\gamma_i$  : Razón de capacidades caloríficas del compuesto  $i$ .

$\mu$  : Fracción de masa explosiva que reacciona completamente durante la combustión.

$\nu$  : Razón entre la densidad inicial del explosivo y la densidad ocupada posterior a la detonación

$\rho_{air}$  : Densidad del aire.

$\rho_{air-AB}$  : Densidad del aire en el estado cuasi-estático con postcombustión.

$\rho_{air-QS}$  : Densidad del aire en el estado cuasi-estático.

$\rho_{HE}$  : Densidad de un alto-explosivo.

$\rho_{HE-AB}$  : Densidad del alto explosivo en el estado cuasi-estático con postcombustión.

$\rho_{HE-QS}$  : Densidad de un alto-explosivo en el estado cuasi-estático.

$\rho_{0-air}$  : Densidad inicial del aire a condiciones stp (equivalente a 1.225 [kg/m<sup>3</sup>]).

$\phi$  : Factor de conversión del TNT.

$\omega$  : Coeficiente no lineal de la ecuación de estado JWL que depende del alto-explosivo.

# Bibliografía

- Abrams, I., 2001. *The Nobel Peace Prize and the laureates: an illustrated biographical history, 1901-2001*. Nantucket, MA: Science History Publications.
- Akhavan, J., 2011. *The chemistry of explosives*. Cambridge: Royal Society of Chemistry.
- ANSYS Inc., 2016. *ANSYS Autodyn User's Manual - Release 17.2*, Canonsburg: SAS IP, Inc..
- Baker, W. E., 1987. Blast Pressure Effects: An Overview. In: *Design Considerations for Toxic Chemical and Explosives Facilities*. Washington D.C.: ACS Publications, pp. 2-57.
- Butland, A. & Maddison, R., 1973. The specific heat of graphite: an evaluation of measurements. *Journal of Nuclear Material*, 9(1), pp. 45-56.
- Chase, M. W., 1998. *NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth Edition (Journal of Physical and Chemical Reference Data Monograph No. 9)*. s.l.:American Institute of Physics.
- Cooper, P. W., 1996. *Explosives engineering*. s.l.:Wiley-VCH.
- Department of Defense, U.S., 2008. *United Facilities Criteria (UFC) 3-340-02, Structures to Resist the Effects of Accidental Explosions*, Washington, D.C.: s.n.
- Dobratz, B. & Crawford, P., 1985. LLNL Explosives Handbook. *UCRL-52997, Lawrence Livermore National Laboratory, CA*.
- Dobratz, B. M., 1972. *Properties of chemical explosives and explosive simulants*, Livermore (CA): s.n.
- Donahue, L., Zhang, F. & Ripley, R. C., 2013. Numerical models for afterburning of TNT detonation products in air. *Shock Waves*, 23(6), pp. 559-573.
- Dusenberry, D. O., 2010. *Handbook for blast resistant design of buildings*. New Jersey: John Wiley & Sons.
- Edri, I., Feldgun, V., Karinski, Y. & Yankelevsky, D., 2012. On Blast Pressure Analysis Due to a Partially Confined Explosion: III. Afterburning Effect. *International Journal of Protective Structures*, 3(3), pp. 311-331.
- Edri, I., Feldgun, V., Karinski, Y. & Yankelevsky, D., 2013. Afterburning Aspects in an Internal TNT Explosion. *International Journal of Protective Structures*, 4(1), pp. 97-116.
- Harris, T., 2002. *How C-4 Works*. [Online] Available at: <https://science.howstuffworks.com/c-4.htm> [Accessed 9 Enero 2018].
- Hernández, F., Hao, H. & Abdel-jawad, M., 2016. Additional afterburning energy value to simulate fully confined trinitrotoluene explosions. *International Journal of Protective Structures*, 7(2), pp. 232-264.
- Koccaz, Z., Sutcu, F. & Torunbalci, N., 2008. *Architectural and structural design for blast resistant buildings*. Beijing, China, s.n.

Lee, E., Finger, M. & Collins, W., 1973. *JWL equation of state coefficients for high explosives*, Livermore (CA): s.n.

Maienschein, J. L., 2002. *Estimating equivalency of explosives through a thermochemical approach*. San Diego, California, Lawrence Livermore National Laboratory.

Meyer, R., Köhler, J. & Homburg, A., 2007. *Explosives*. Weinheim: Wiley-VCH.

Meyers, S. & Shanley, E. S., 1990. Industrial explosives-a brief history of their development and use. *Journal of hazardous materials*, 23(2), pp. 183-201.

Monteil-Rivera, F. et al., 2009. Dissolution of a new explosive formulation containing TNT and HMX: Comparison with octol. *Journal of hazardous materials*, 174(1), pp. 281-288.

Schwer, L. E., 2016. *Jones-Wilkins-Lee (JWL) Equation of State with Afterburning*. Detroit, s.n.

Smith, P. D. & Hetherington, J. G., 1994. *Blast and ballistic loading of structures*. s.l.:Digital Press.

Stephen, O. N., 2009. A new priority sequence rule for the theoretical determination of products of explosion reactions. *International Journal of Physical Sciences*, 4(8), pp. 434-436.

Swisdak Jr., M. M., 1975. *Explosion Effects and Properties. Part I. Explosion Effects in Air*, s.l.: s.n.

United States Coast Guard, 1999. *Chemical hazards response information system*. [Online]  
Available at: <https://cameochemicals.noaa.gov>

Yan, Q.-L., Zeman, S. & Elbeih, A., 2012. Recent advances in thermal analysis and stability evaluation of insensitive plastic bonded explosives (PBXs). *Thermochimica acta*, Volume 537, pp. 1-12.

Zou, D., 2017. *Theory and Technology of Rock Excavation for Civil Engineering*. Singapur: Springer.

# Capítulo 6. Anexos

# Anexo A. Modelo termodinámico

## A.1. Calores específicos

En el presente apartado se adjuntan los datos de calores específicos de los distintos compuestos químicos usados en la memoria, que han sido extraídos de diversos autores.

Tabla 6-1: Capacidades caloríficas de los compuestos  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$  y  $N_2$ . Fuente: Cooper, (1996).

T [K]	$C_p$ [cal/mol K]					
	$H_2$	$N_2$	$CO$	$O_2$	$H_2O$	$CO_2$
300	6.896	6.961	6.965	7.019	8.026	8.894
400	6.974	6.991	7.013	7.194	8.185	9.871
500	6.993	7.07	7.12	7.429	8.415	10.662
600	7.008	7.197	7.276	7.67	8.677	11.311
700	7.035	7.351	7.451	7.885	8.959	11.849
900	7.139	7.671	7.787	8.212	9.559	12.678
1000	7.217	7.816	7.932	8.335	9.861	12.995
1100	7.308	7.947	8.058	8.44	10.145	13.26
1200	7.404	8.063	8.168	8.53	10.413	13.49
1300	7.505	8.165	8.265	8.608	10.668	13.68
1400	7.61	8.253	8.349	8.676	10.909	13.85
1500	7.713	8.33	8.419	8.739	11.134	13.99
1600	7.814	8.399	8.481	8.801	11.34	14.1
1700	7.911	8.459	8.536	8.859	11.53	14.2
1800	8.004	8.512	8.585	8.917	11.71	14.3
1900	8.092	8.56	8.627	8.974	11.87	14.4
2000	8.175	8.602	8.665	9.03	12.01	14.5
2100	8.254	8.64	8.699	9.085	12.14	14.6
2200	8.328	8.674	8.73	9.14	12.26	14.6
2300	8.398	8.7058	8.758	9.195	12.37	14.7
2400	8.464	8.733	8.784	9.249	12.47	14.8
2500	8.526	8.759	8.806	9.302	12.56	14.8
2750	8.667	8.815	8.856	9.431	12.8	14.9
3000	8.791	8.861	8.898	9.552	12.9	15
3250	8.899	8.9	8.933	9.663	13.1	15.1
3500	8.993	8.934	8.963	9.763	13.2	15.2
3750	9.076	8.963	8.99	9.853	13.2	15.3
4000	9.151	8.989	9.015	9.933	13.3	15.3
4250	9.22	9.013	9.038	10.003	13.4	15.4
4500	9.282	9.035	9.059	10.063	13.4	15.5
4750	9.338	9.056	9.078	10.115	13.5	15.5
5000	9.389	9.076	9.096	10.157	13.5	15.6



Tabla 6-2: Capacidades caloríficas de los compuestos *HF*, y *HCl*. Fuente: Chase, (1998).

T [K]	$C_p$ [J/mol K]		T [K]	$C_p$ [J/mol K]	
	<i>HCl</i>	<i>HF</i>		<i>HCl</i>	<i>HF</i>
298	29.136	29.138	3100	37.354	36.405
300	29.137	29.138	3200	37.458	36.55
350	29.149	29.143	3300	37.557	36.687
400	29.175	29.15	3400	37.651	36.818
450	29.223	29.159	3500	37.74	36.941
500	29.304	29.173	3600	37.826	37.059
600	29.575	29.23	3700	37.908	37.171
700	29.985	29.351	3800	37.987	37.279
800	30.494	29.55	3900	38.063	37.381
900	31.055	29.827	4000	38.137	37.48
1000	31.628	30.169	4100	38.208	37.574
1100	32.186	30.556	4200	38.276	37.665
1200	32.713	30.971	4300	38.343	37.753
1300	33.203	31.397	4400	38.408	37.837
1400	33.651	31.822	4500	38.471	37.919
1500	34.06	32.237	4600	38.532	37.998
1600	34.431	32.636	4700	38.592	38.074
1700	34.767	33.017	4800	38.651	38.149
1800	35.071	33.376	4900	38.708	38.221
1900	35.348	33.713	5000	38.764	38.291
2000	35.6	34.029	5100	38.819	38.359
2100	35.83	34.325	5200	38.873	38.426
2200	36.04	34.601	5300	38.927	38.491
2300	36.233	34.858	5400	38.979	38.555
2400	36.411	35.099	5500	39.03	38.617
2500	36.575	35.323	5600	39.081	38.678
2600	36.728	35.533	5700	39.131	38.737
2700	36.87	35.73	5800	39.181	38.796
2800	37.002	35.914	5900	39.23	38.853
2900	37.127	36.088	6000	39.278	38.91
3000	37.243	36.251	-	-	-

## A.2. Resultados del modelo termodinámico

En este apartado se adjuntan los resultados de presión cuasi-estática de 52 compuestos explosivos, siguiendo lo acordado en el Capítulo 3.

### A.2.1. Amatol 80/20

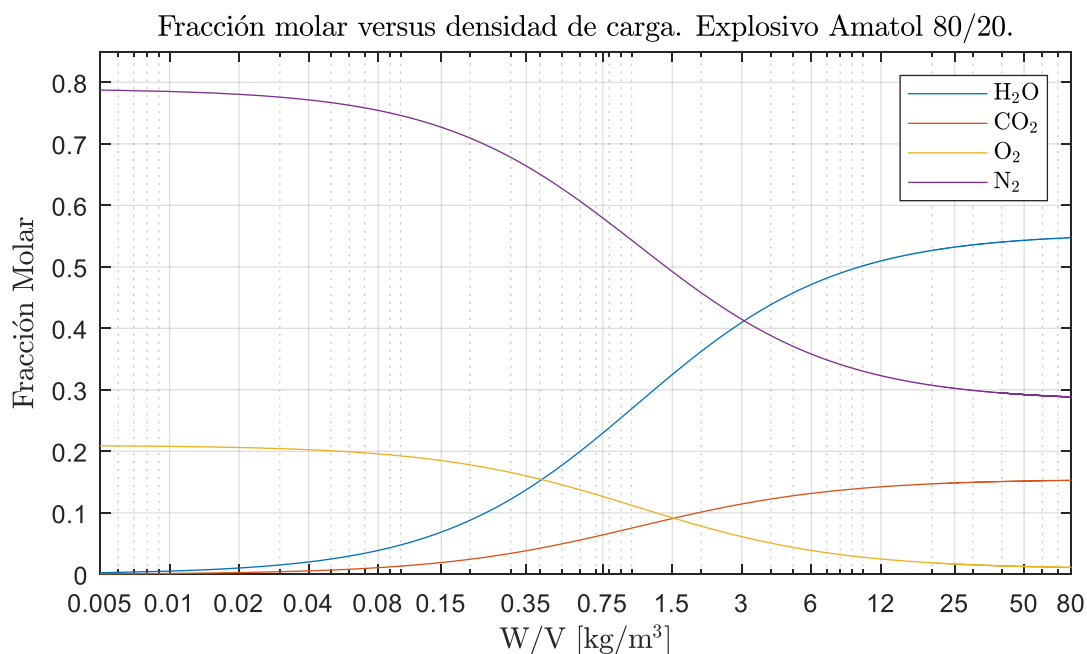


Figura 6-1: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Amatol 80/20.

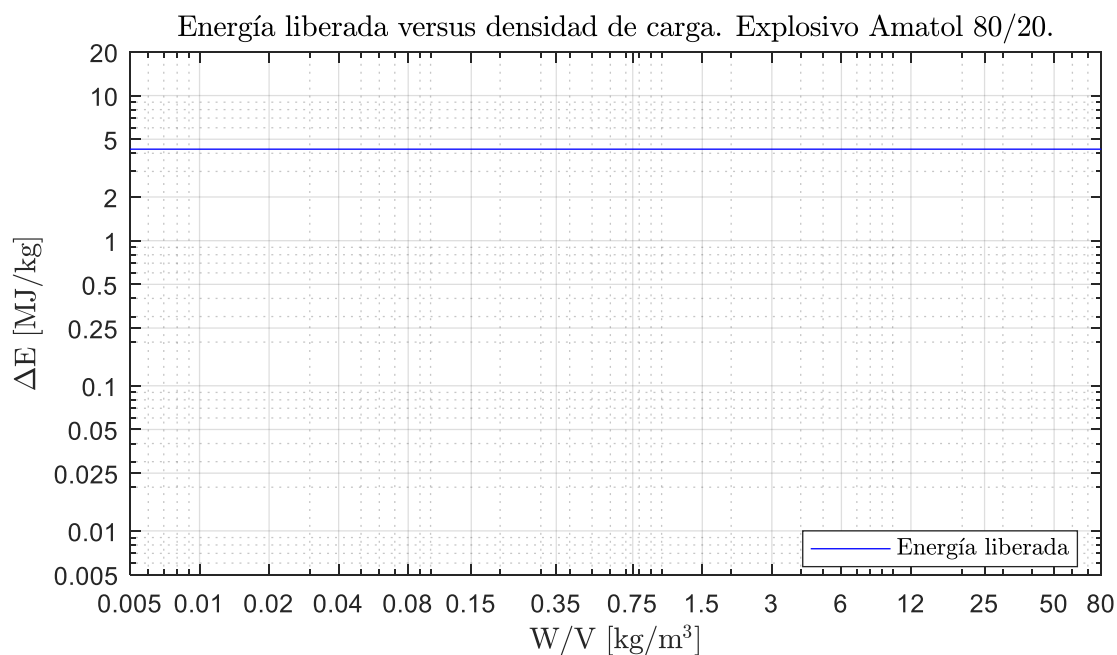


Figura 6-2: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Amatol 80/20.

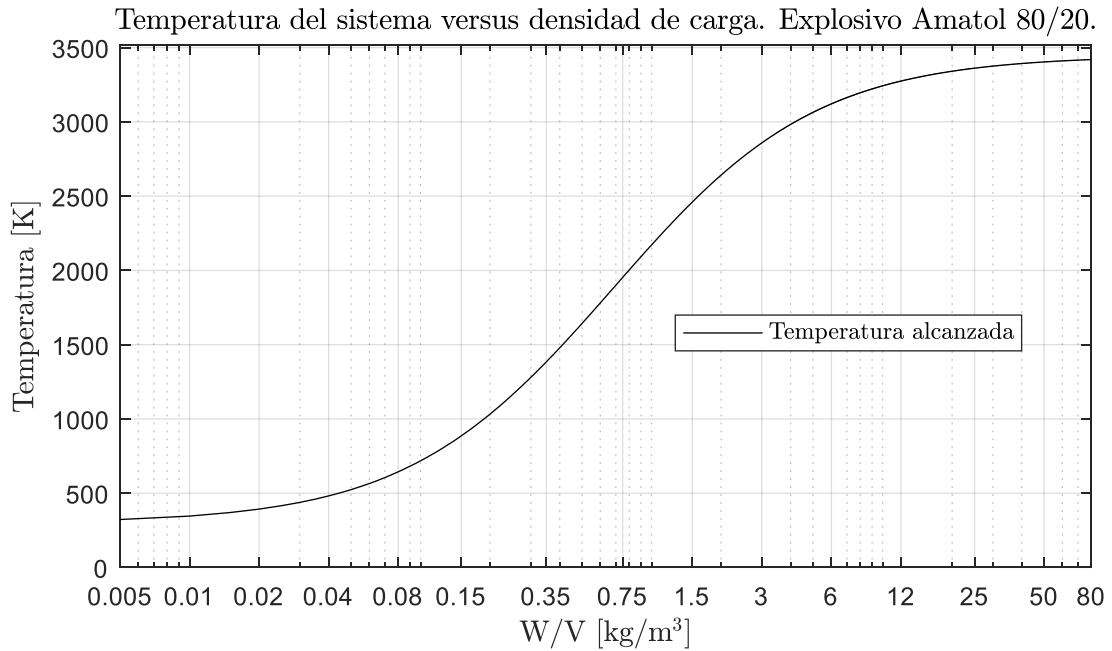


Figura 6-3: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Amatol 80/20.

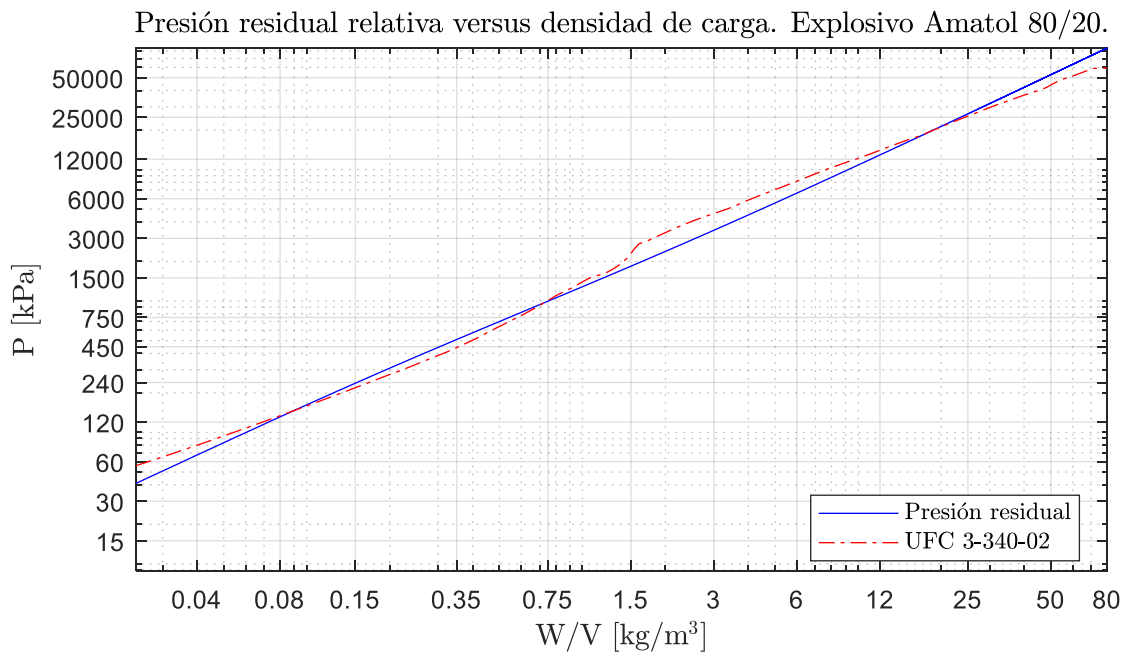


Figura 6-4: Presión residual relativa del sistema para explosivo Amatol 80/20.

## A.2.2. Boracitol

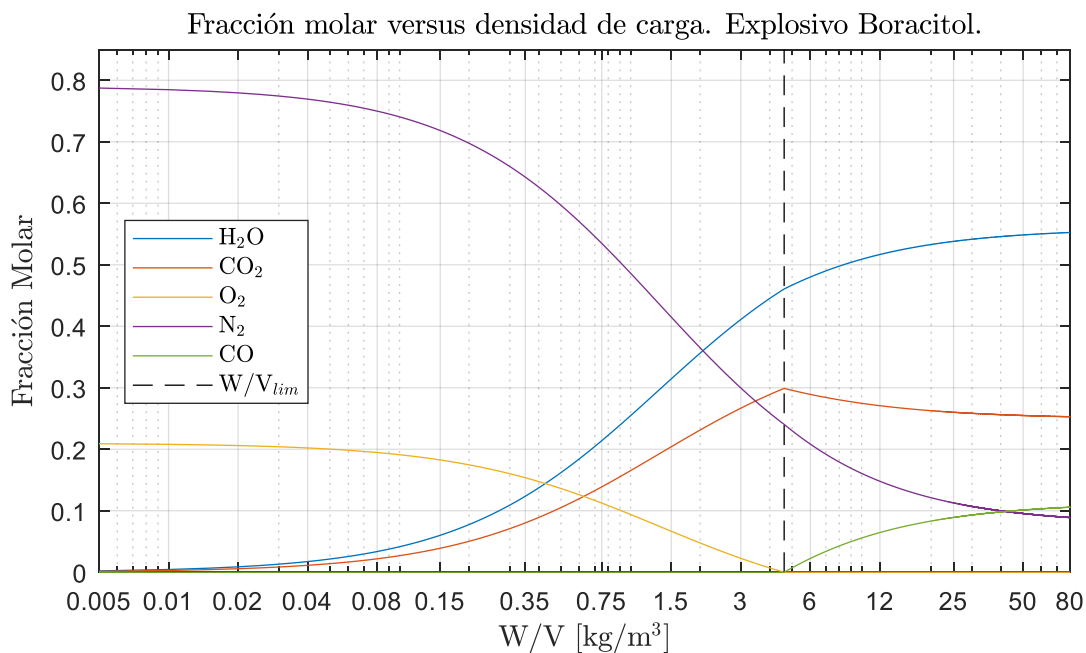


Figura 6-5: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Boracitol.

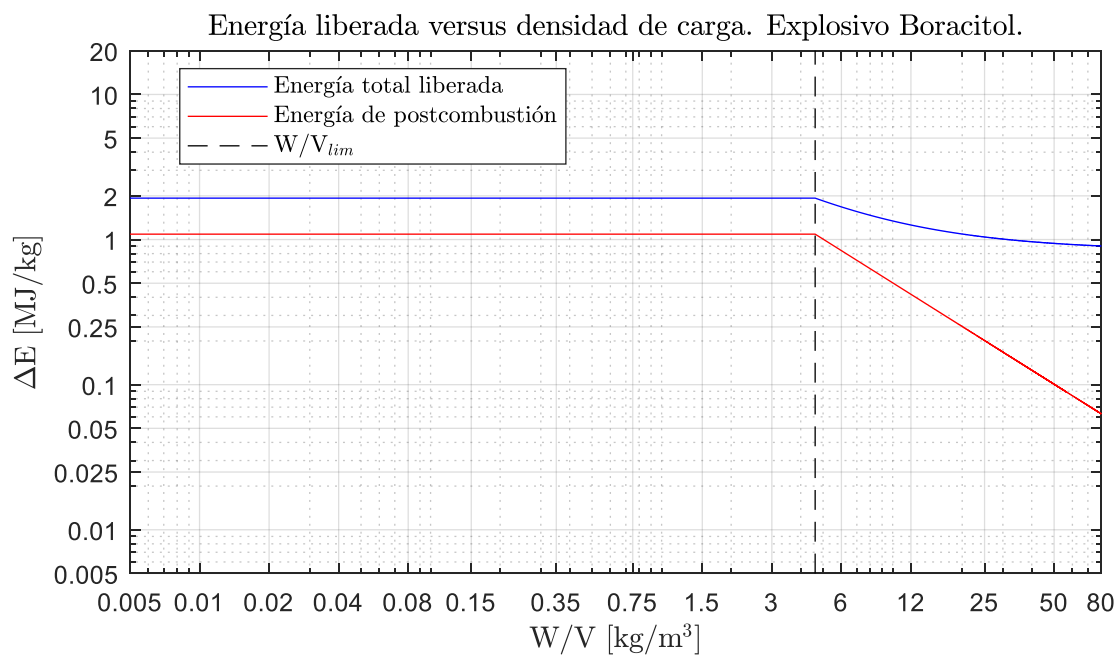


Figura 6-6: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Boracitol.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Boracitol.

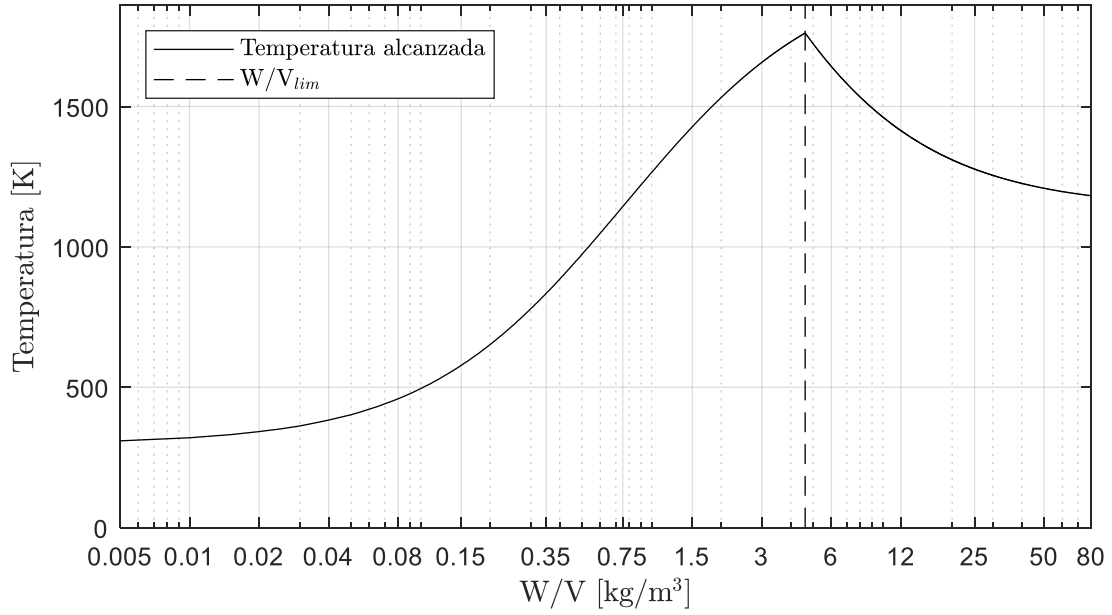


Figura 6-7: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Boracitol.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Boracitol.

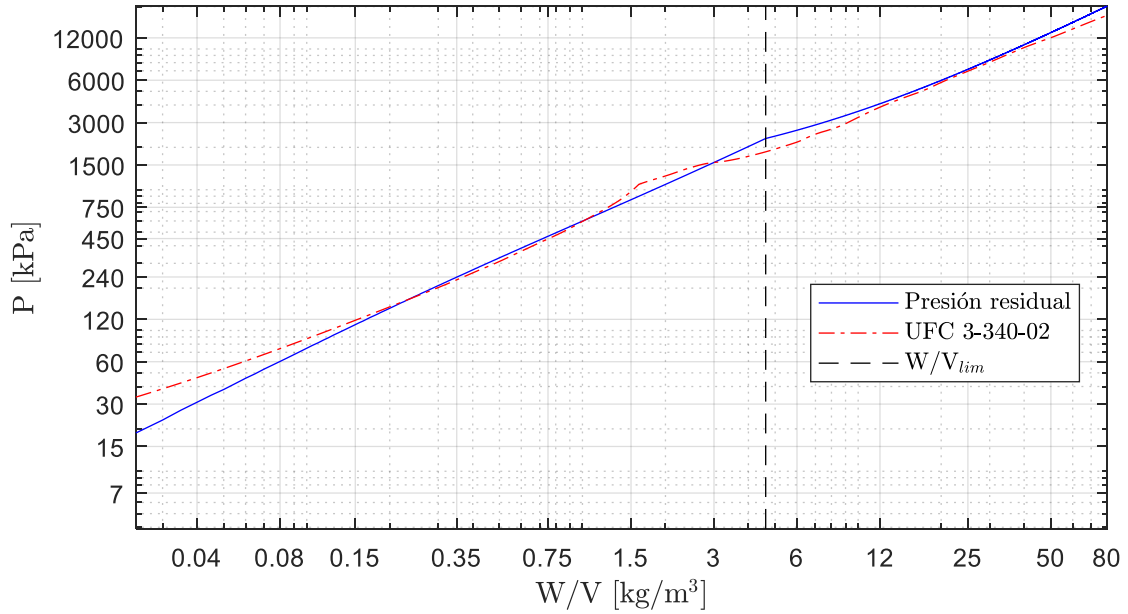


Figura 6-8: Presión residual relativa del sistema para explosivo Boracitol.

### A.2.3. BTF

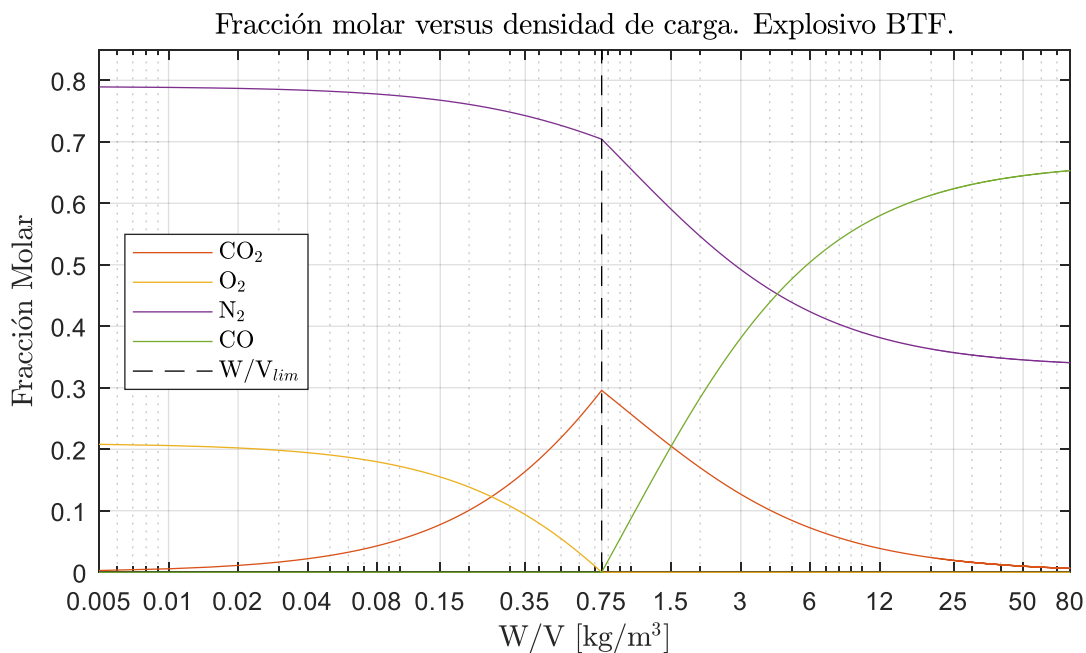


Figura 6-9: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo BTF.

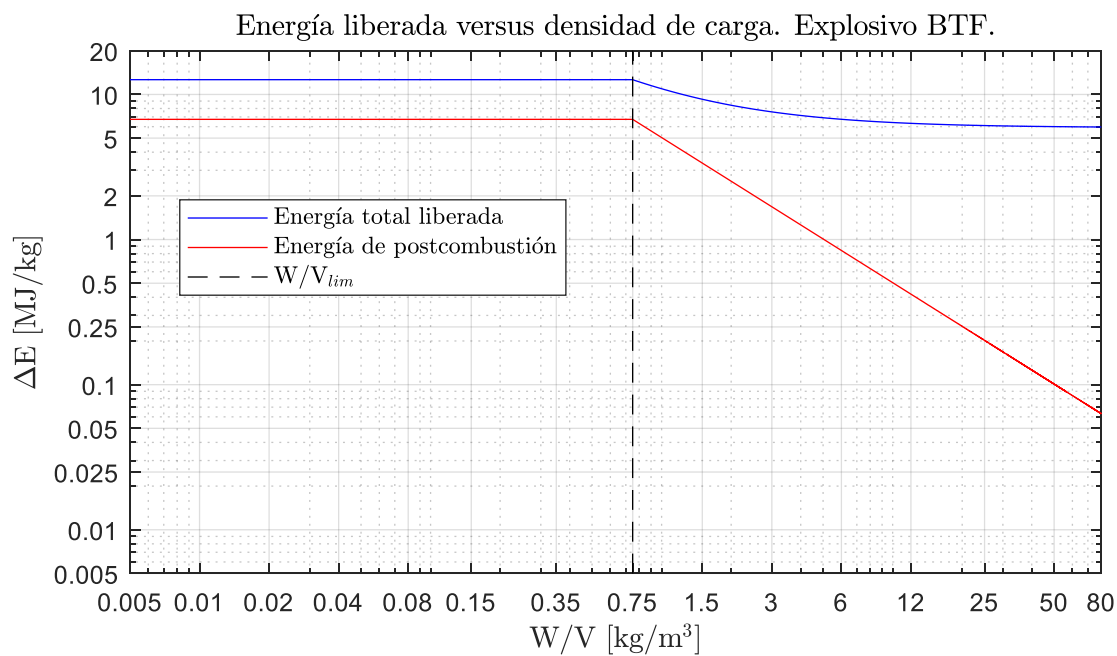


Figura 6-10: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo BTF.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo BTF.

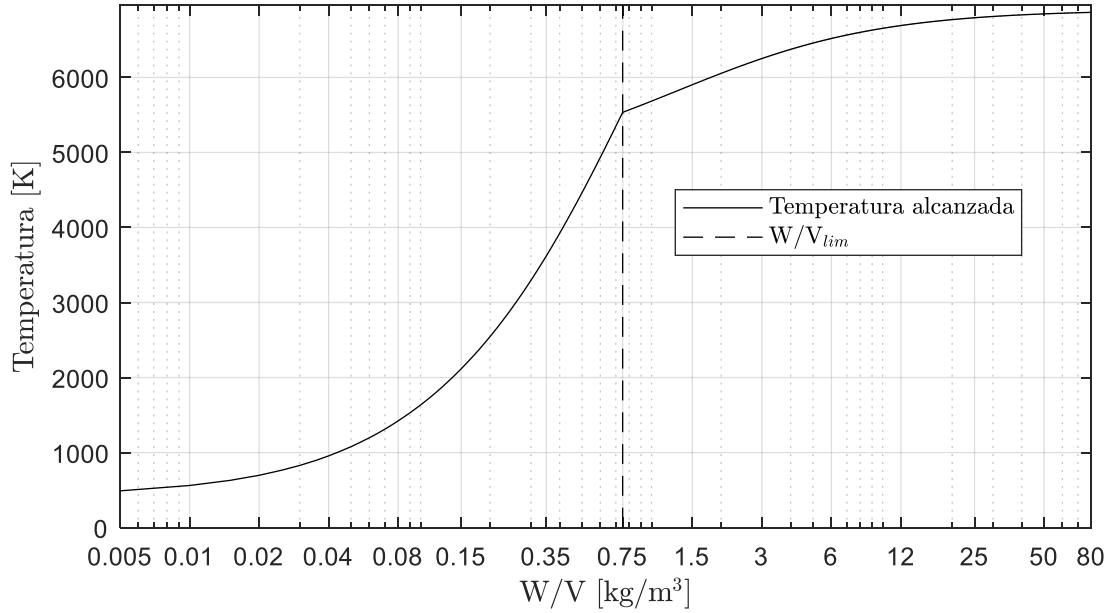


Figura 6-11: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo BTF.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo BTF.

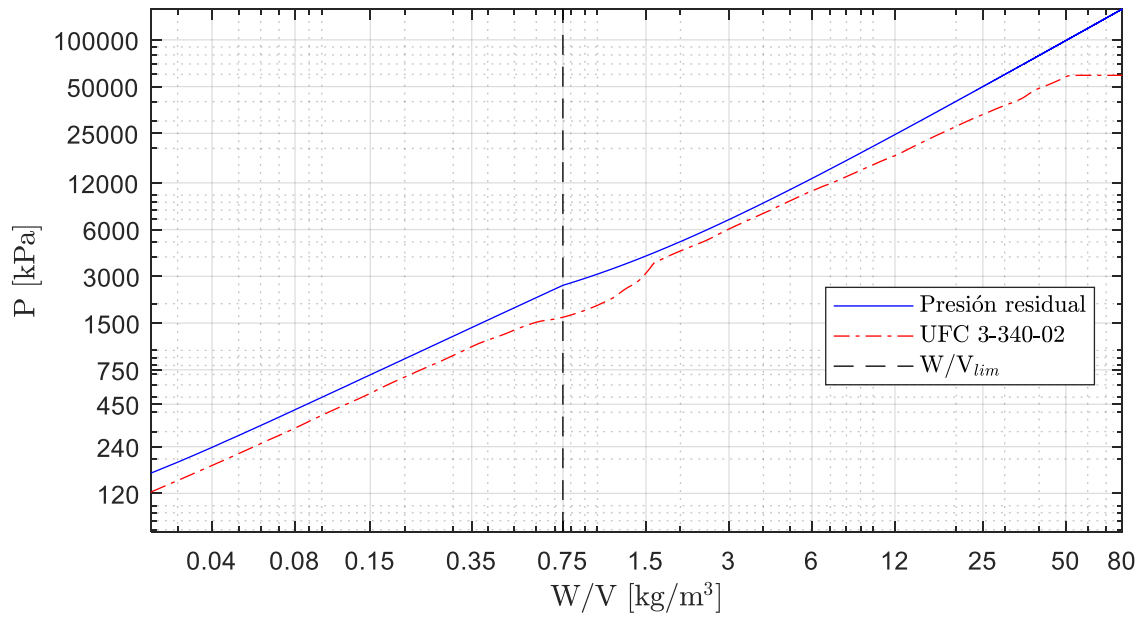


Figura 6-12: Presión residual relativa del sistema para explosivo BTF.

### A.2.4. Comp A-3

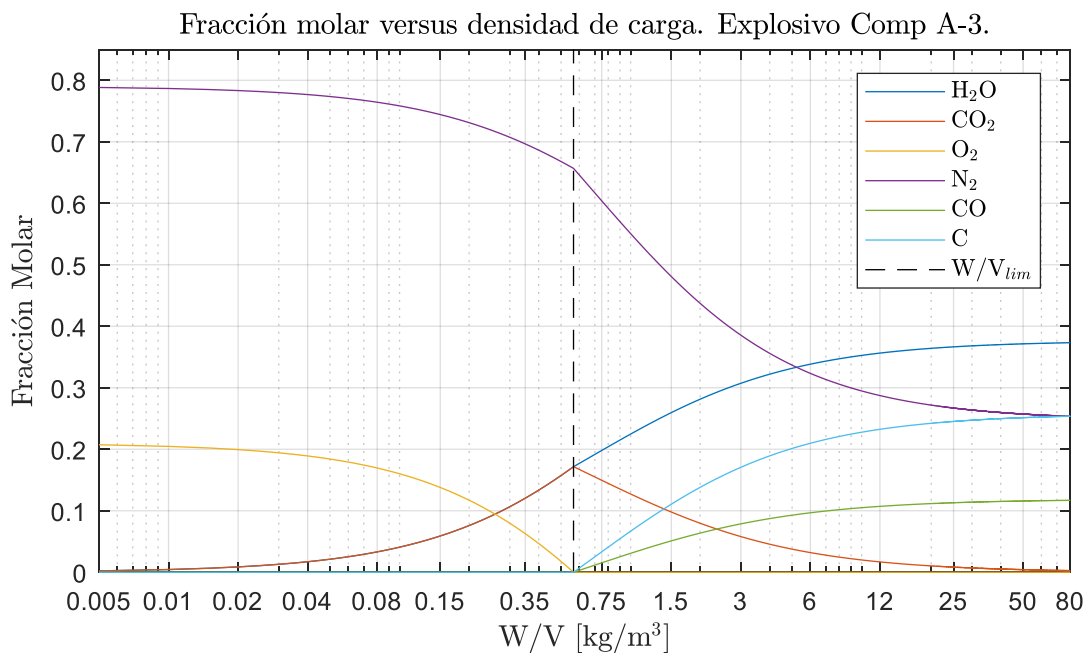


Figura 6-13: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto A-3.

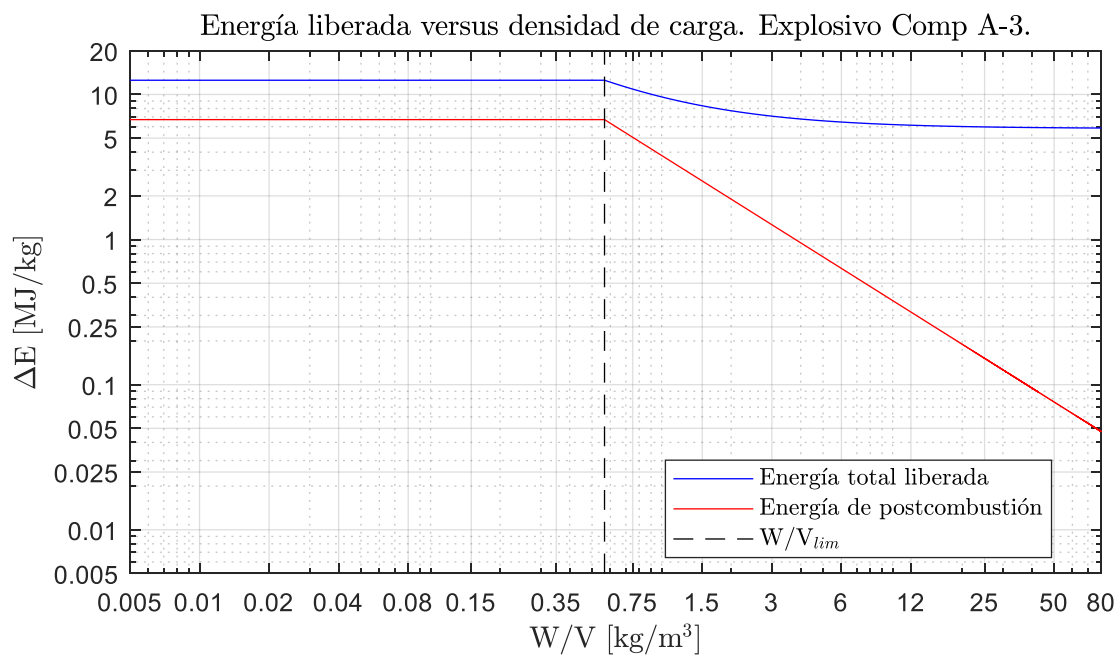


Figura 6-14: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp A-3.



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Comp A-3.

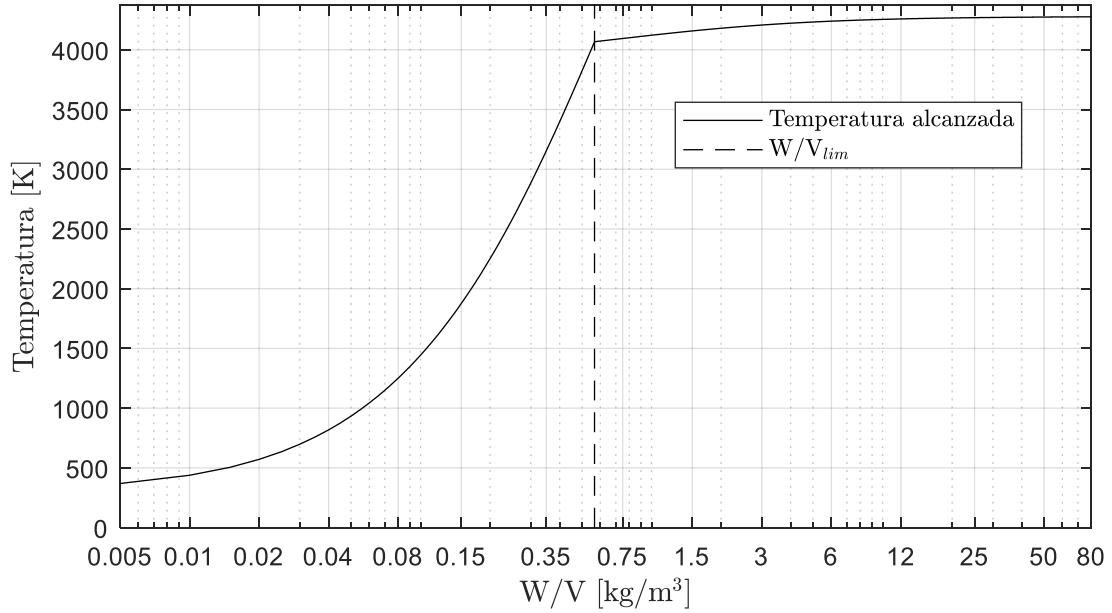


Figura 6-15: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp A-3.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Comp A-3.

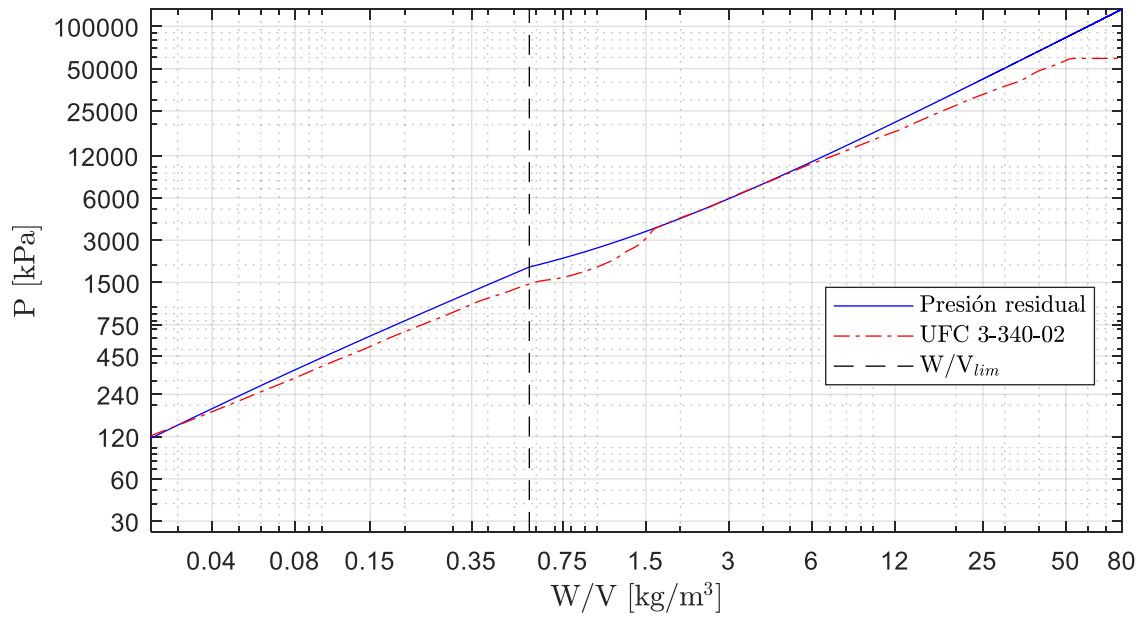


Figura 6-16: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp A-3.

### A.2.5. Comp A-5

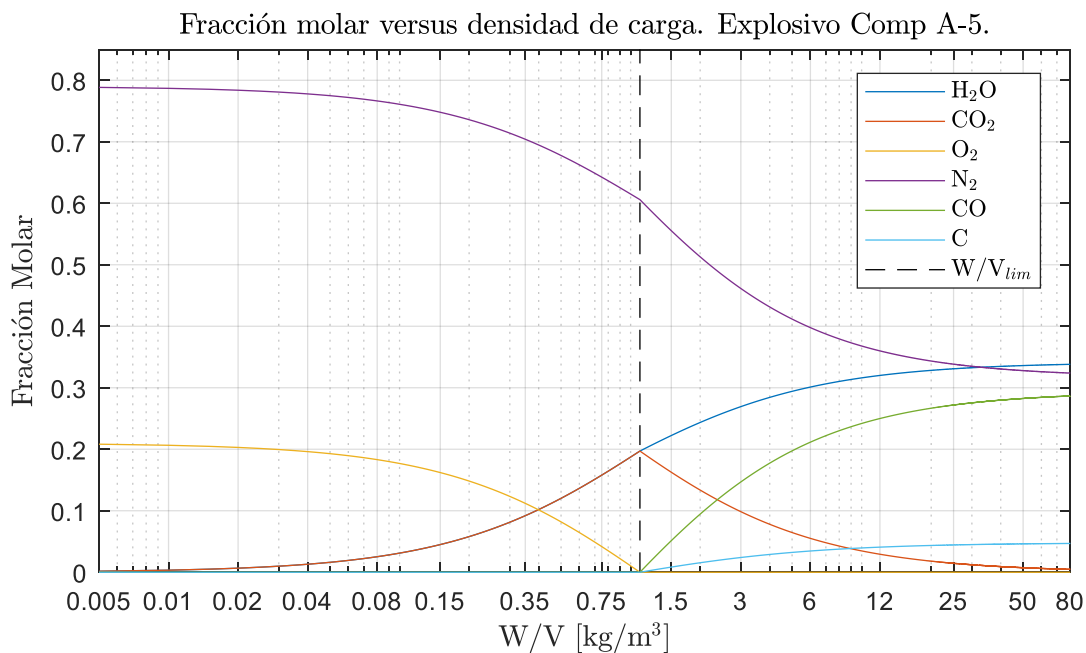


Figura 6-17: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto A-5.

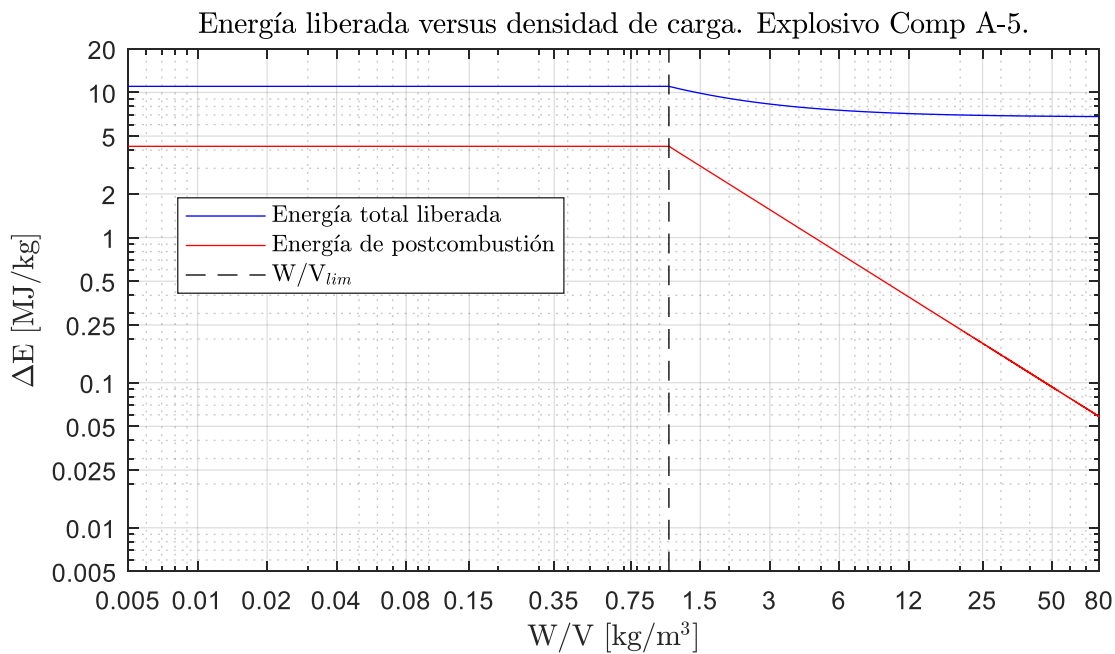


Figura 6-18: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp A-5.

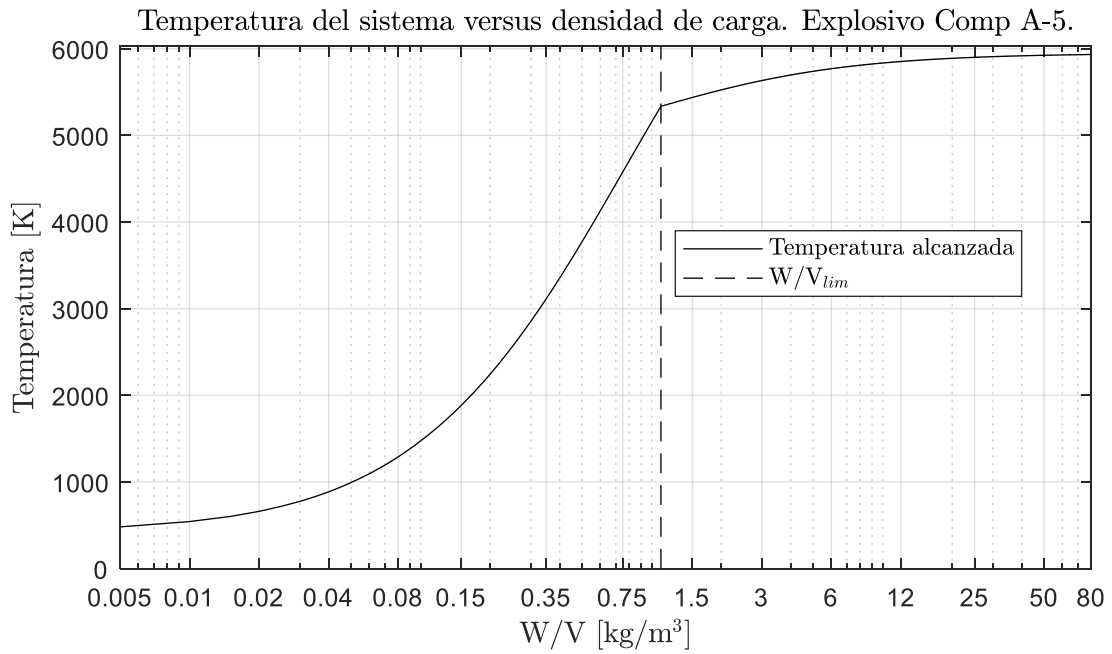


Figura 6-19: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp A-5.

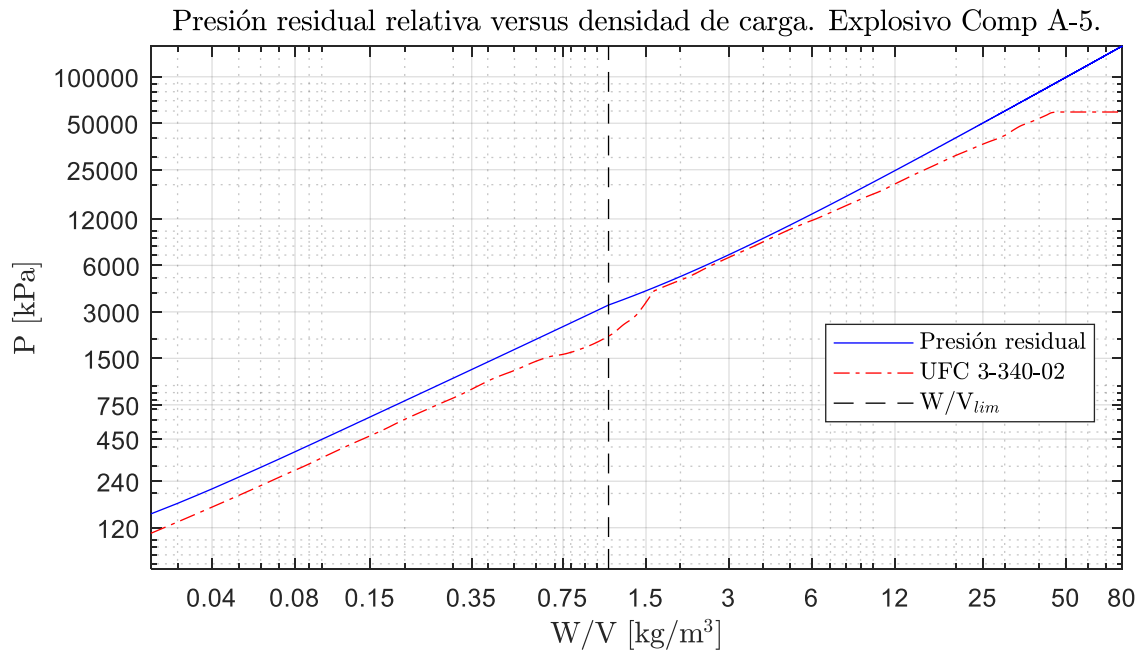


Figura 6-20: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp A-5.

## A.2.6. Comp B Grade A

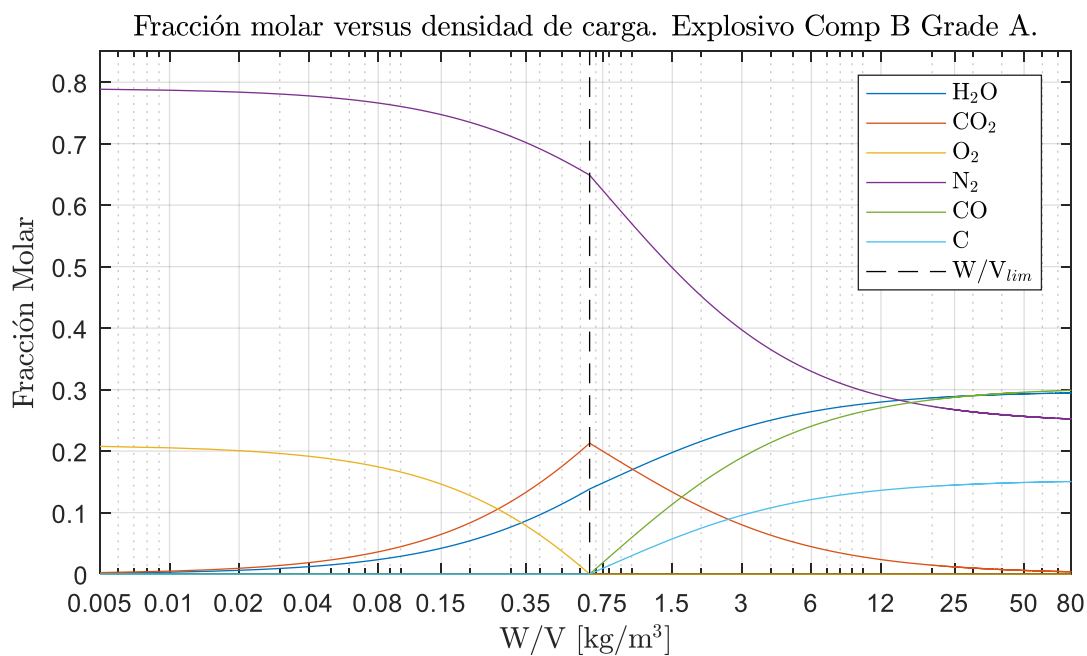


Figura 6-21: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto B Grade A.

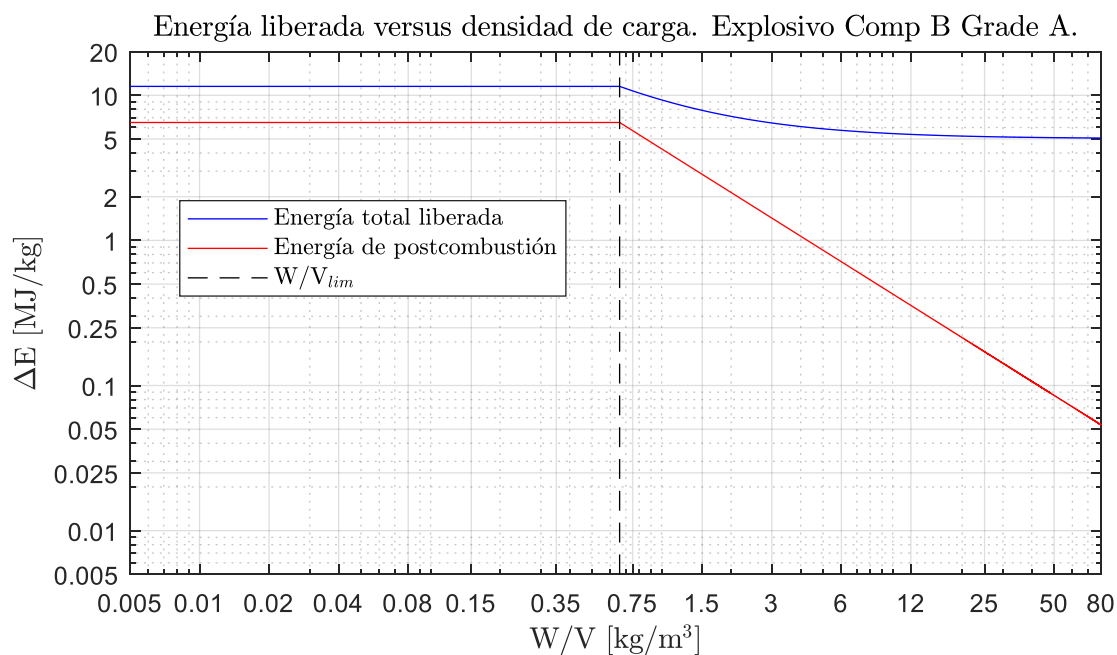


Figura 6-22: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp B Grade A.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Comp B Grade A.

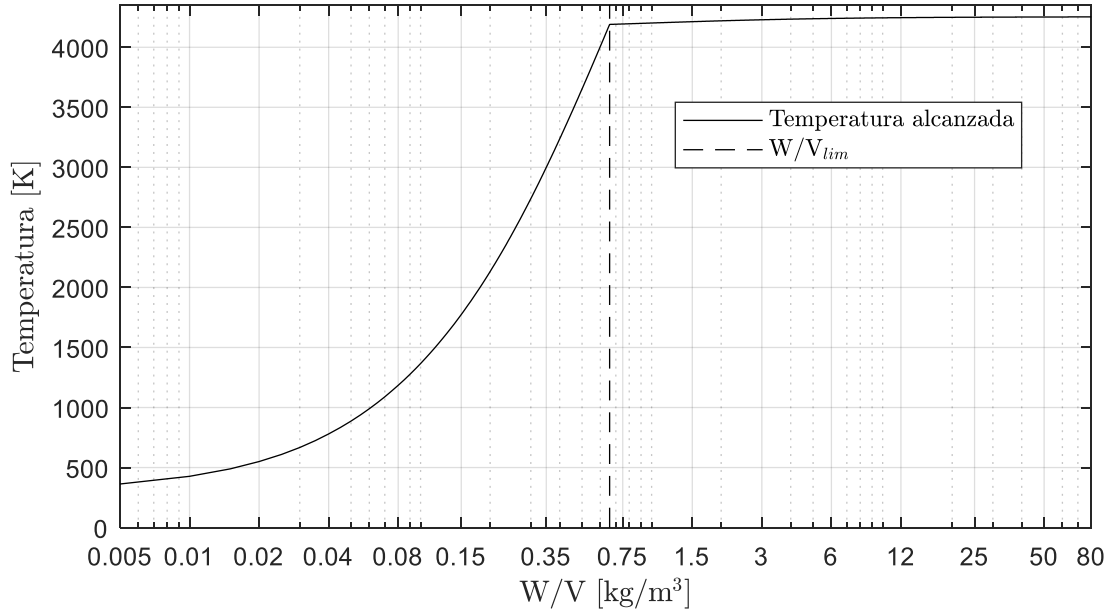


Figura 6-23: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp B Grade A.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Comp B Grade A.

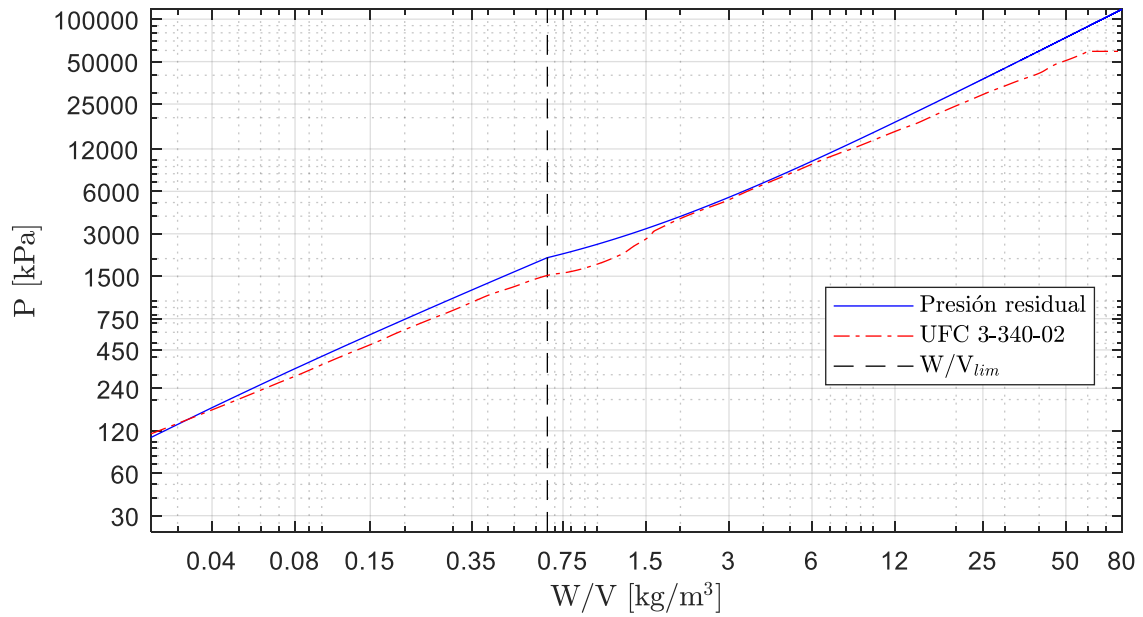


Figura 6-24: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp B Grade A.

### A.2.7. Comp B-3

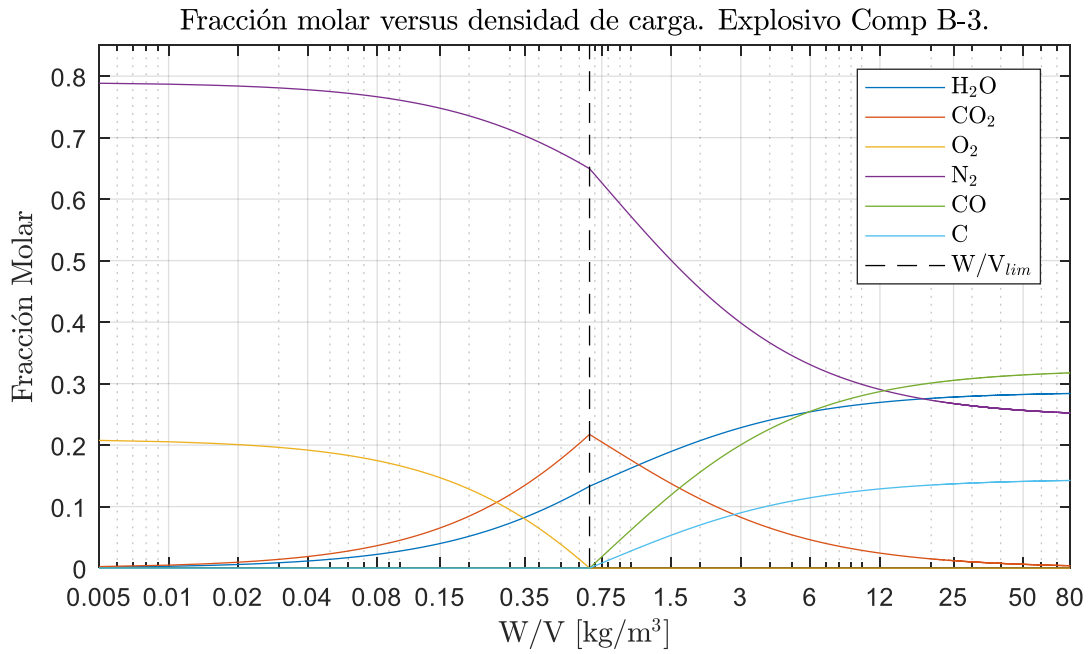


Figura 6-25: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto B-3.

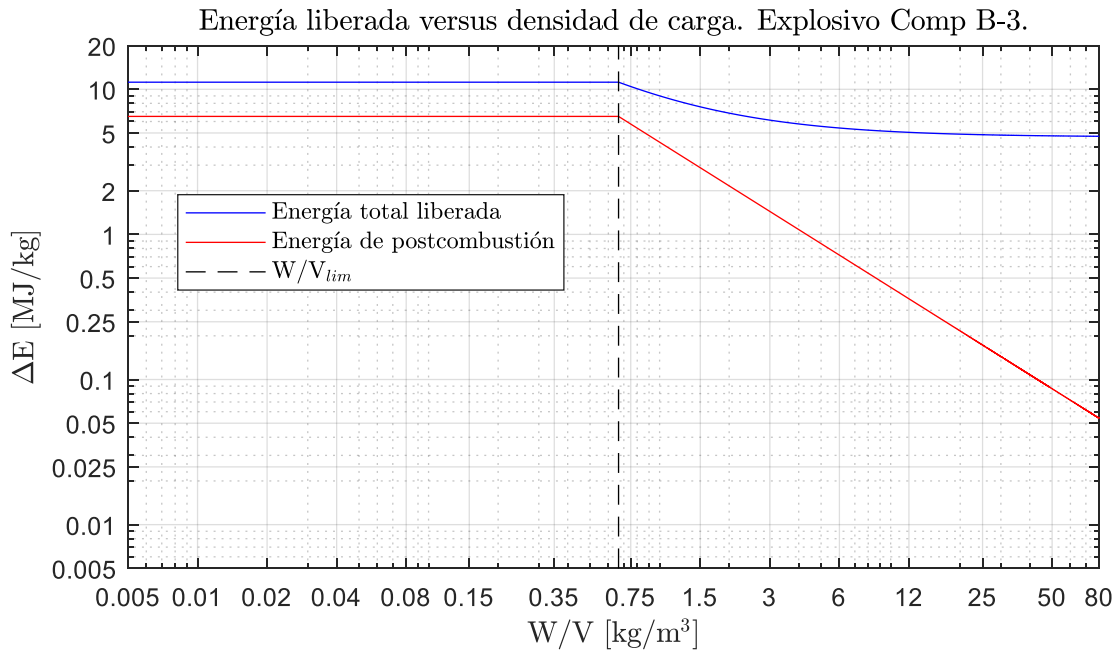


Figura 6-26: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp B-3.

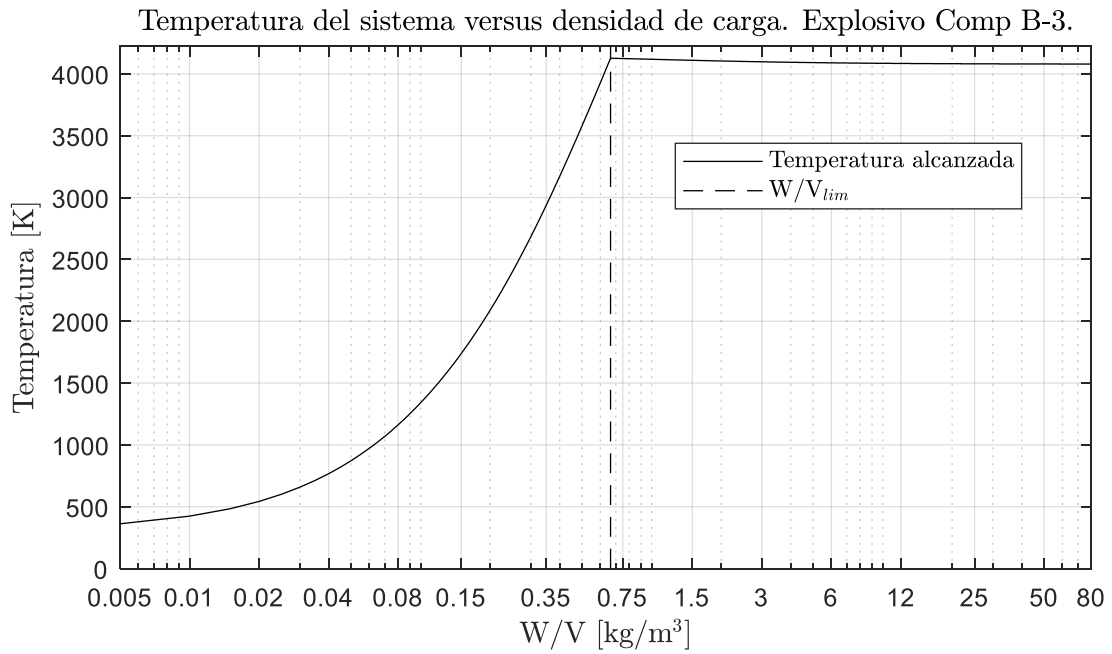


Figura 6-27: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp B-3.

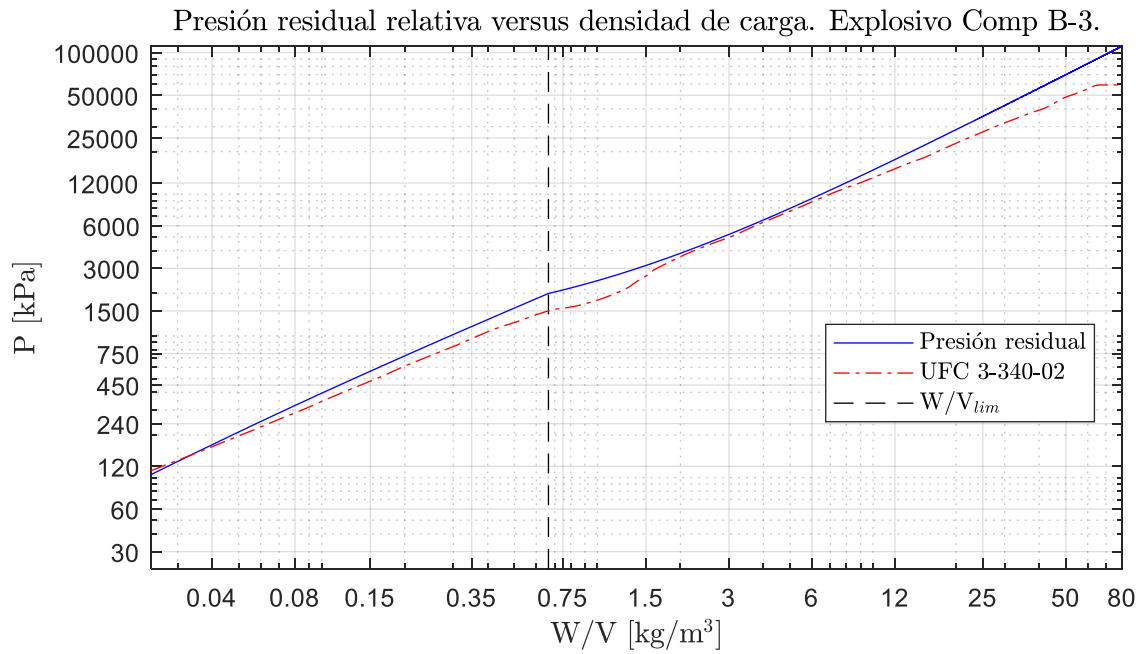


Figura 6-28: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp B-3.

### A.2.8. Comp C-3

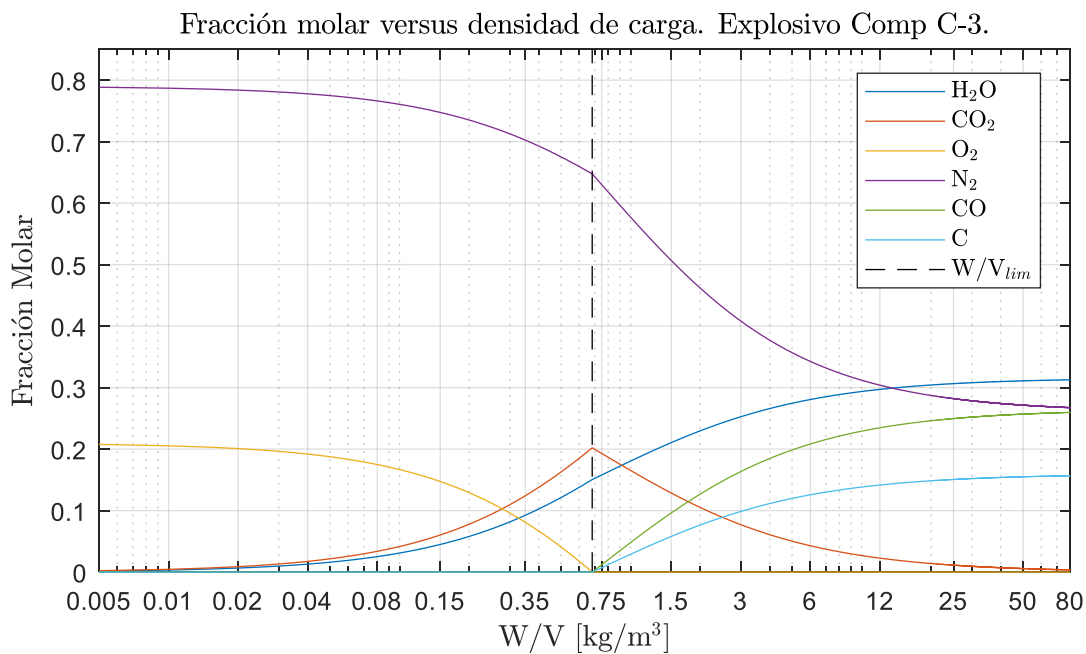


Figura 6-29: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Compuesto C-3.

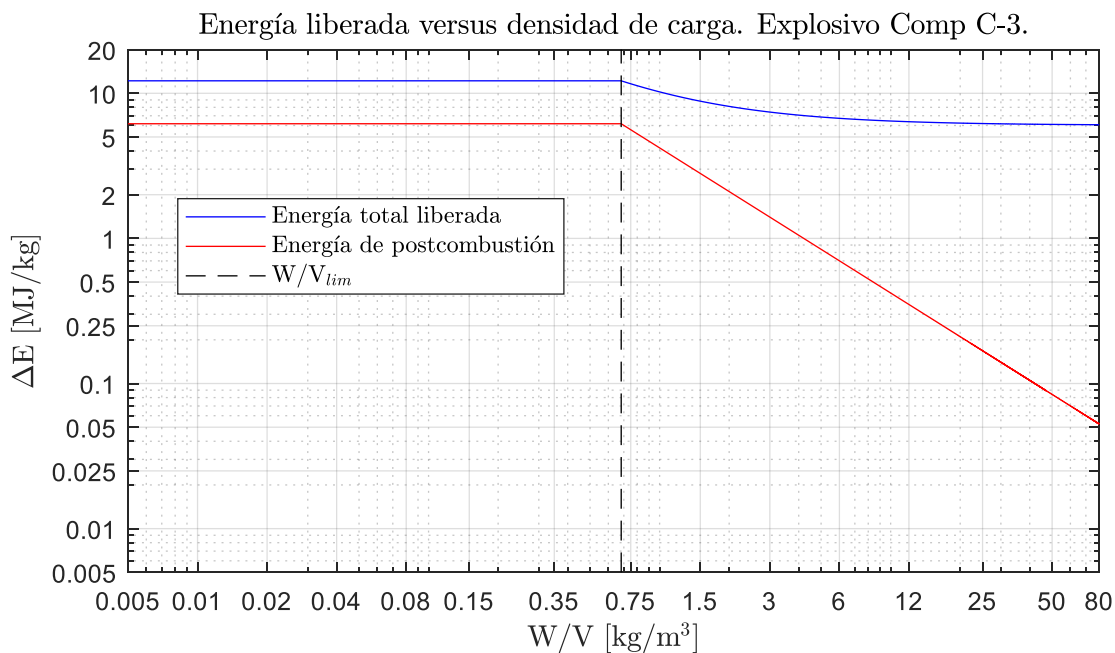


Figura 6-30: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Comp C-3.



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Comp C-3.

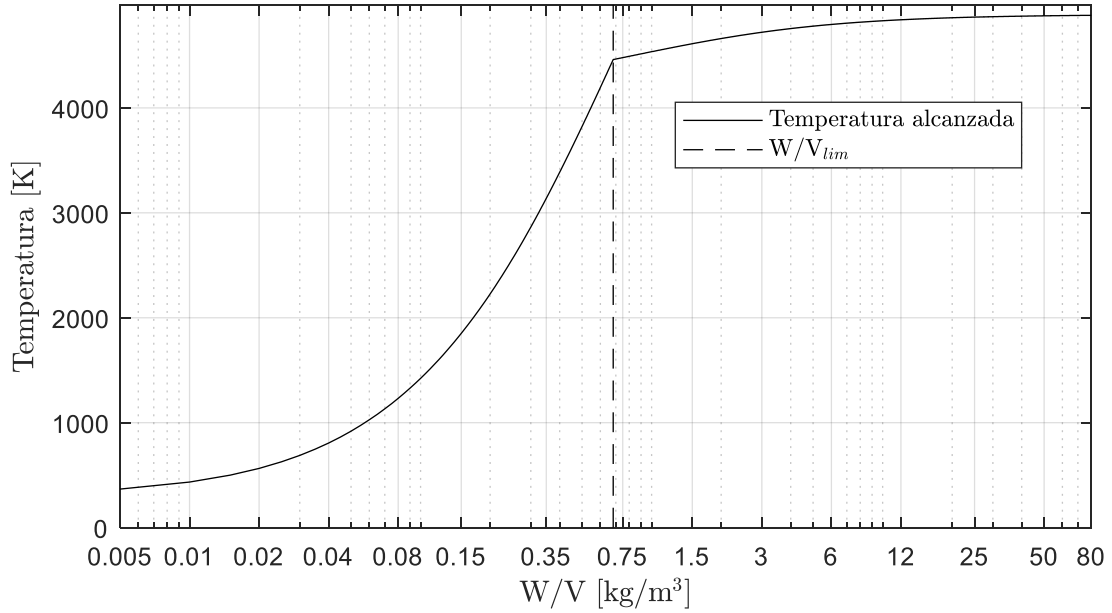


Figura 6-31: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Comp C-3.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Comp C-3.

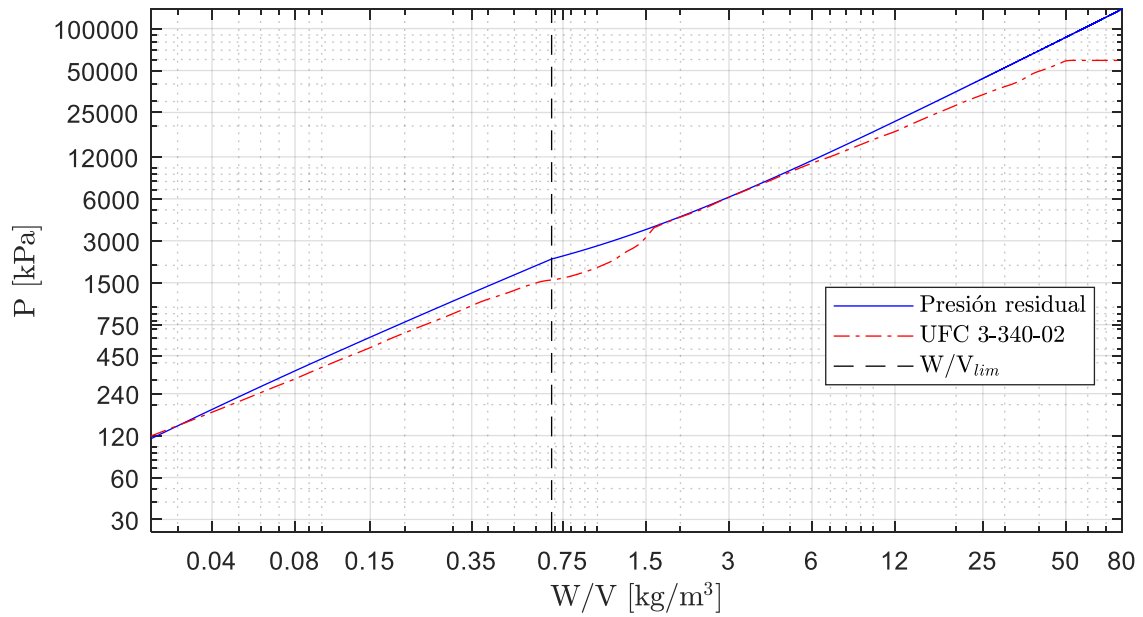


Figura 6-32: Presión residual relativa del sistema para explosivo Comp C-3.

### A.2.9. Cyclotol 60/40

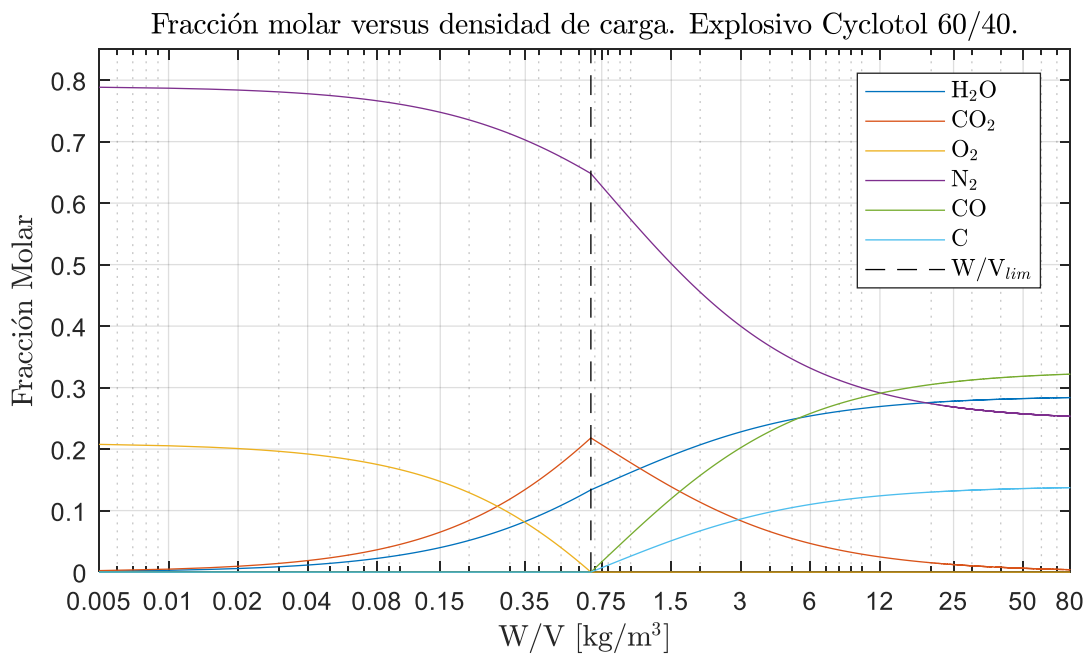


Figura 6-33: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Cyclotol 60/40.

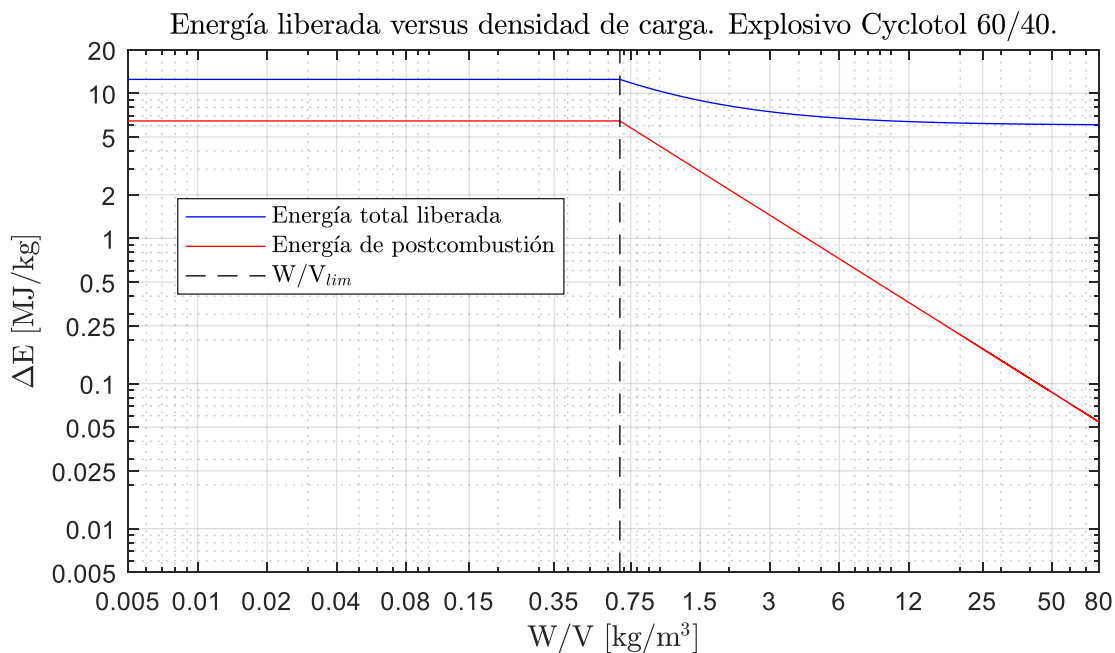


Figura 6-34: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Cyclotol 60/40.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Cyclotol 60/40.

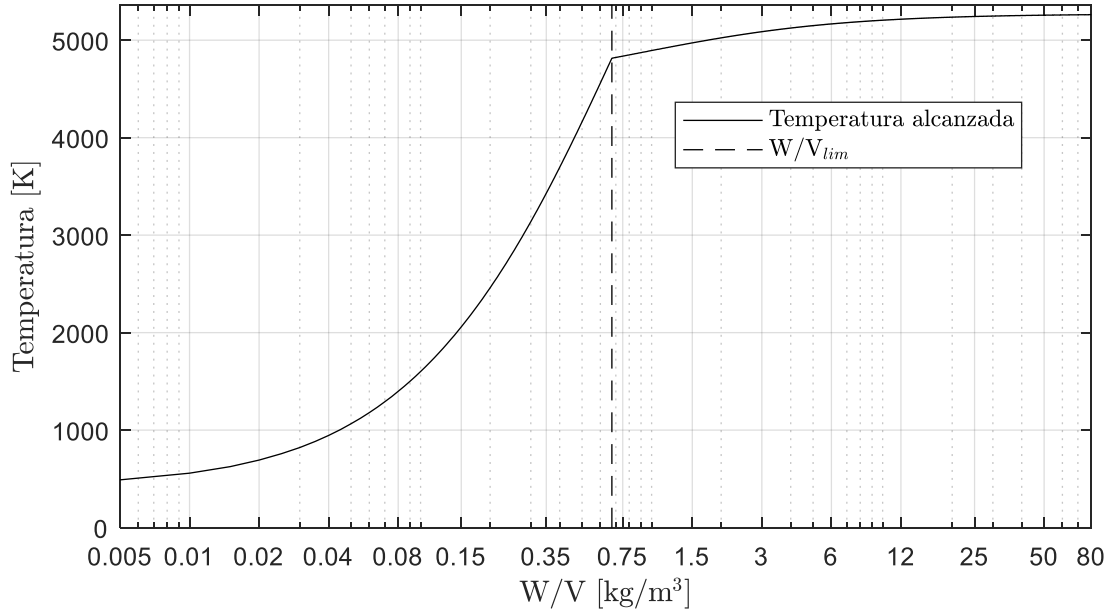


Figura 6-35: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Cyclotol 60/40.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Cyclotol 60/40.

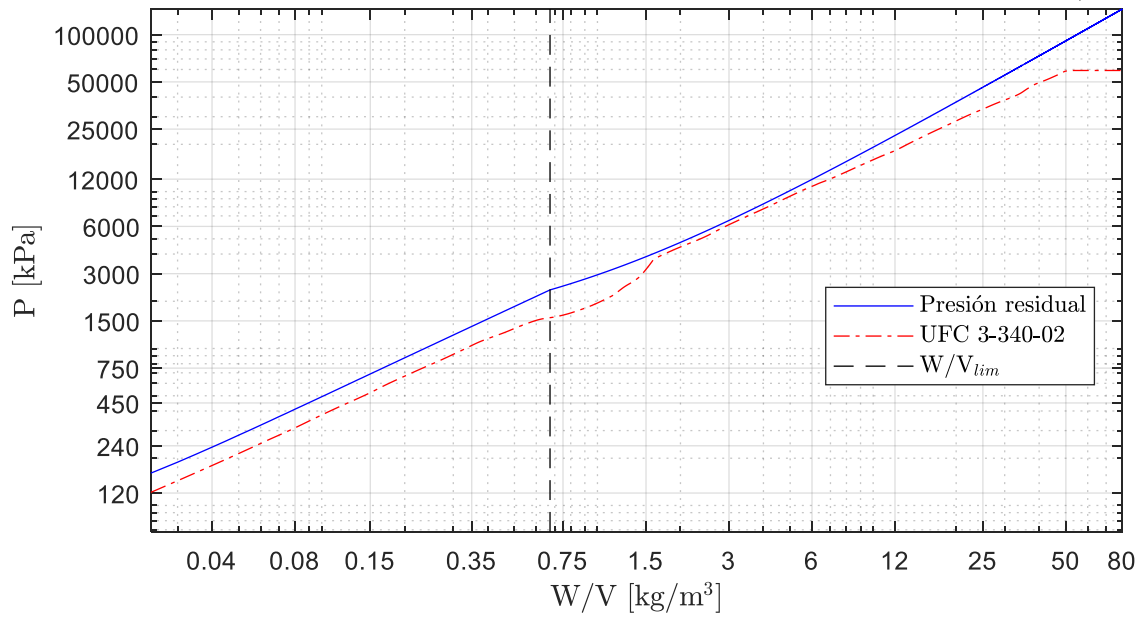


Figura 6-36: Presión residual relativa del sistema para explosivo Cyclotol 60/40.

A.2.10. Cyclotol 75/25

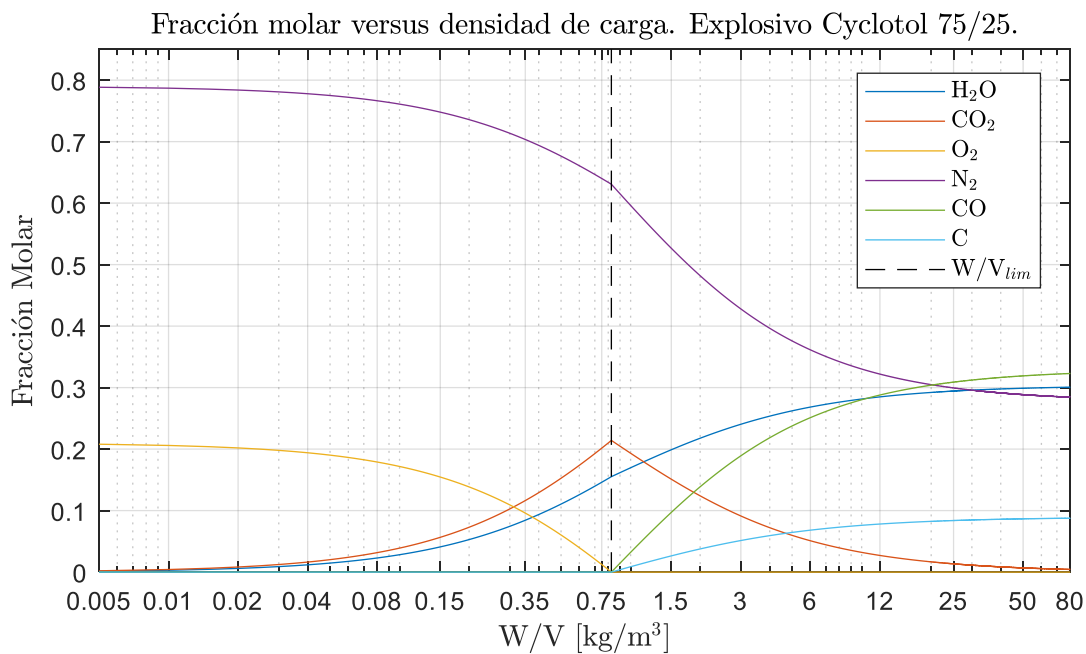


Figura 6-37: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Cyclotol 75/25.

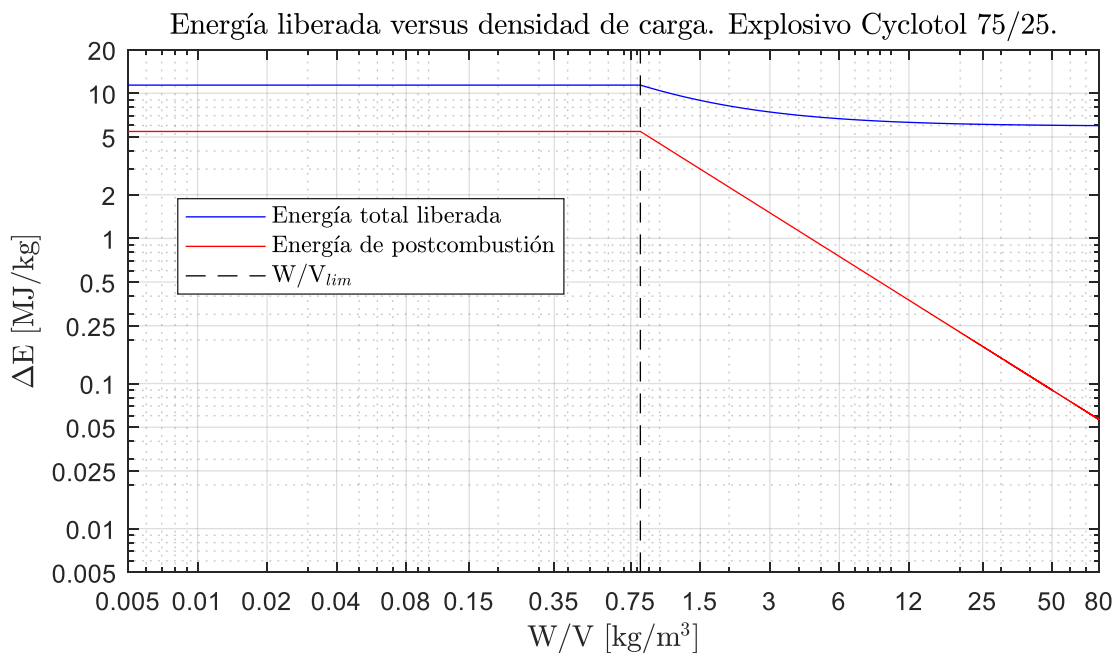


Figura 6-38: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Cyclotol 75/25.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Cyclotol 75/25.

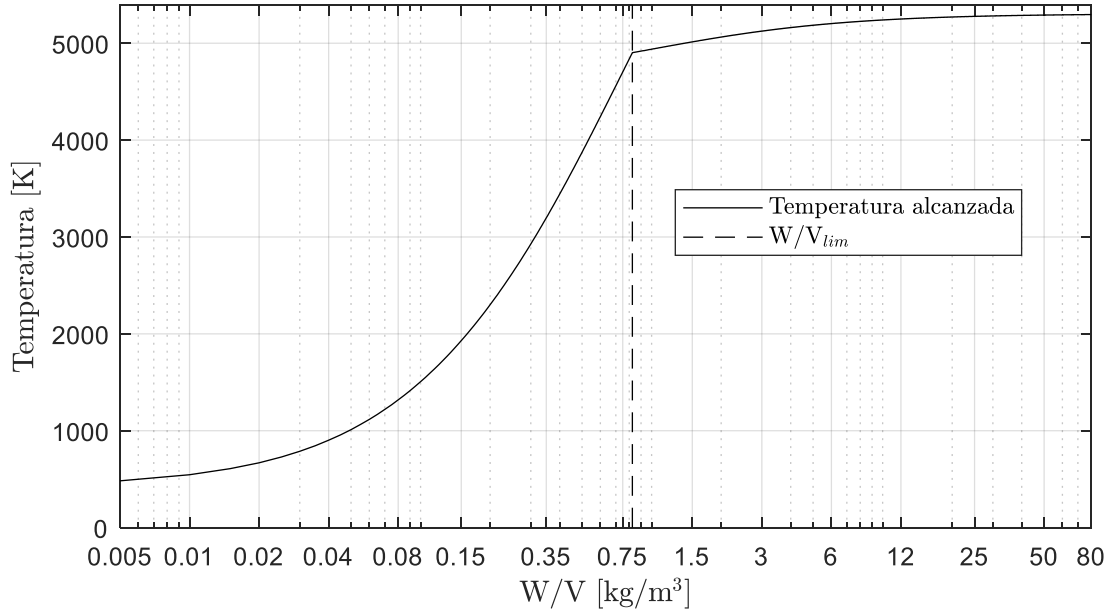


Figura 6-39: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Cyclotol 75/25.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Cyclotol 75/25.

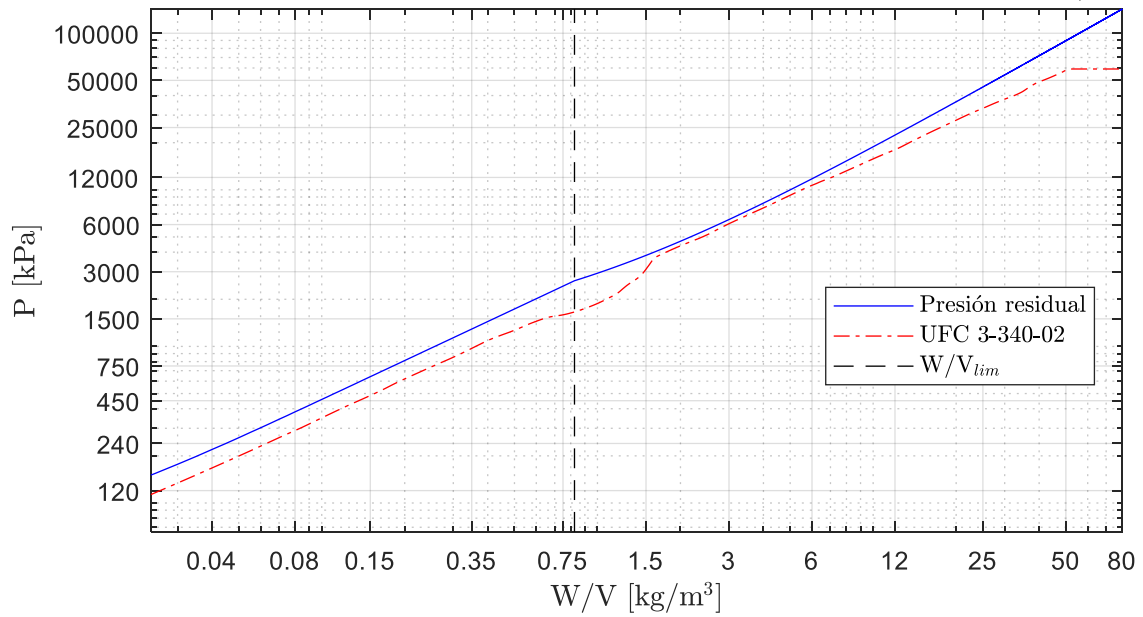


Figura 6-40: Presión residual relativa del sistema para explosivo Cyclotol 75/25.

A.2.11. DATB

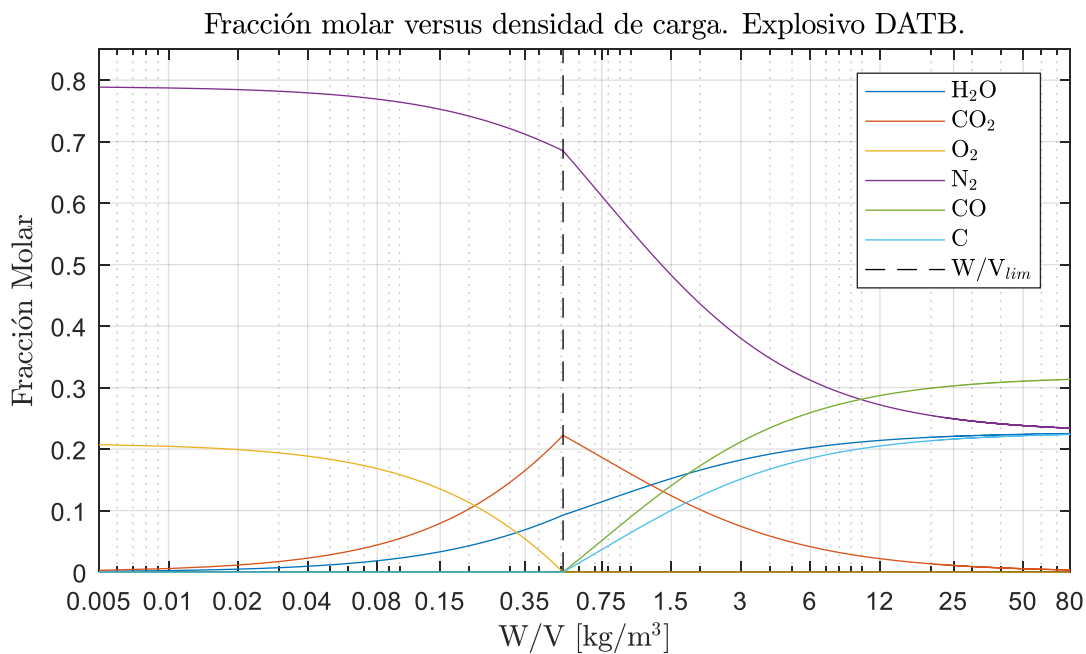


Figura 6-41: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo DATB.

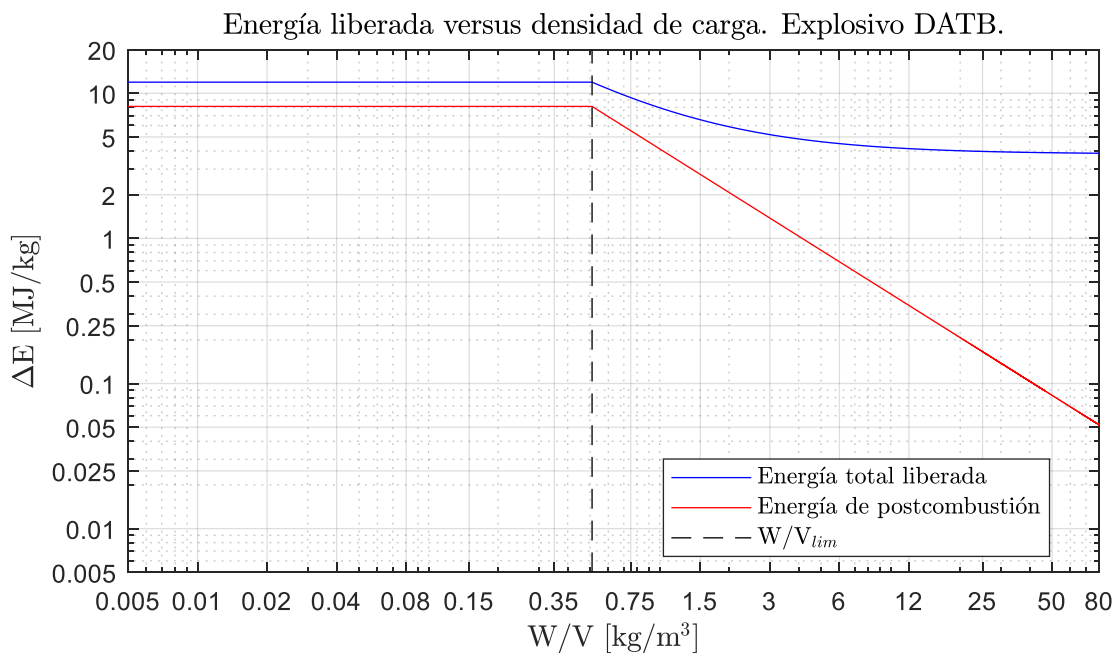


Figura 6-42: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo DATB.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo DATB.

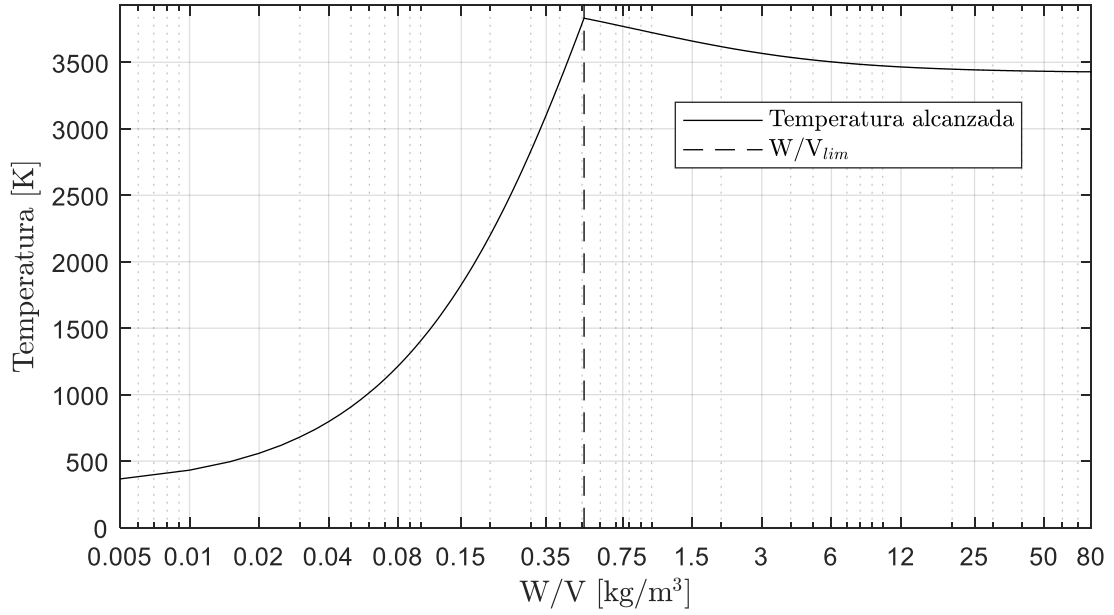


Figura 6-43: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo DATB.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo DATB.

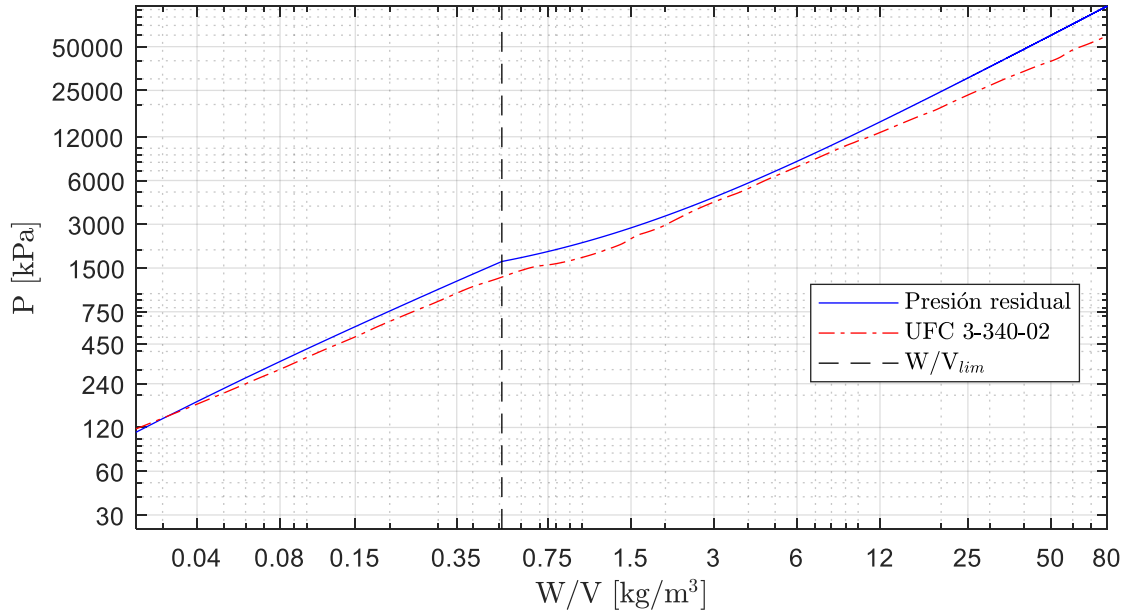


Figura 6-44: Presión residual relativa del sistema para explosivo DATB.

A.2.12. DIPAM

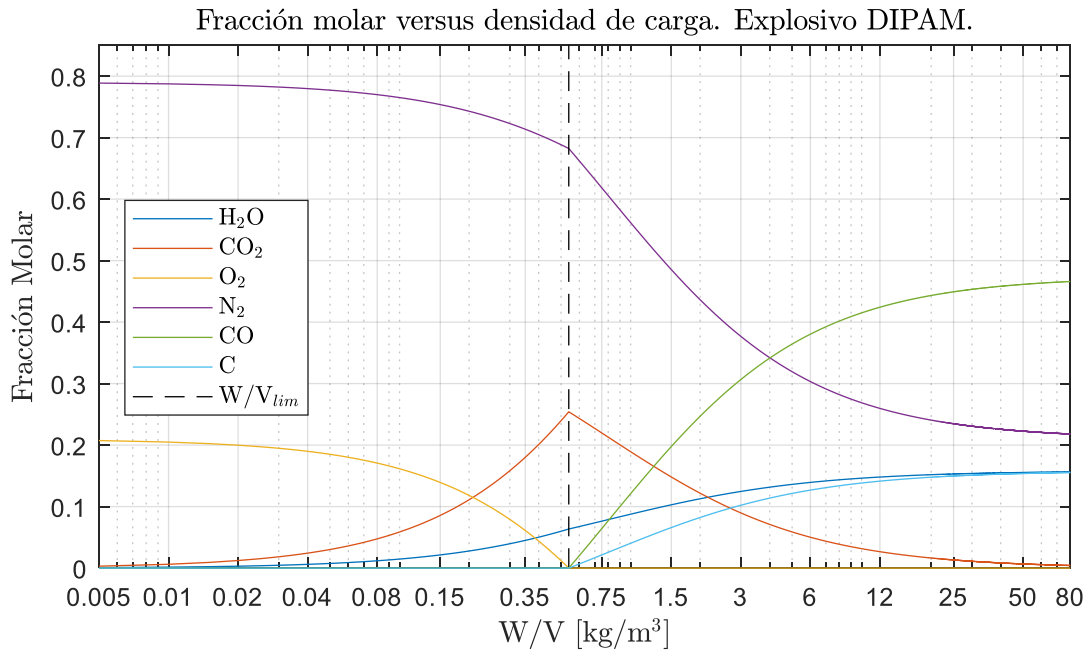


Figura 6-45: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo DIPAM.

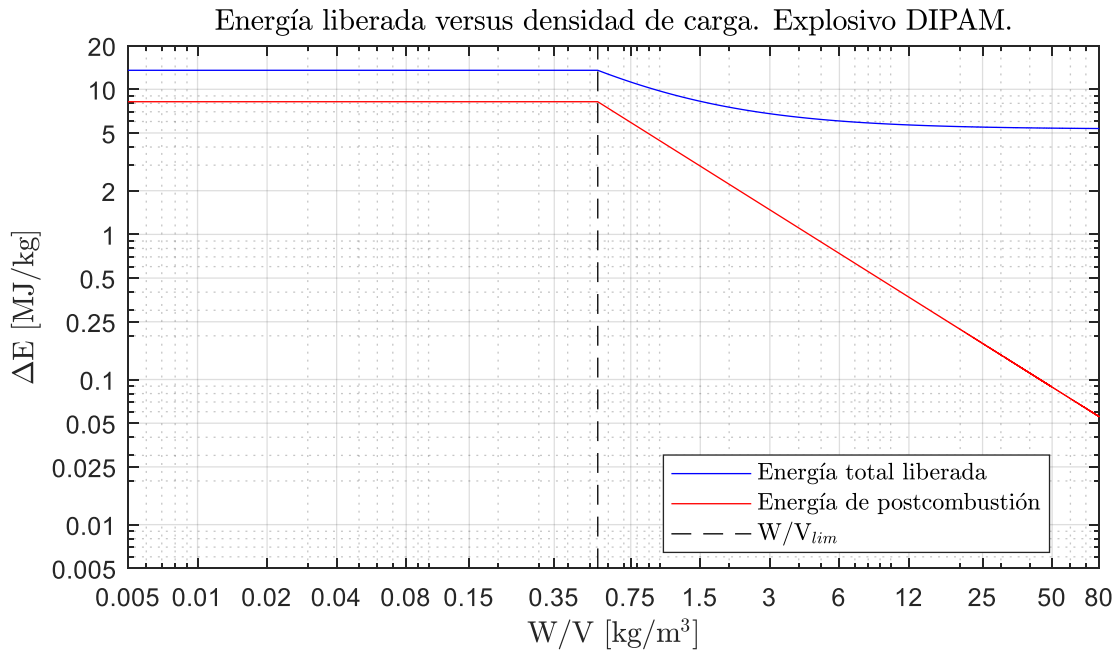


Figura 6-46: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo DIPAM.



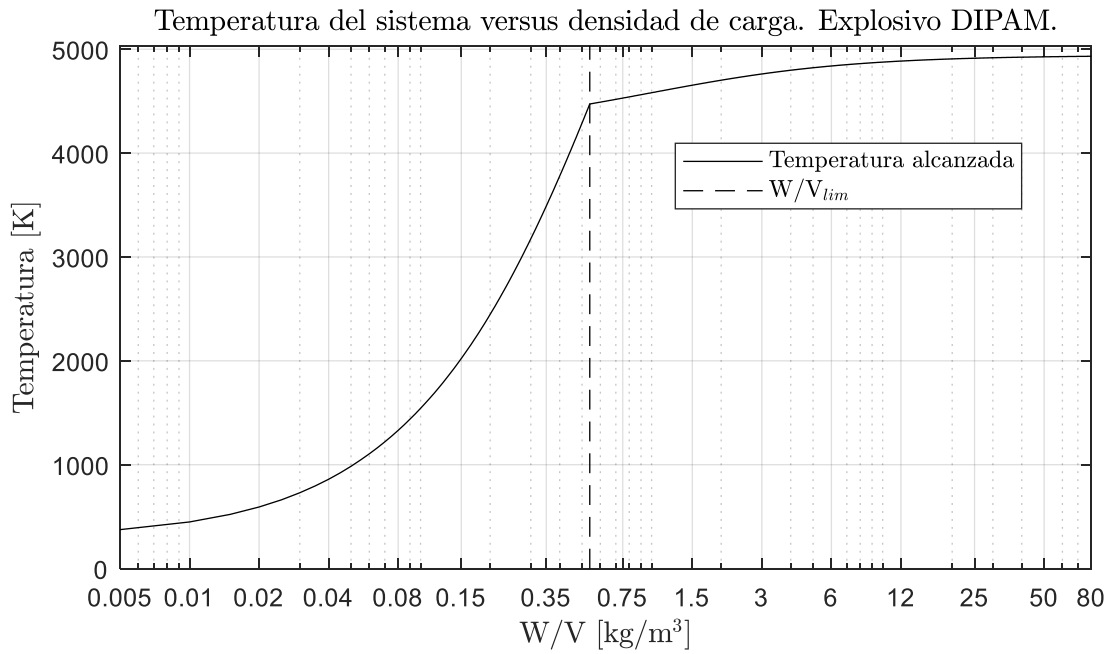


Figura 6-47: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo DIPAM.

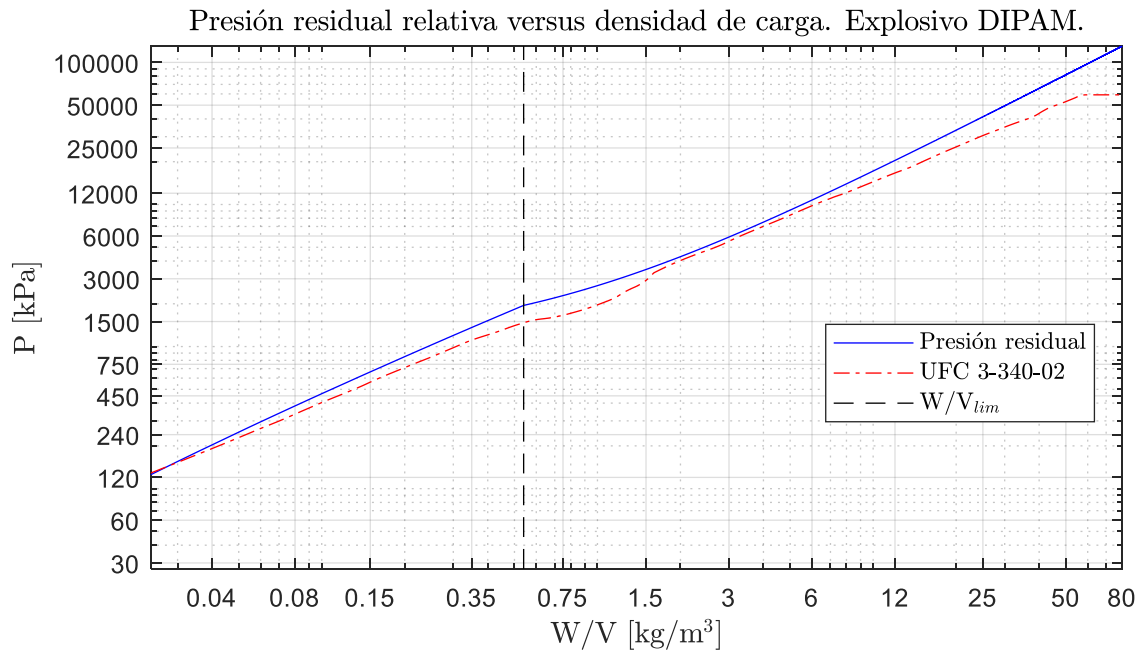


Figura 6-48: Presión residual relativa del sistema para explosivo DIPAM.

A.2.13. DNPA

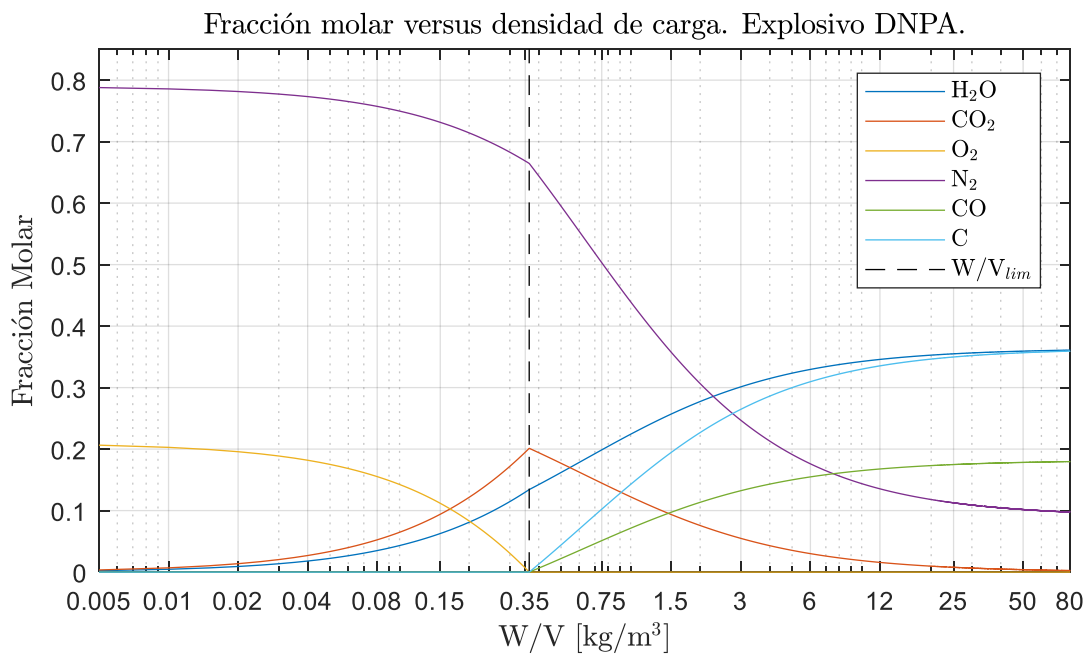


Figura 6-49: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo DNPA.

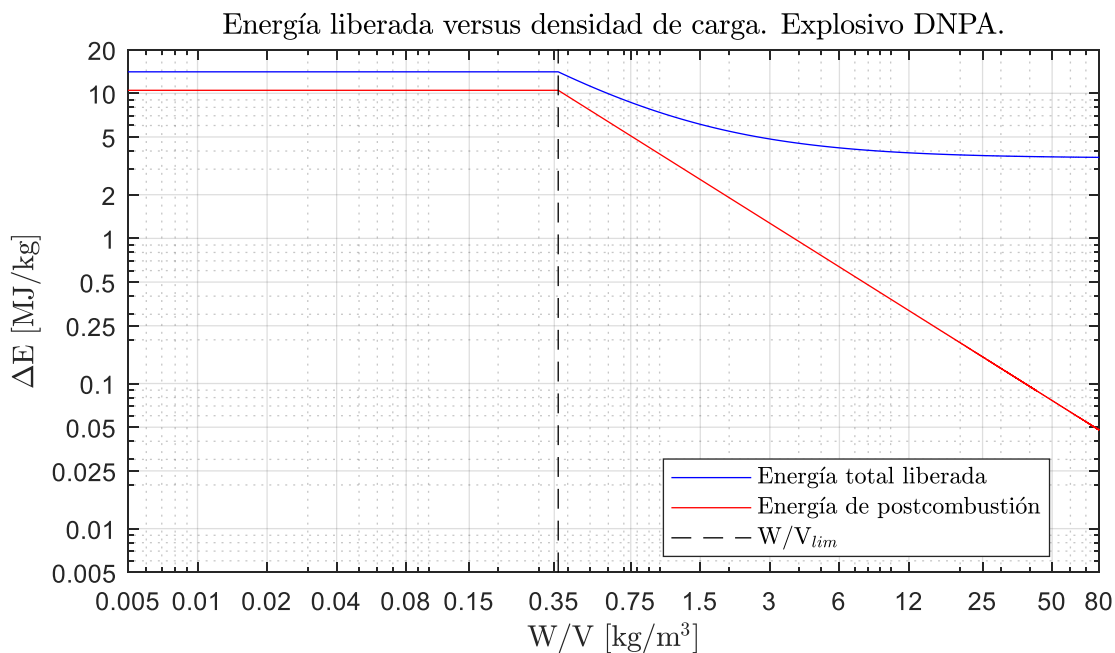


Figura 6-50: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo DNPA.

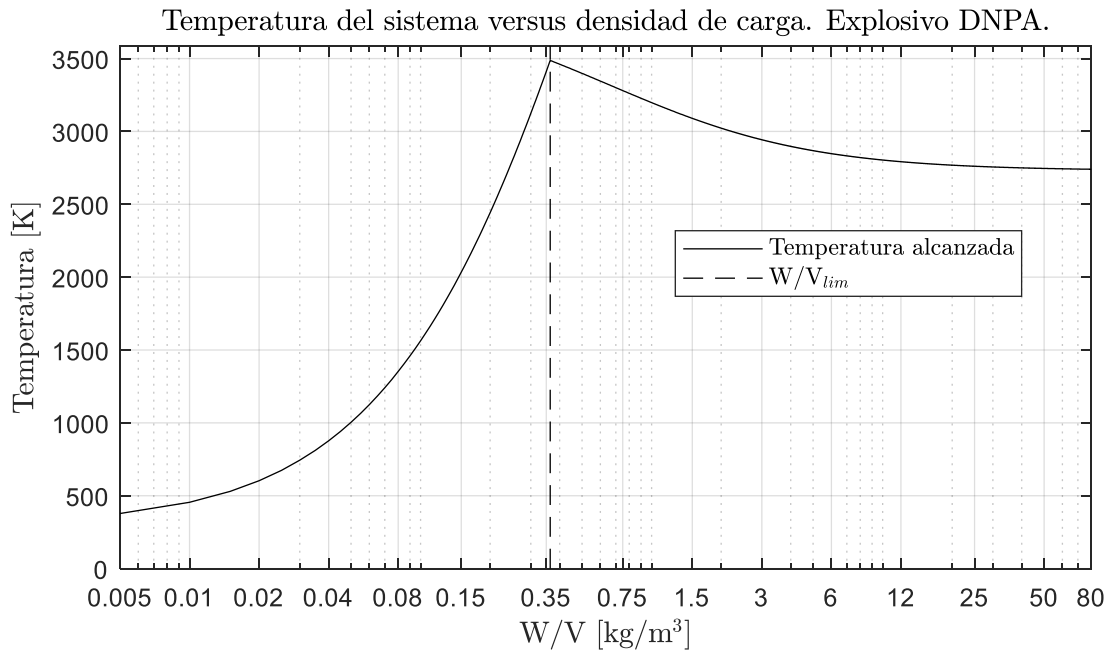


Figura 6-51: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo DNPA.

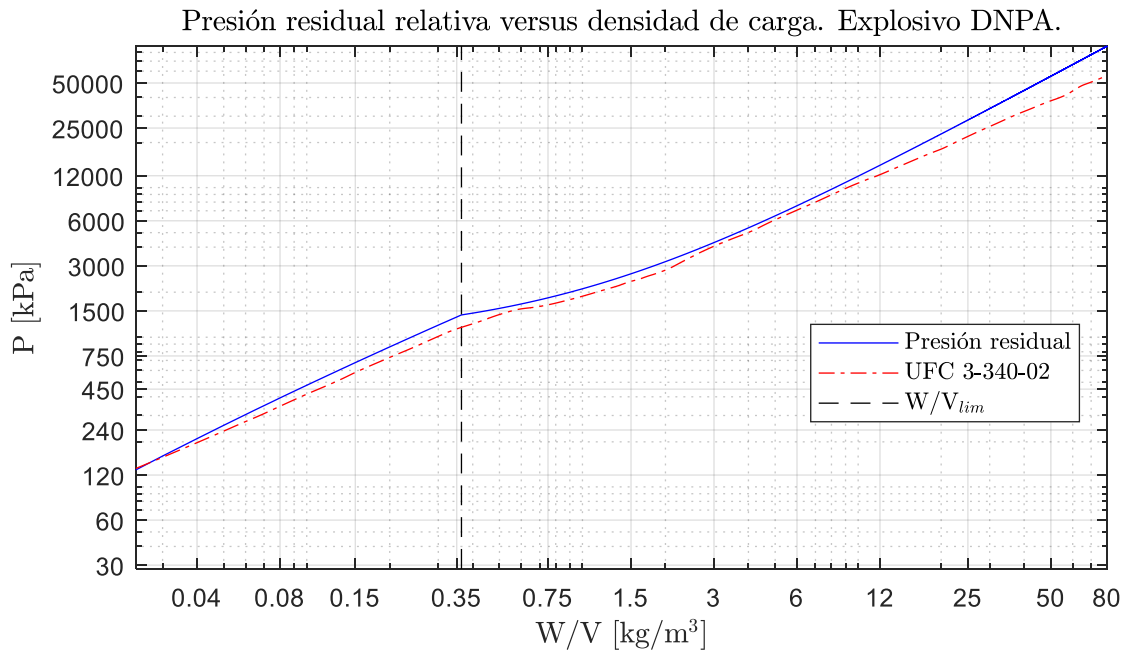


Figura 6-52: Presión residual relativa del sistema para explosivo DNPA.

A.2.14. EDNP

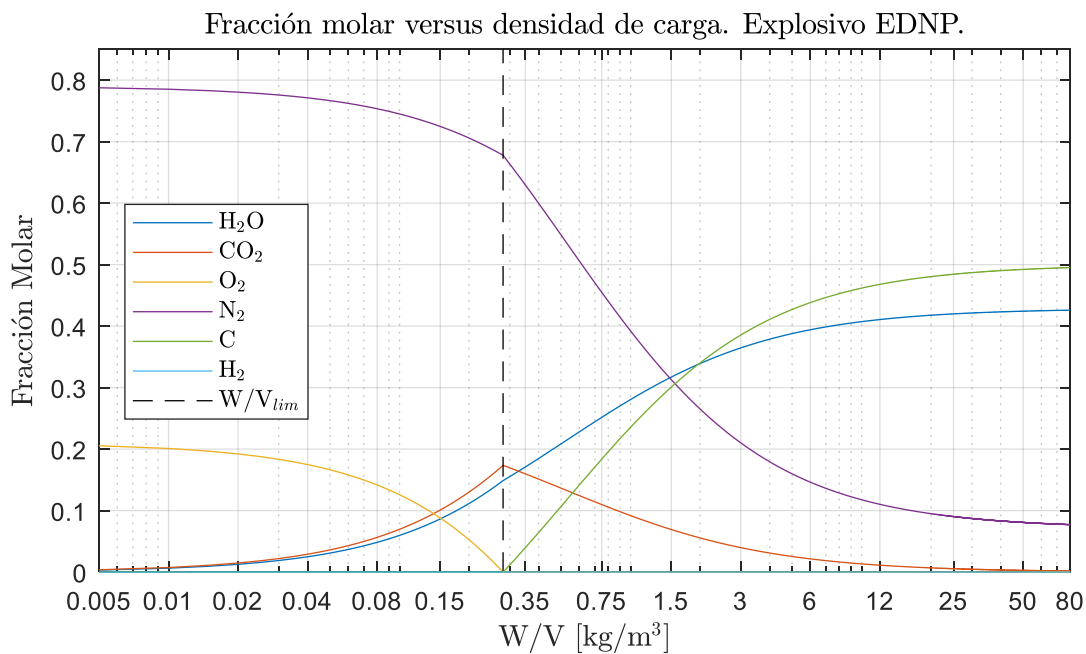


Figura 6-53: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo EDNP.

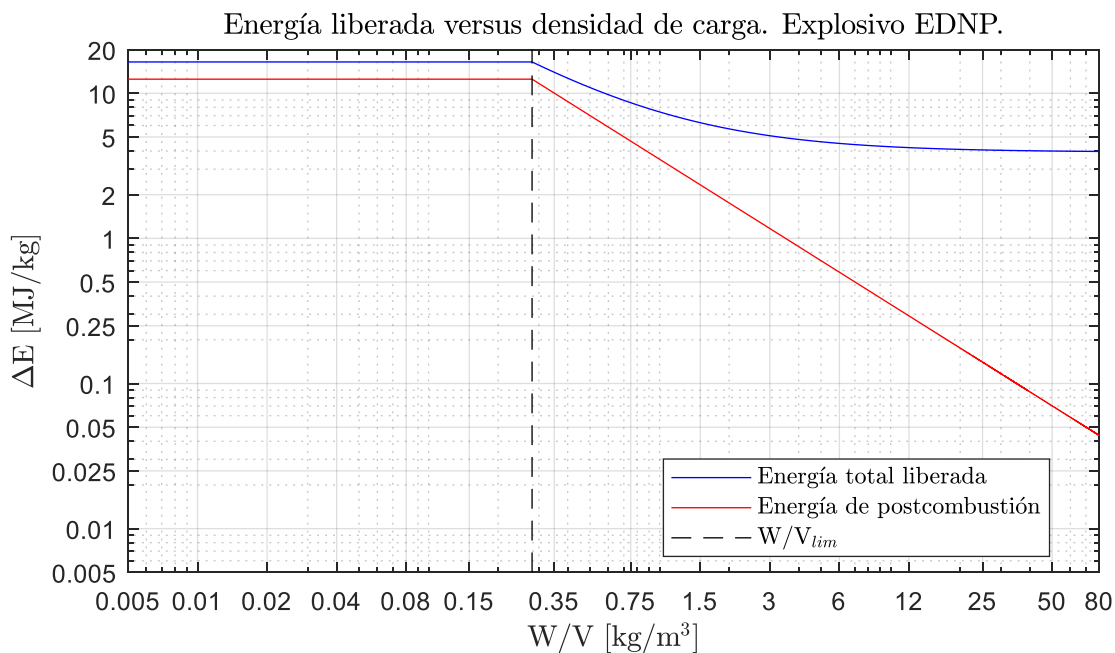


Figura 6-54: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo EDNP.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo EDNP.

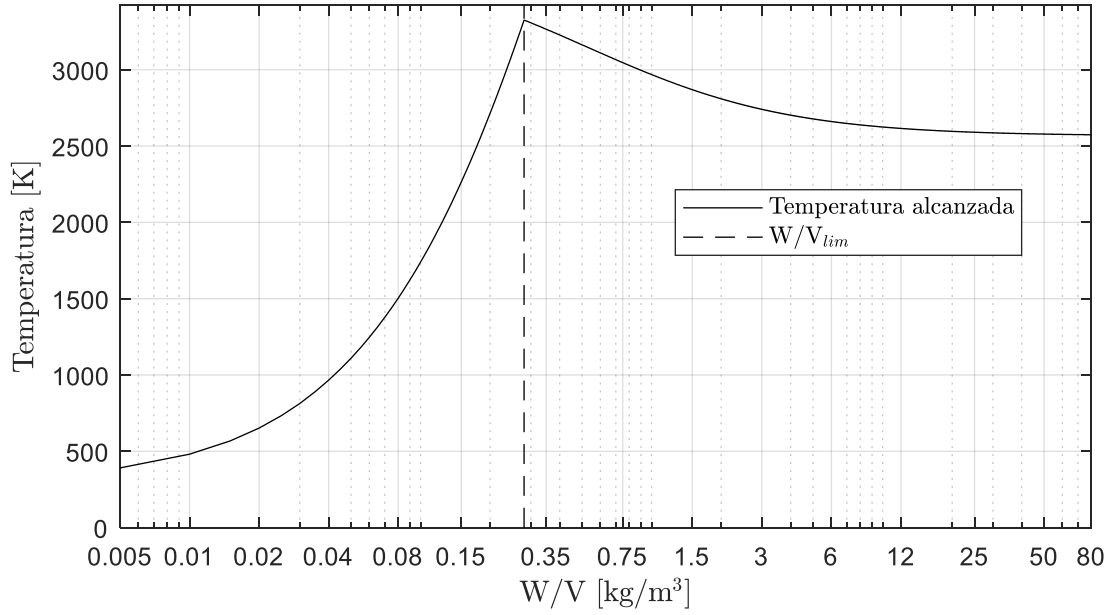


Figura 6-55: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo EDNP.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo EDNP.

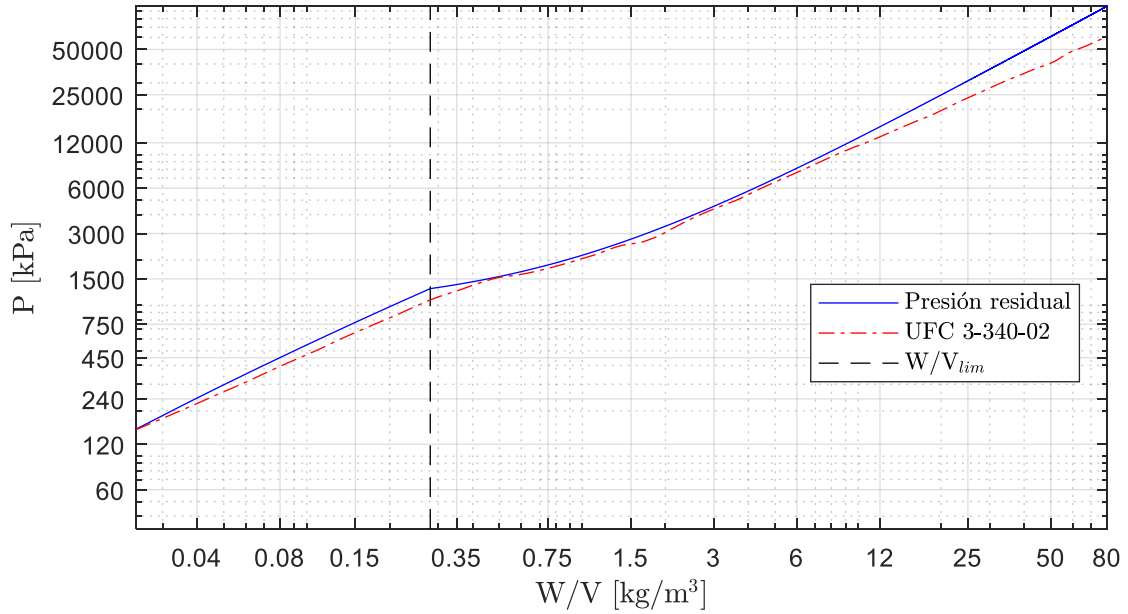


Figura 6-56: Presión residual relativa del sistema para explosivo EDNP.

A.2.15. EL-506A

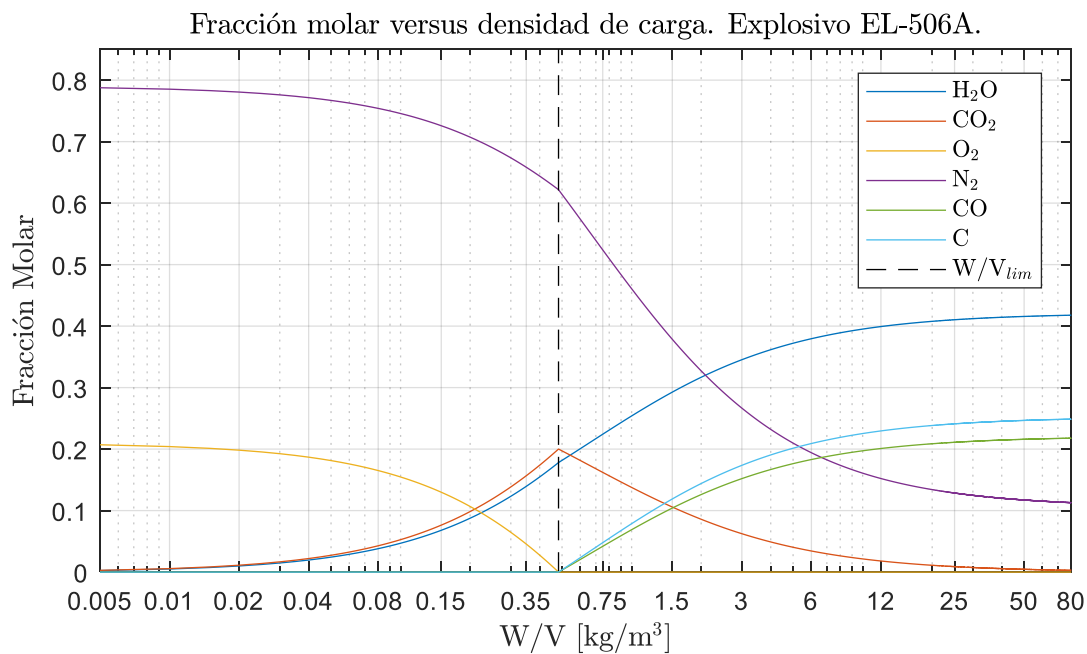


Figura 6-57: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo EL-506A.

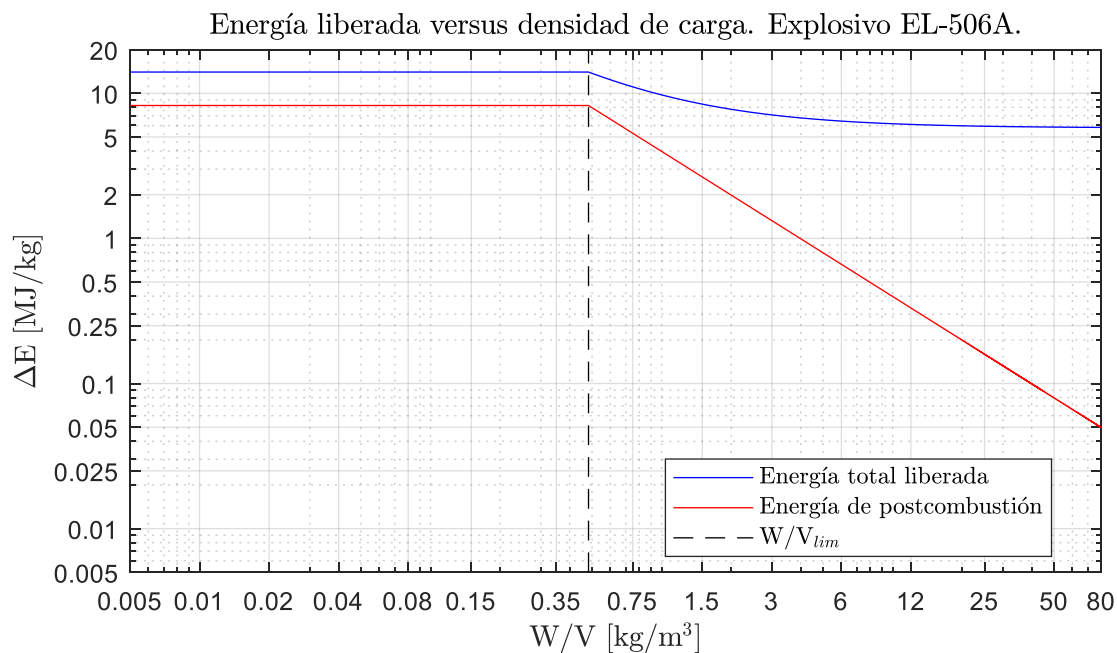


Figura 6-58: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo EL-506A.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo EL-506A.

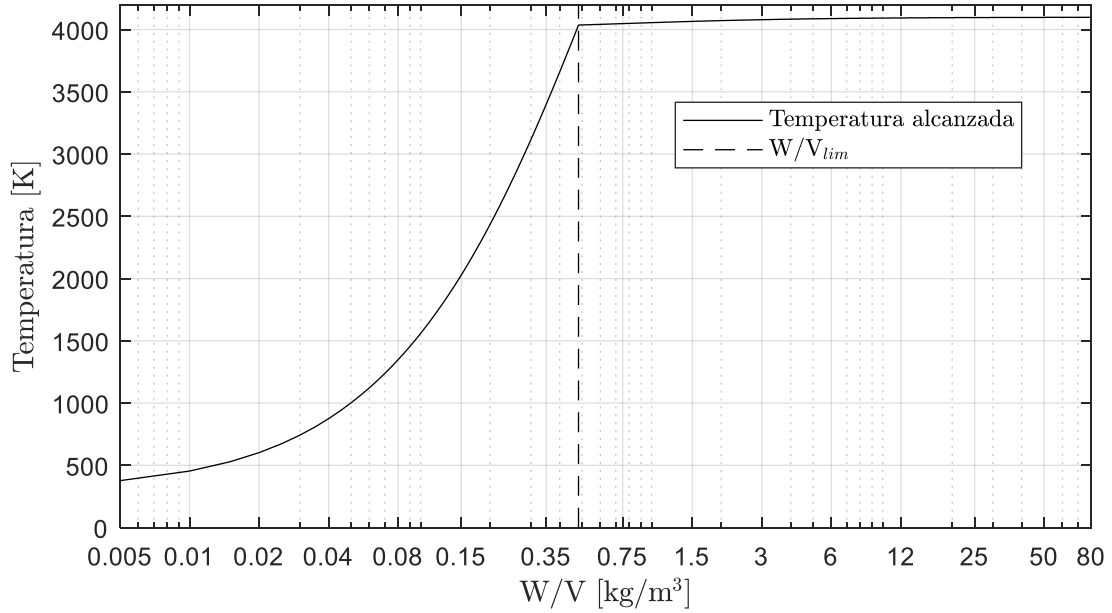


Figura 6-59: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo EL-506A.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo EL-506A.

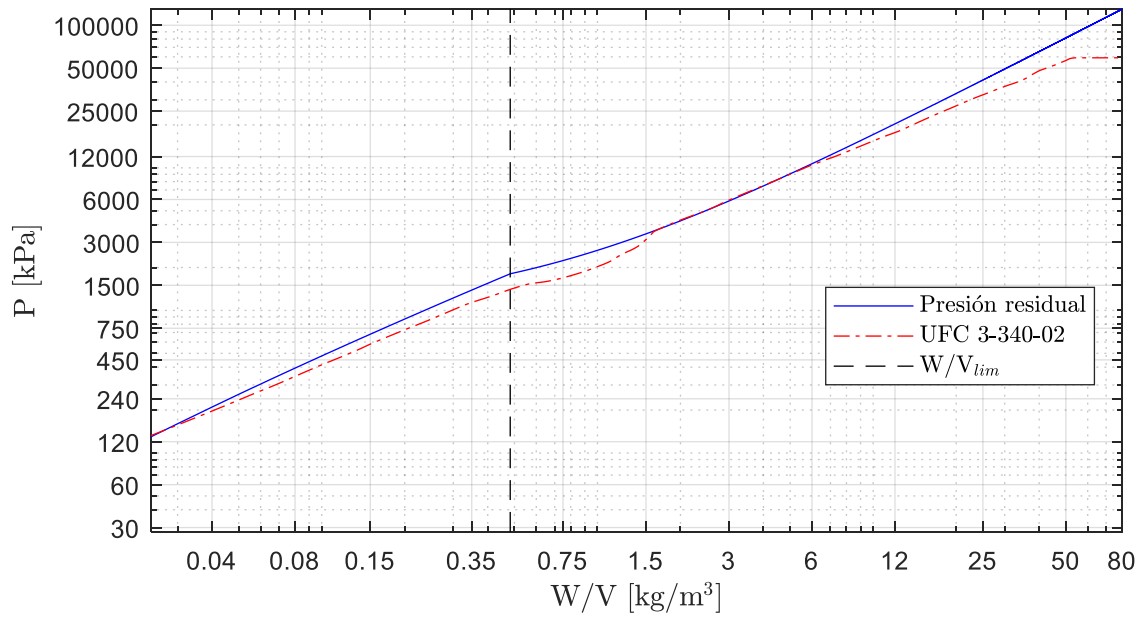


Figura 6-60: Presión residual relativa del sistema para explosivo EL-506A.

A.2.16. EL-506C

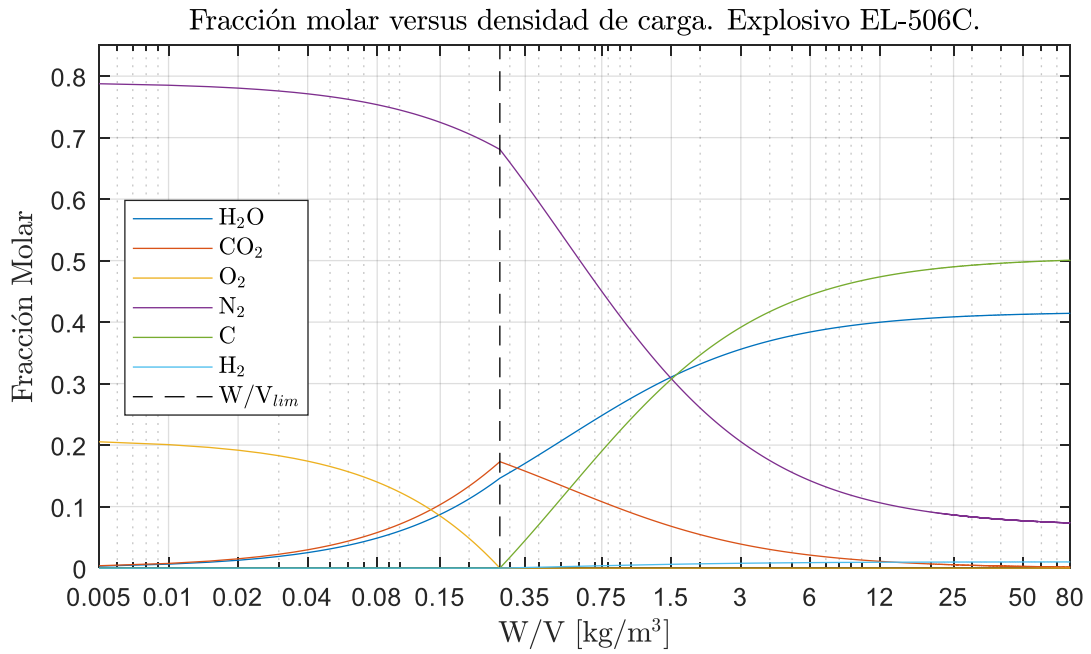


Figura 6-61: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo EL-506C.

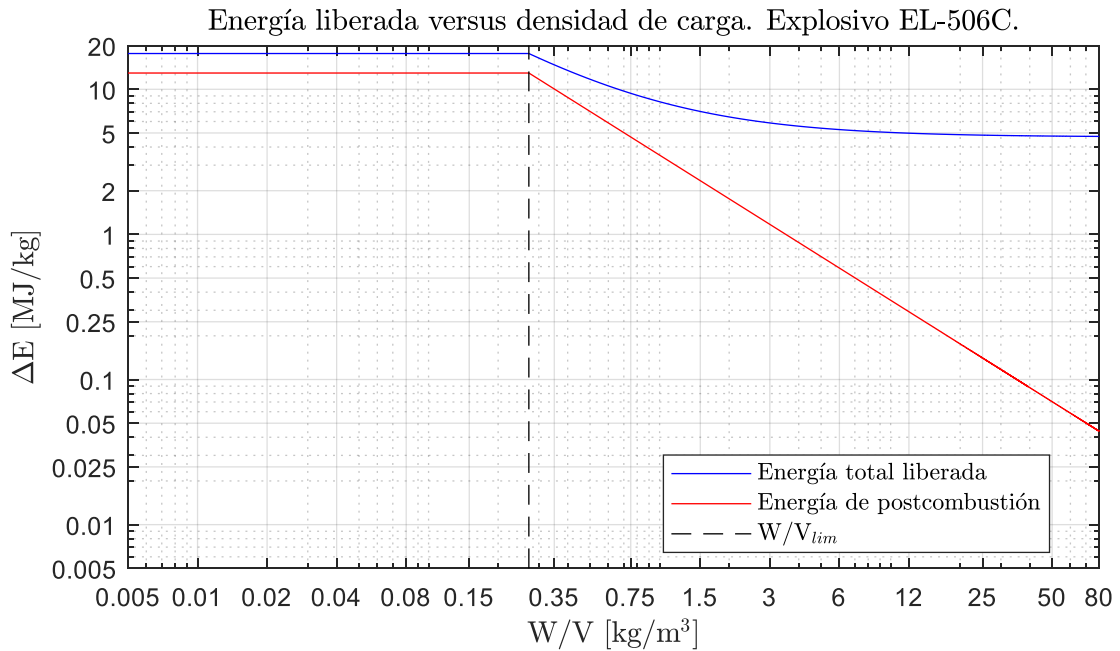


Figura 6-62: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo EL-506C.



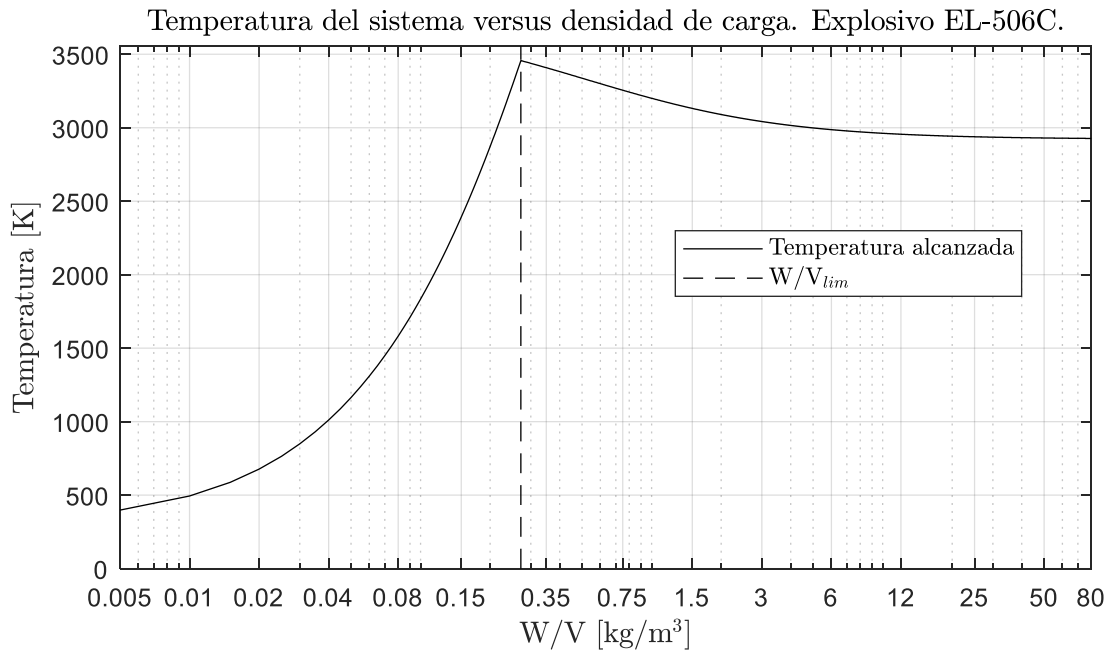


Figura 6-63: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo EL-506C.

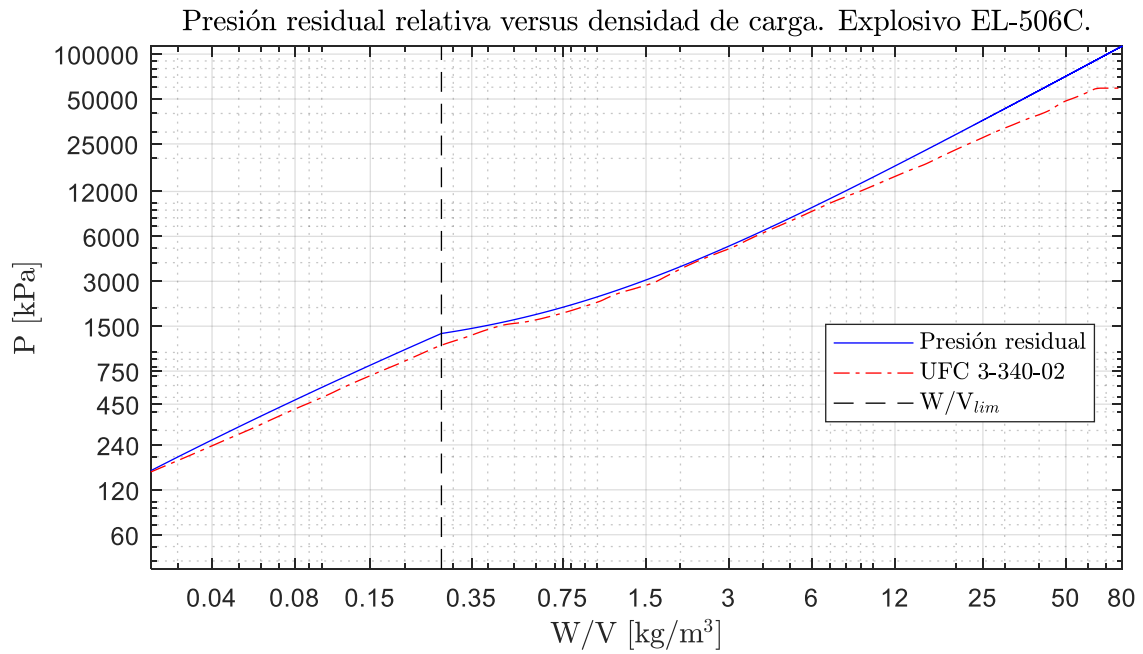


Figura 6-64: Presión residual relativa del sistema para explosivo EL-506C.

A.2.17. FEFO

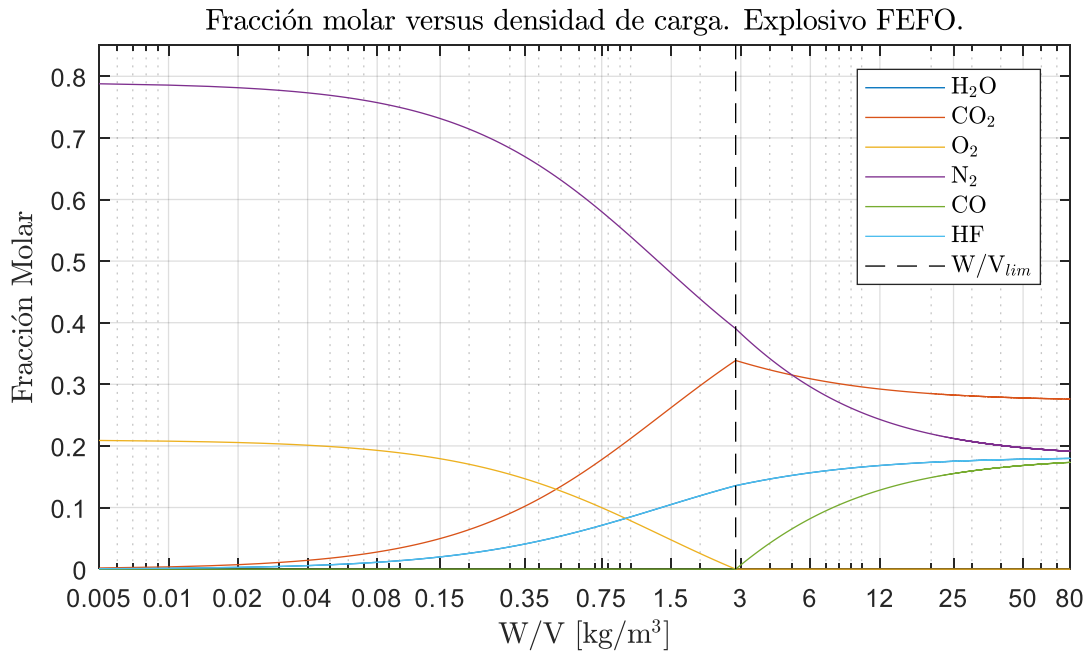


Figura 6-65: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo FEFO.

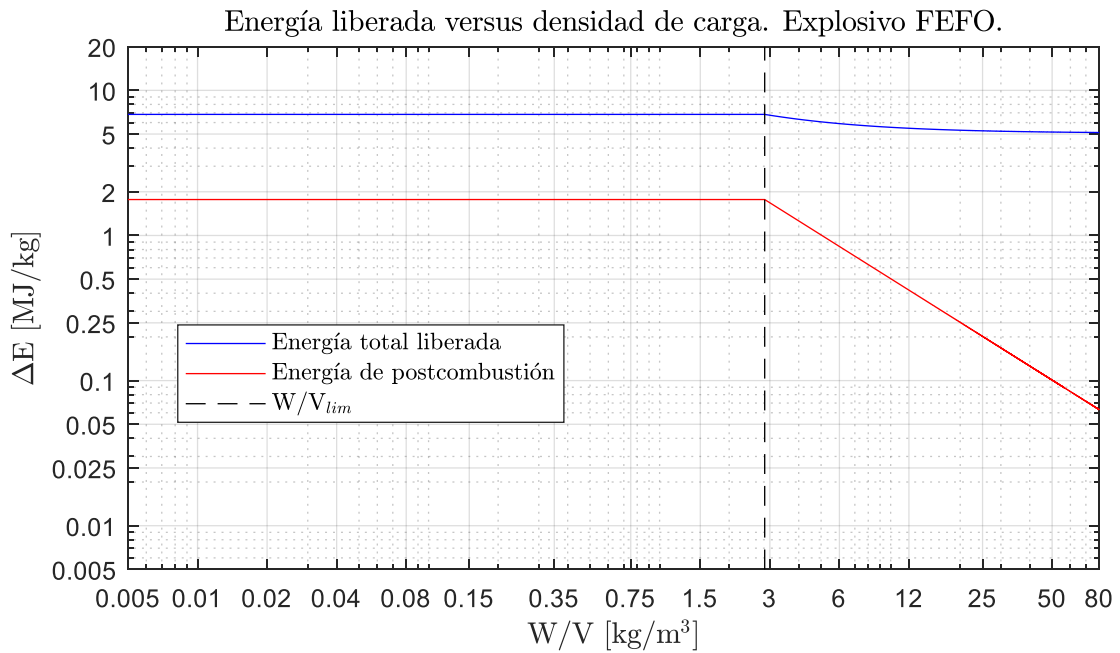


Figura 6-66: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo FEFO.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo FEFO.

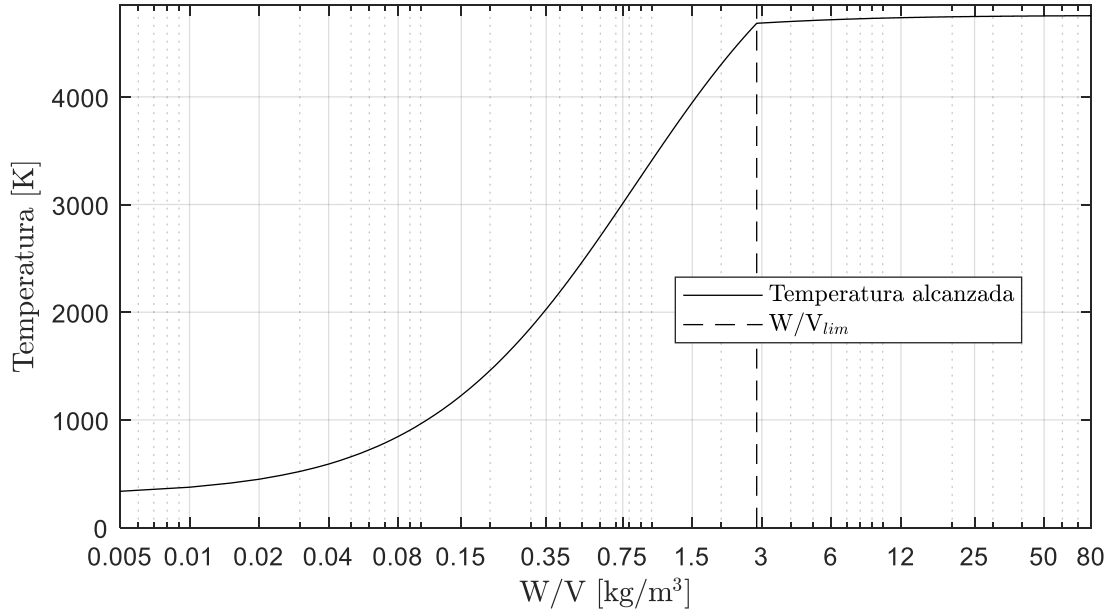


Figura 6-67: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo FEFO.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo FEFO.

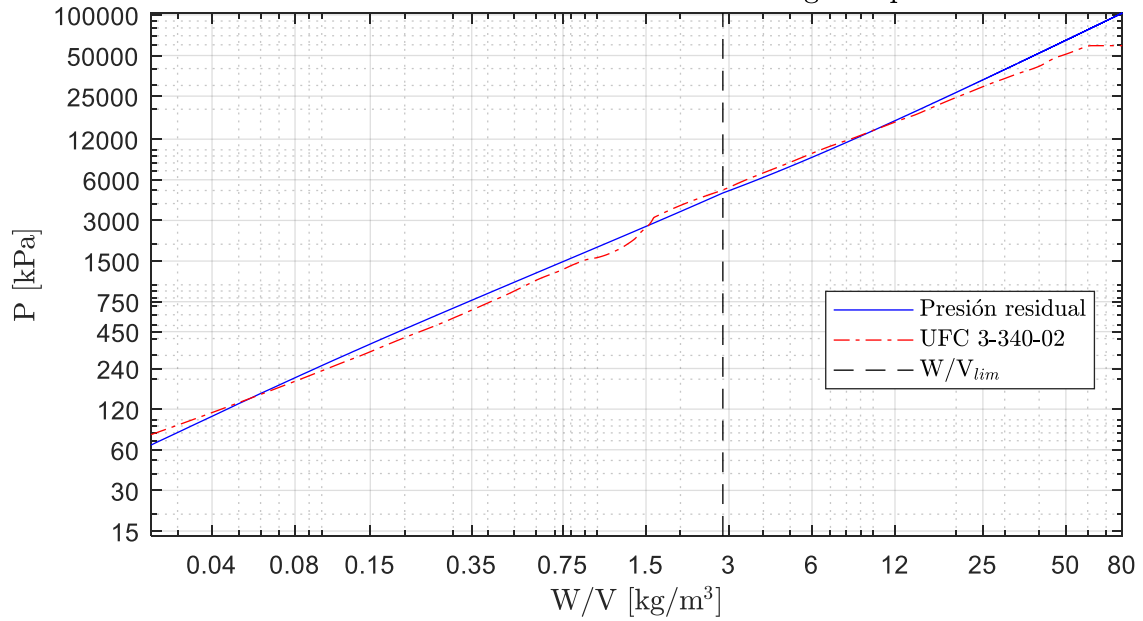


Figura 6-68: Presión residual relativa del sistema para explosivo FEFO.

A.2.18. HMX

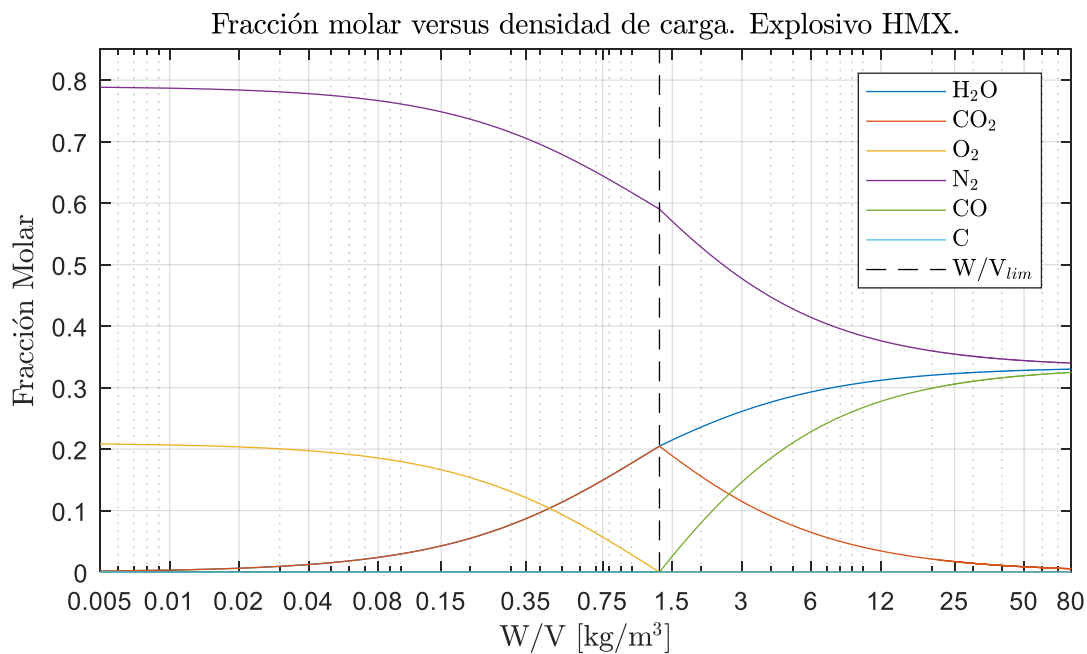


Figura 6-69: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo HMX.

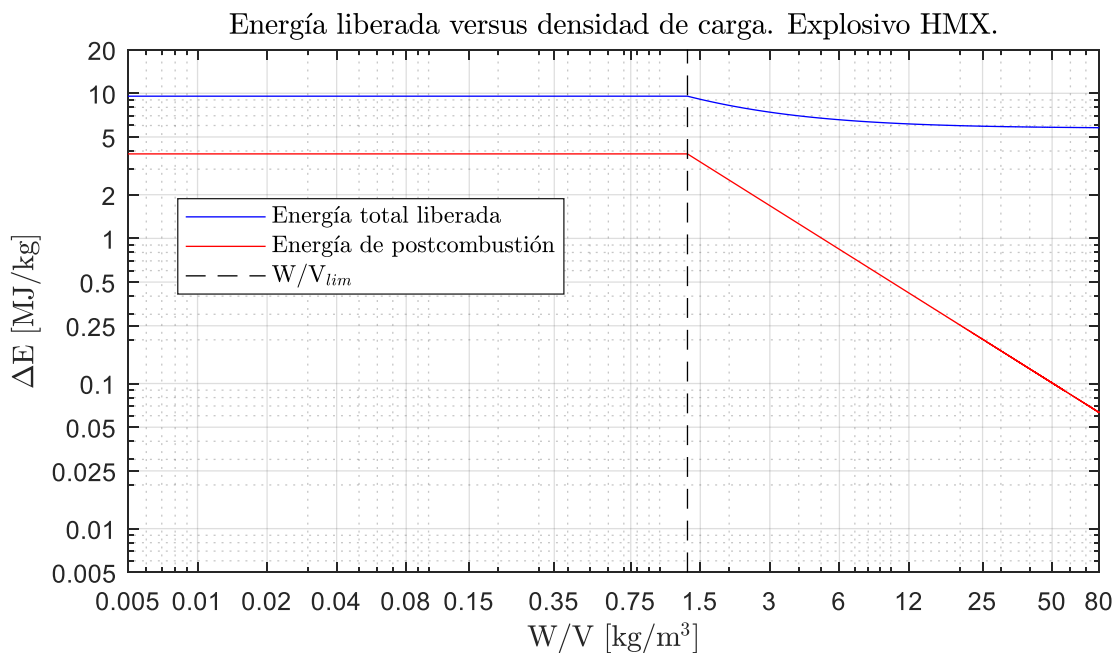


Figura 6-70: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo HMX.

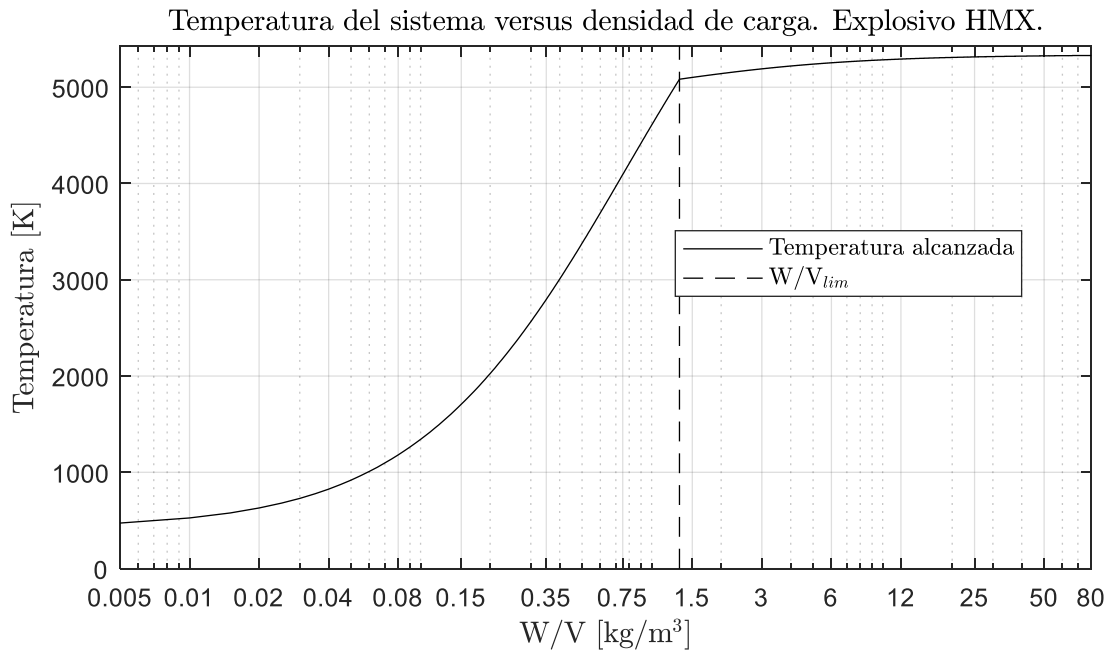


Figura 6-71: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo HMX.

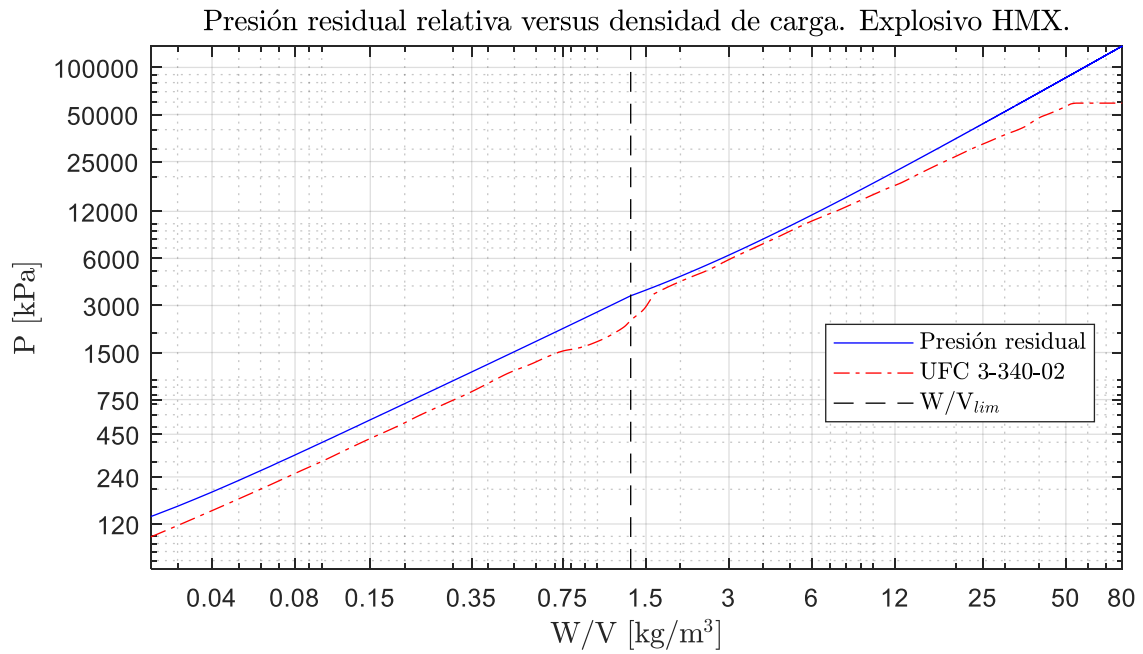


Figura 6-72: Presión residual relativa del sistema para explosivo HMX.

A.2.19. HNAB

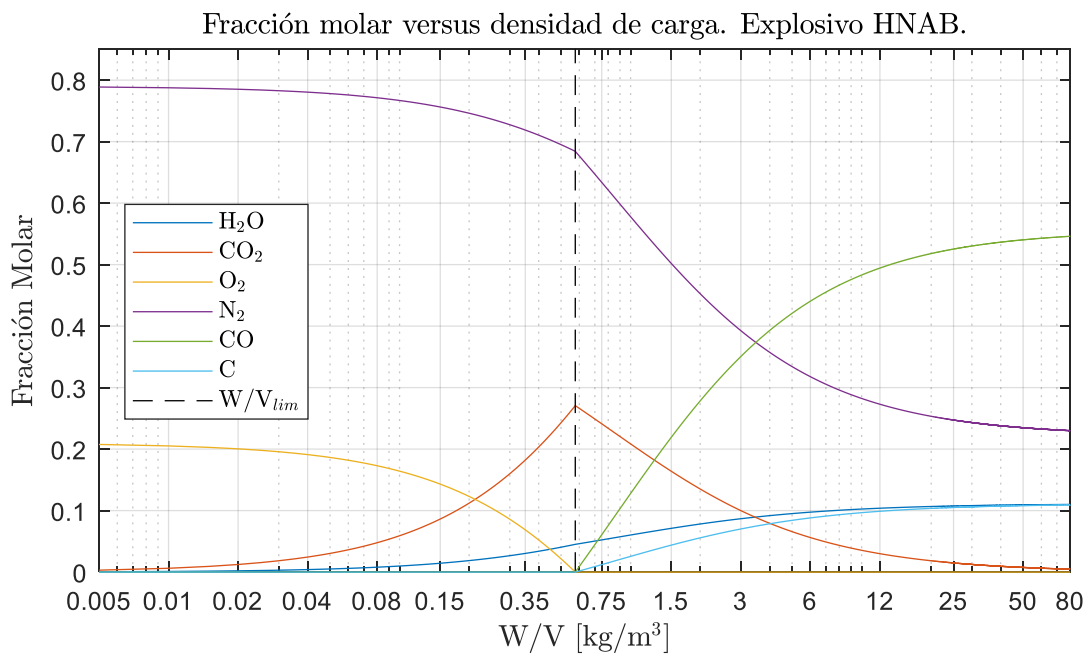


Figura 6-73: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo HNAB.

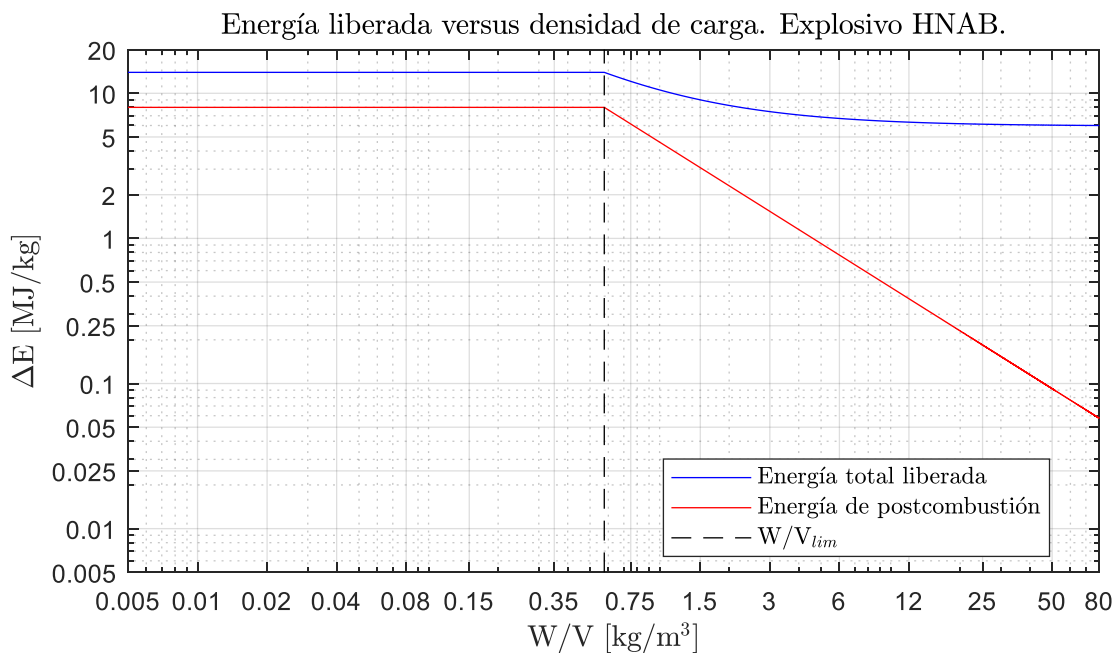


Figura 6-74: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo HNAB.

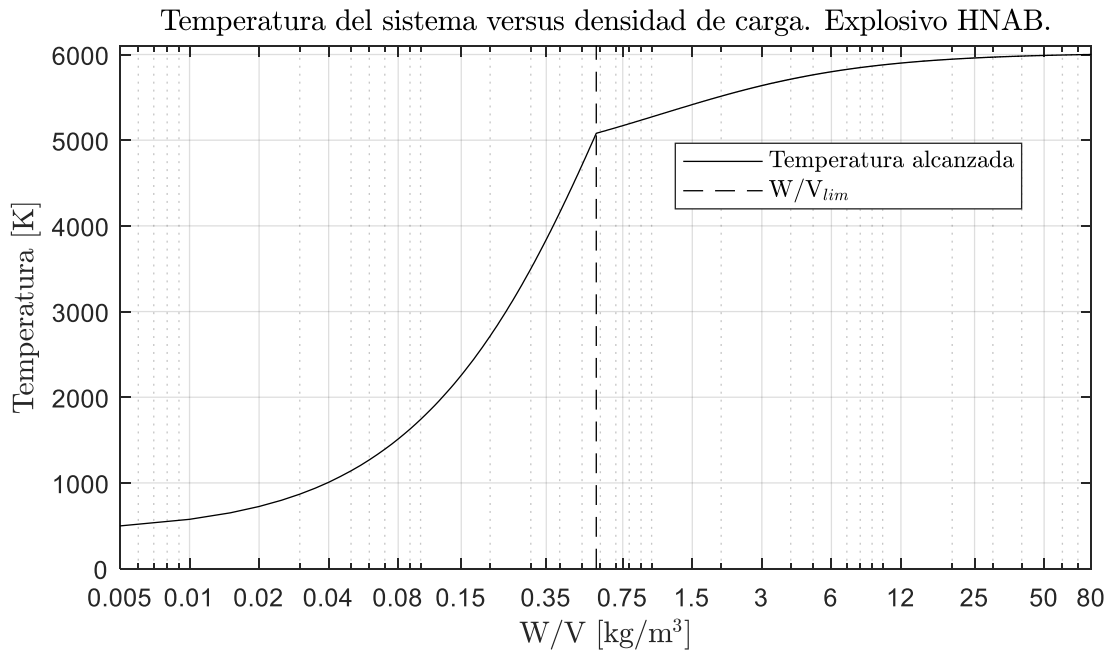


Figura 6-75: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo HNAB.

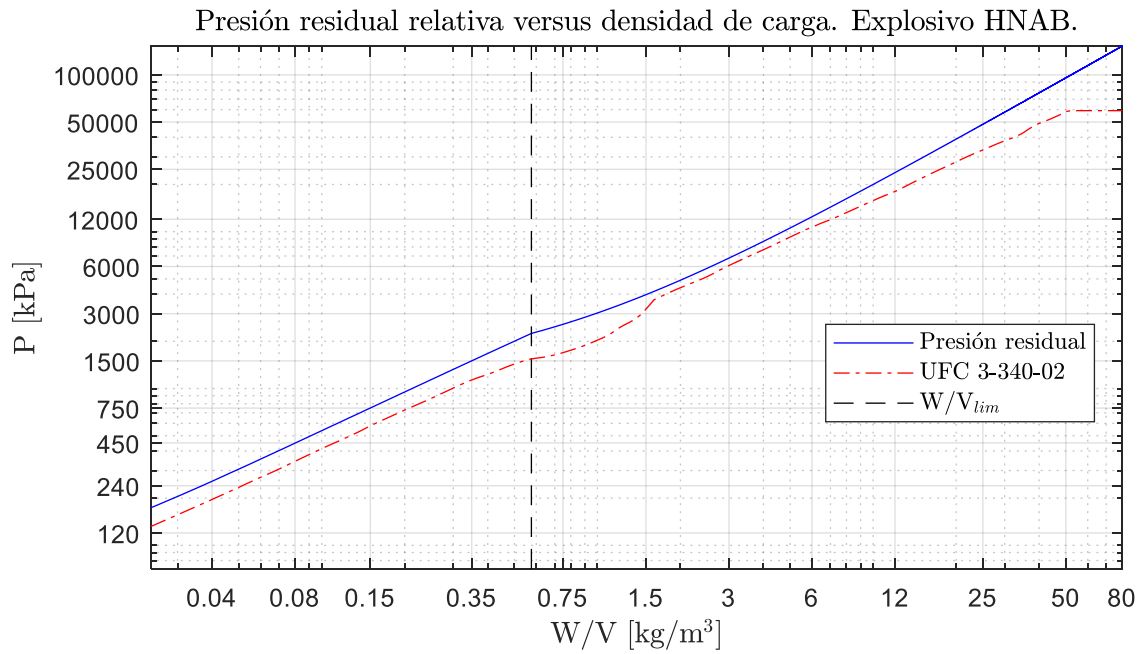


Figura 6-76: Presión residual relativa del sistema para explosivo HNAB.

A.2.20. HNS

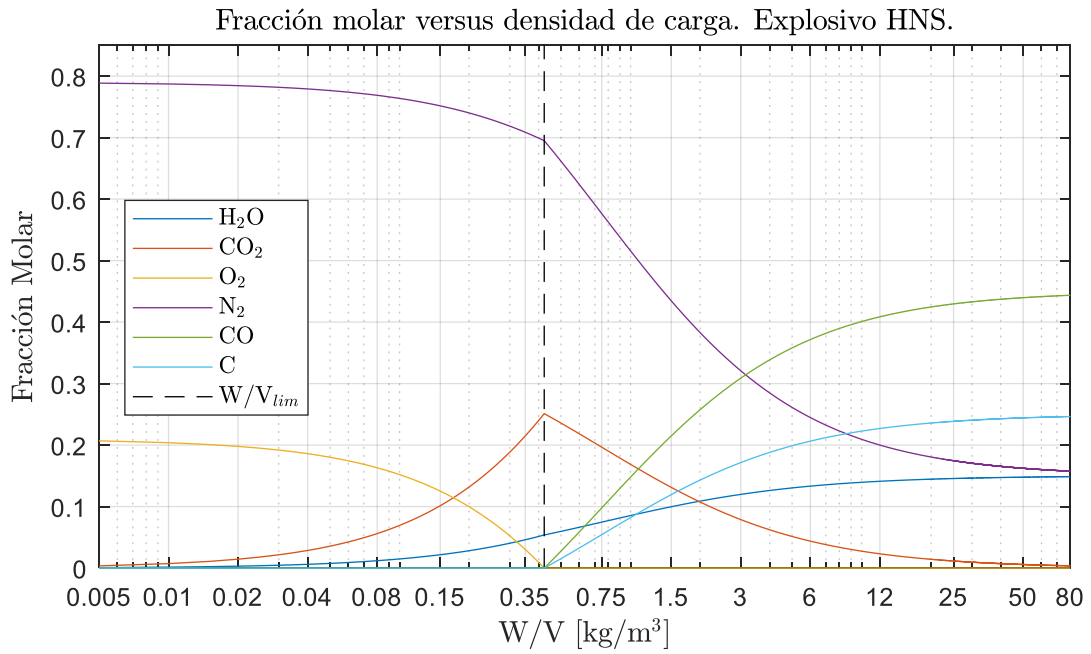


Figura 6-77: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo HNS.

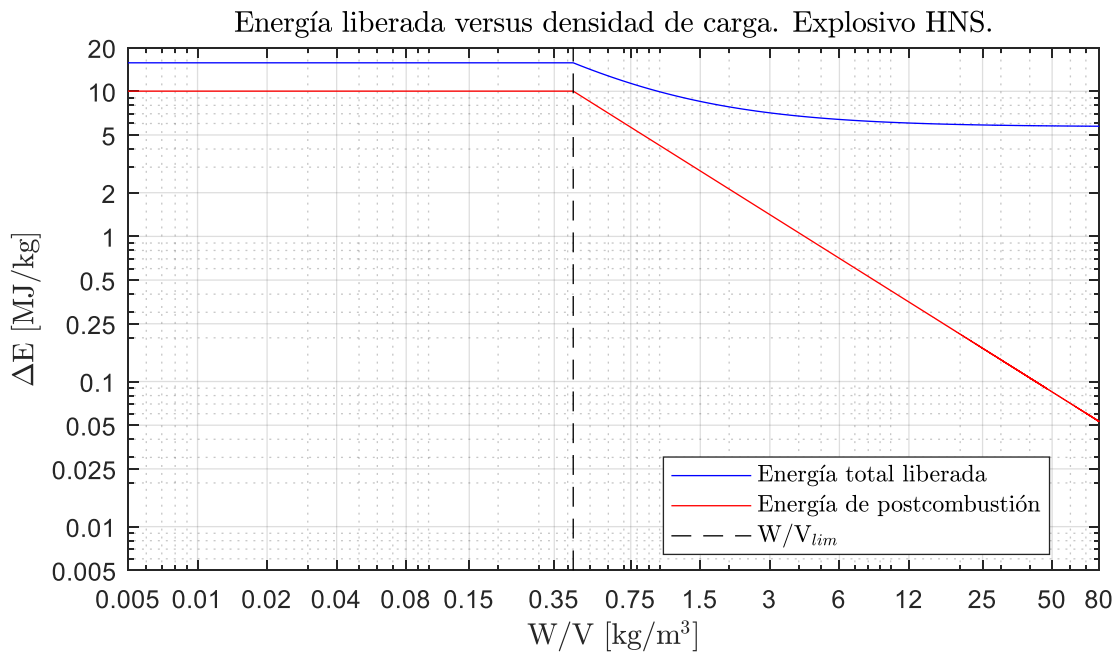


Figura 6-78: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo HNS.



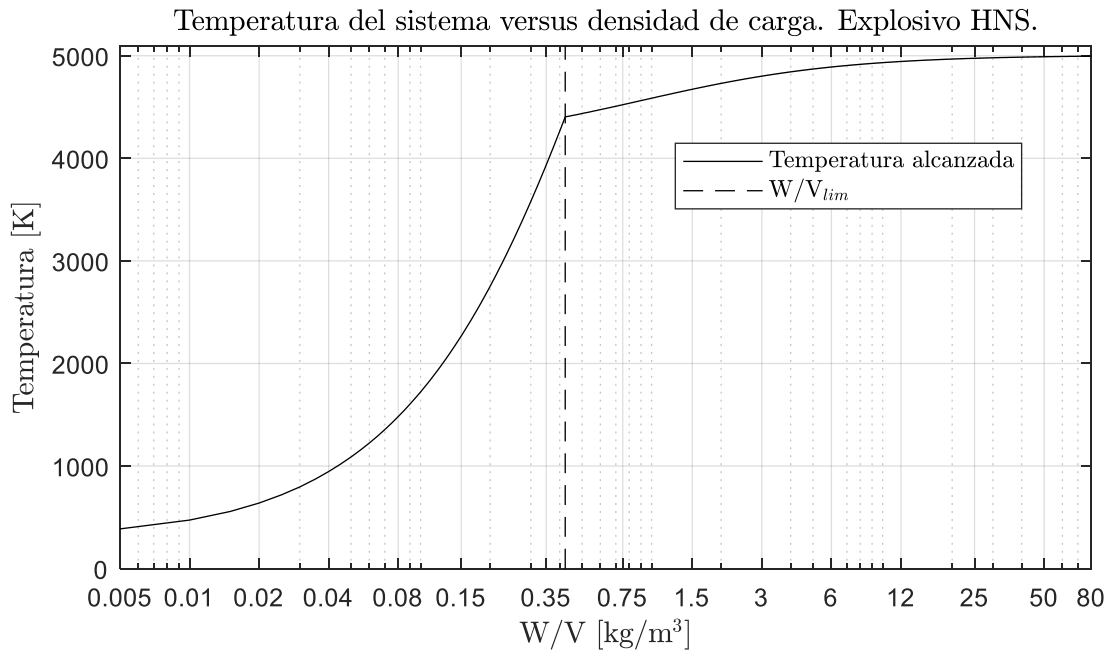


Figura 6-79: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo HNS.

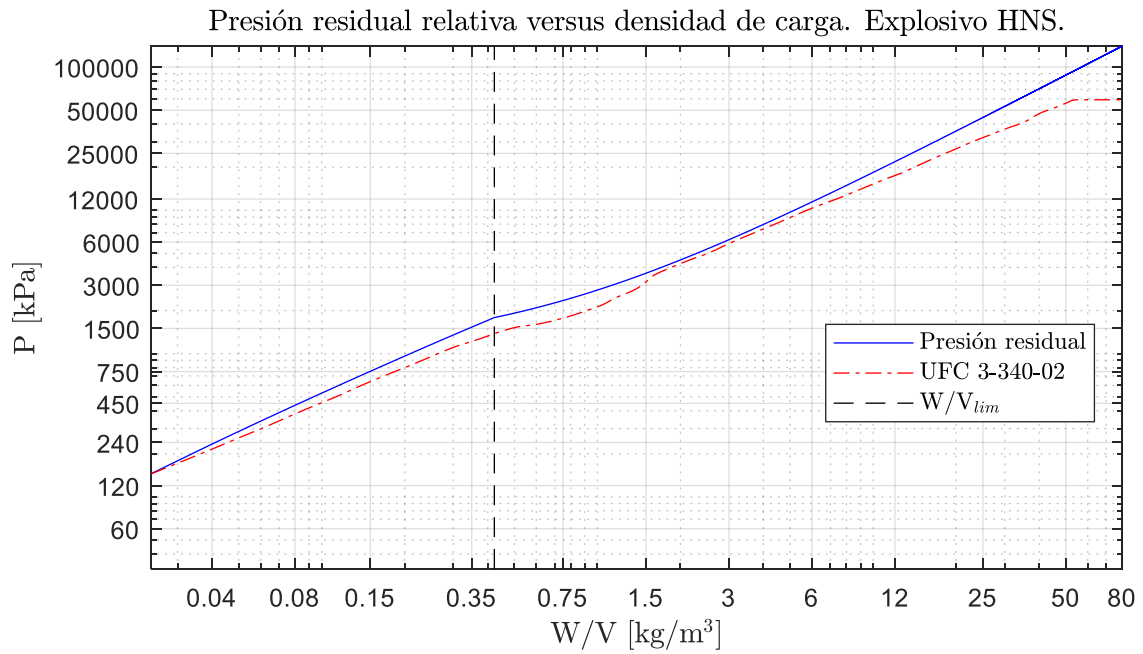


Figura 6-80: Presión residual relativa del sistema para explosivo HNS.

A.2.21. LX-01-0

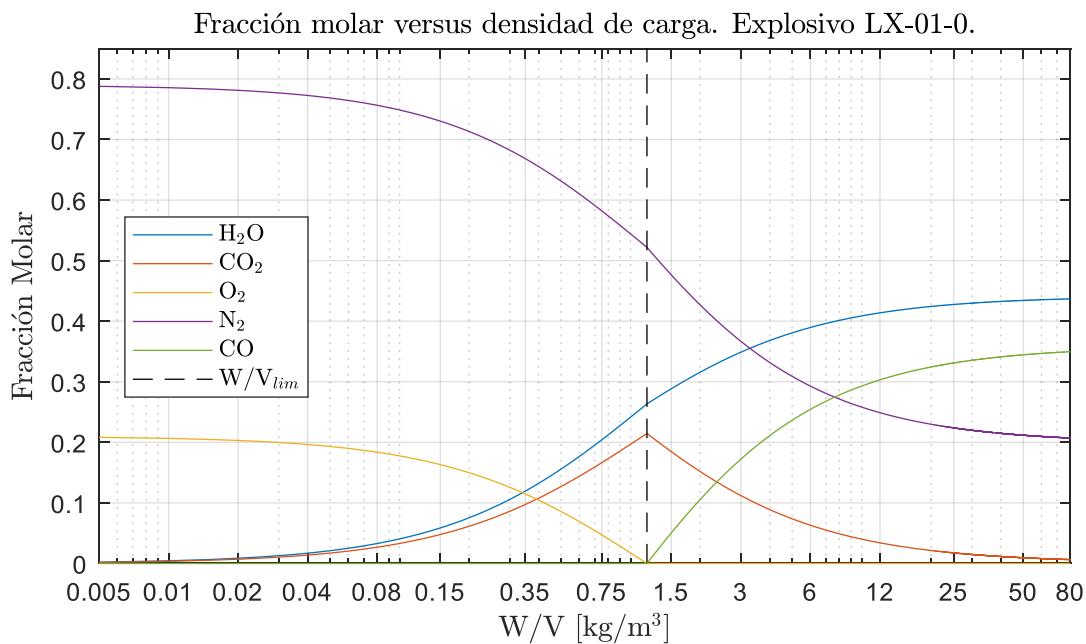


Figura 6-81: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-01-0.

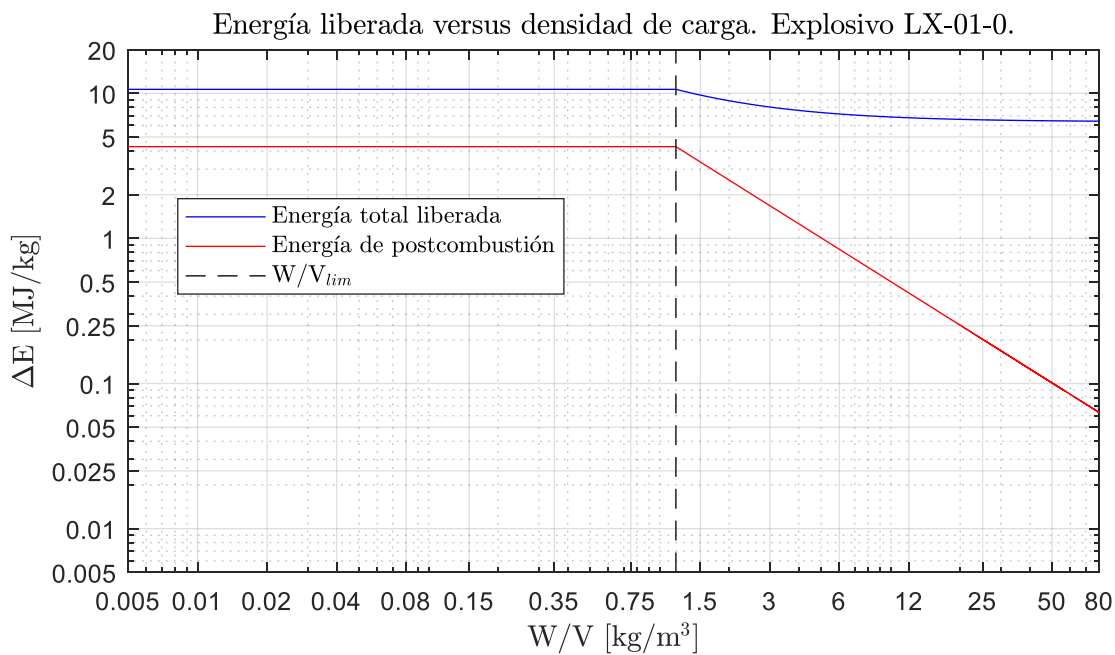


Figura 6-82: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-01-0.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-01-0.

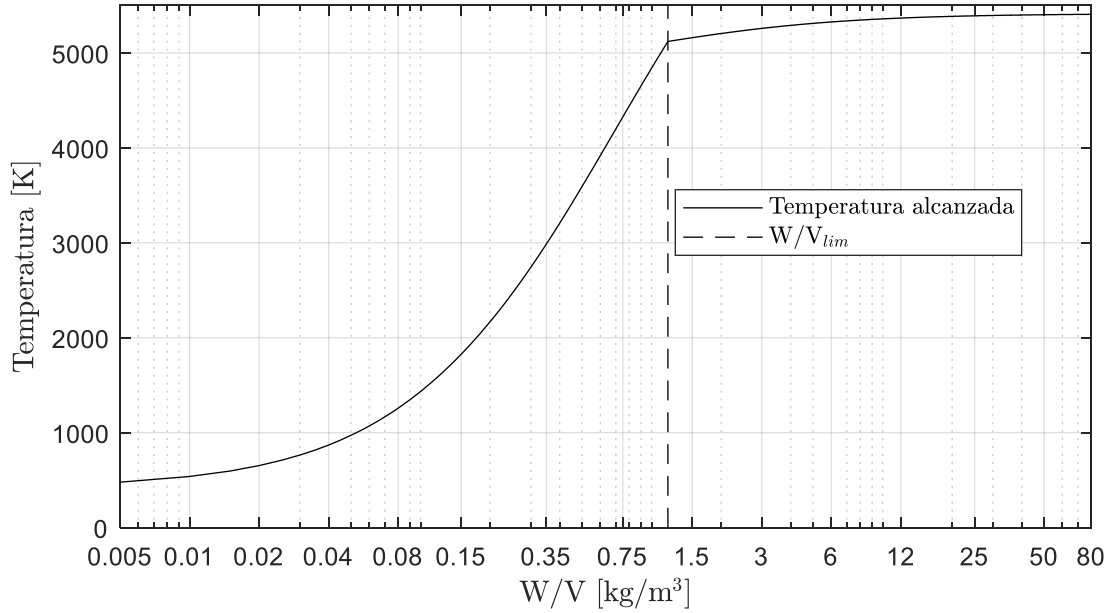


Figura 6-83: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-01-0.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-01-0.

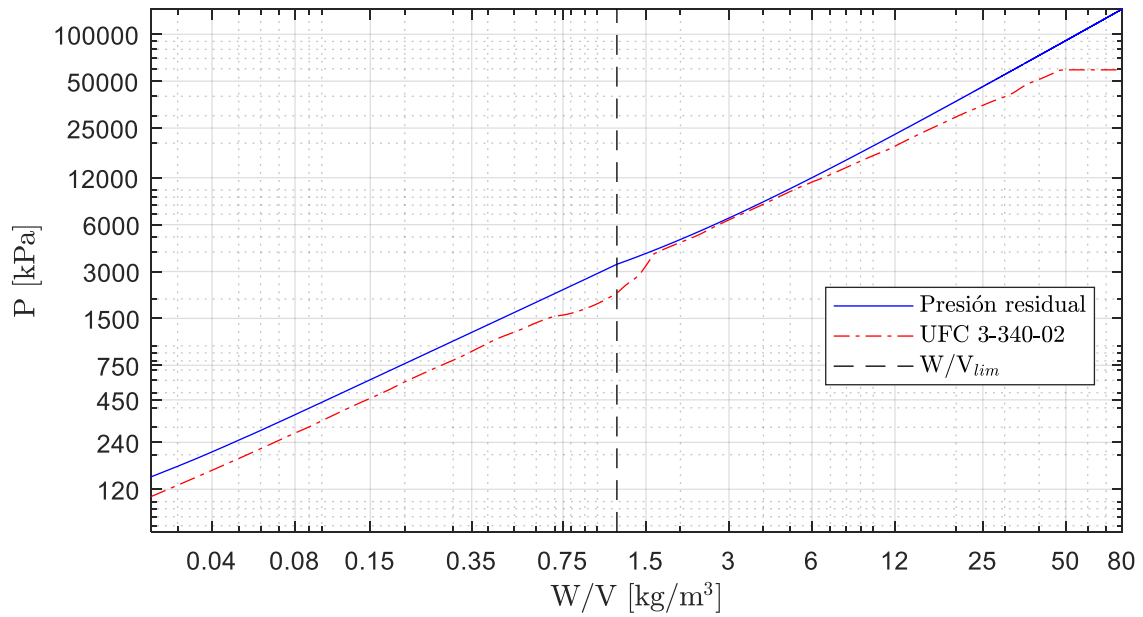


Figura 6-84: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-01-0.

A.2.22. LX-04-1

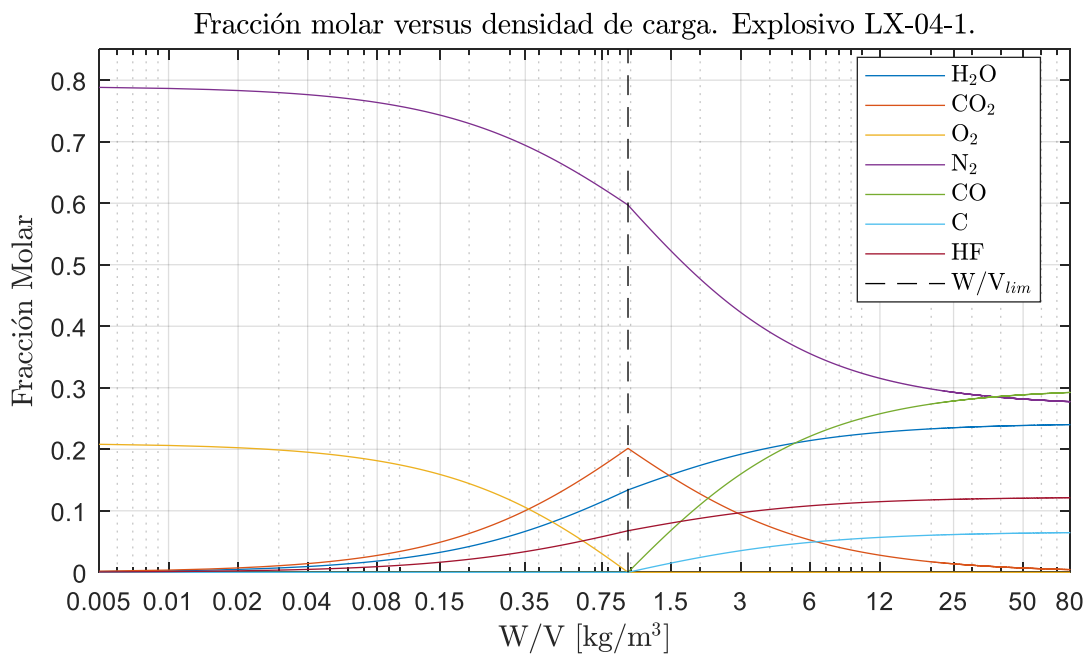


Figura 6-85: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-04-1.

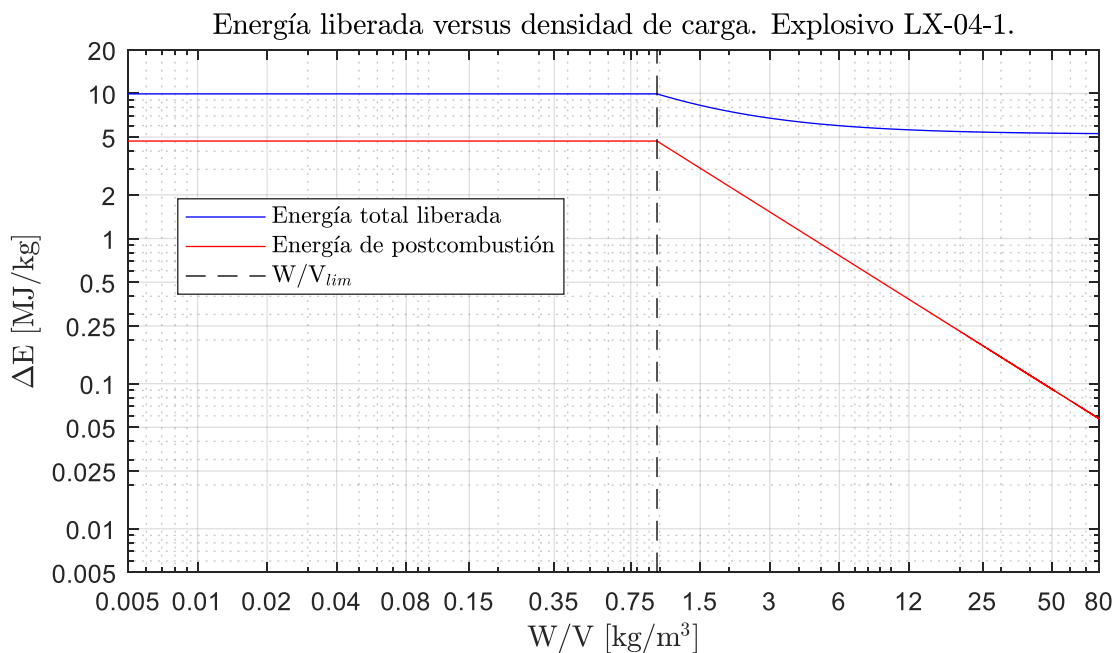


Figura 6-86: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-04-1

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-04-1.

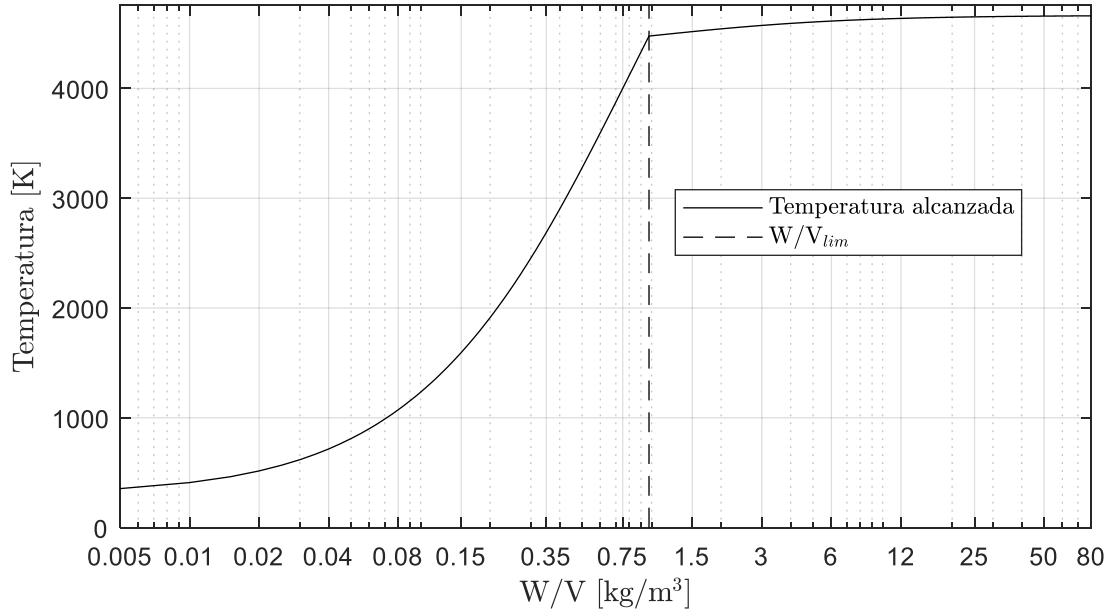


Figura 6-87: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-04-1.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-04-1.

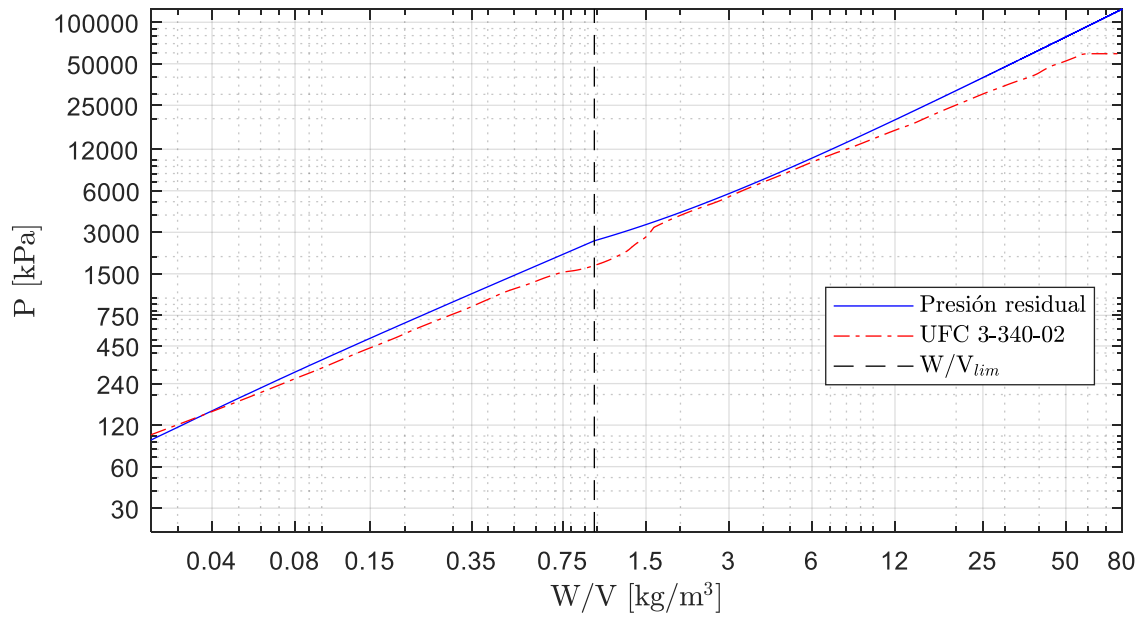


Figura 6-88: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-04-1.

A.2.23. LX-07-2

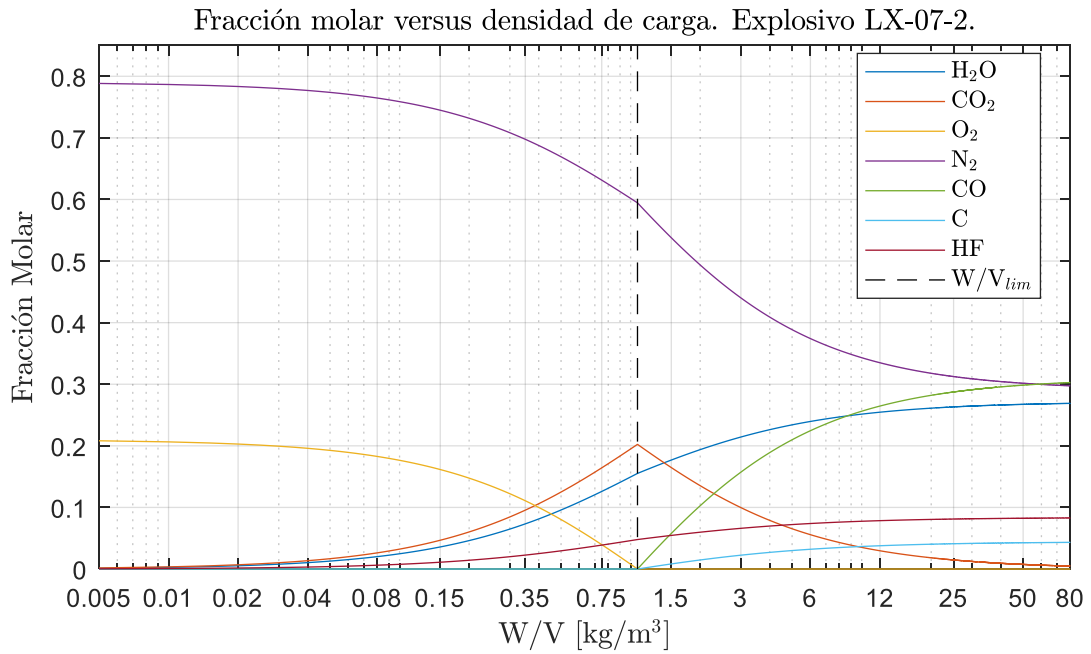


Figura 6-89: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-07-2.

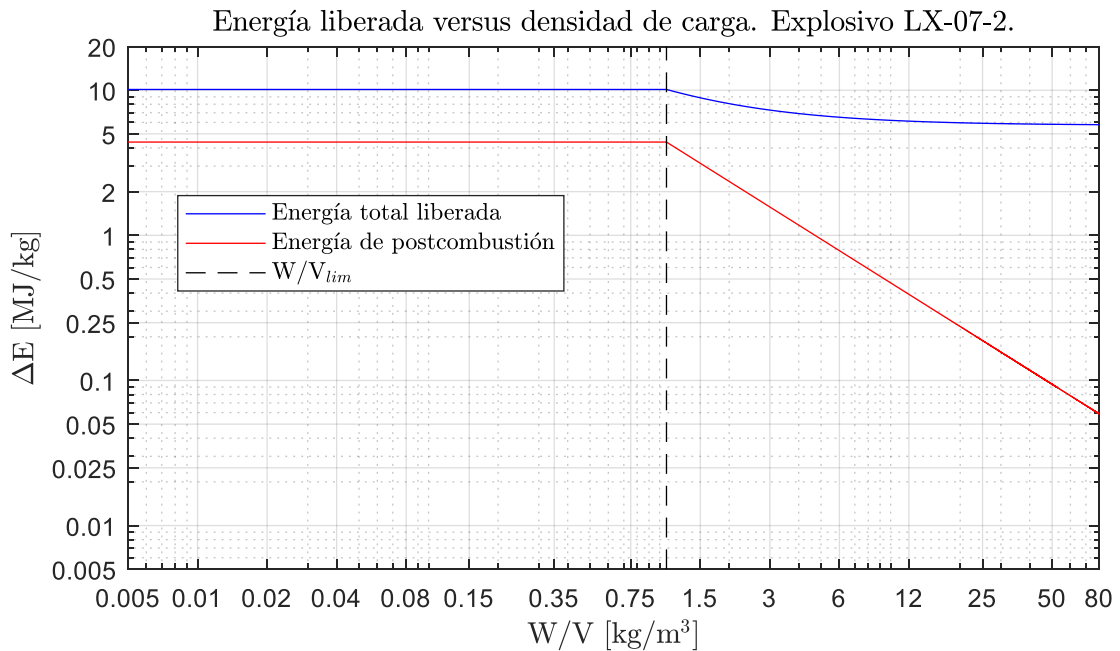


Figura 6-90: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-07-2.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-07-2.

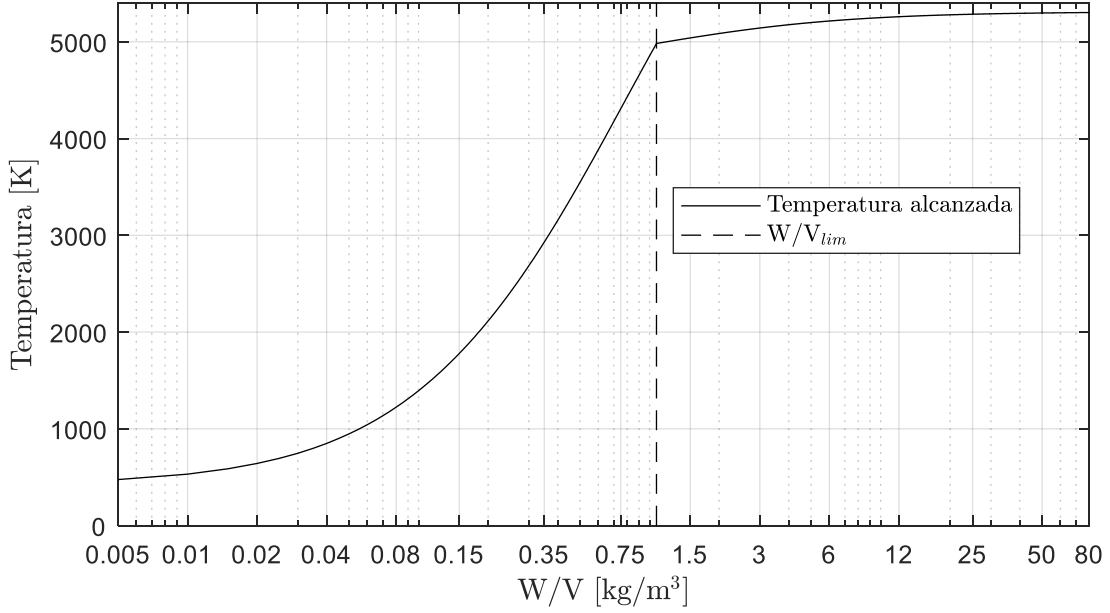


Figura 6-91: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-07-2.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-07-2.

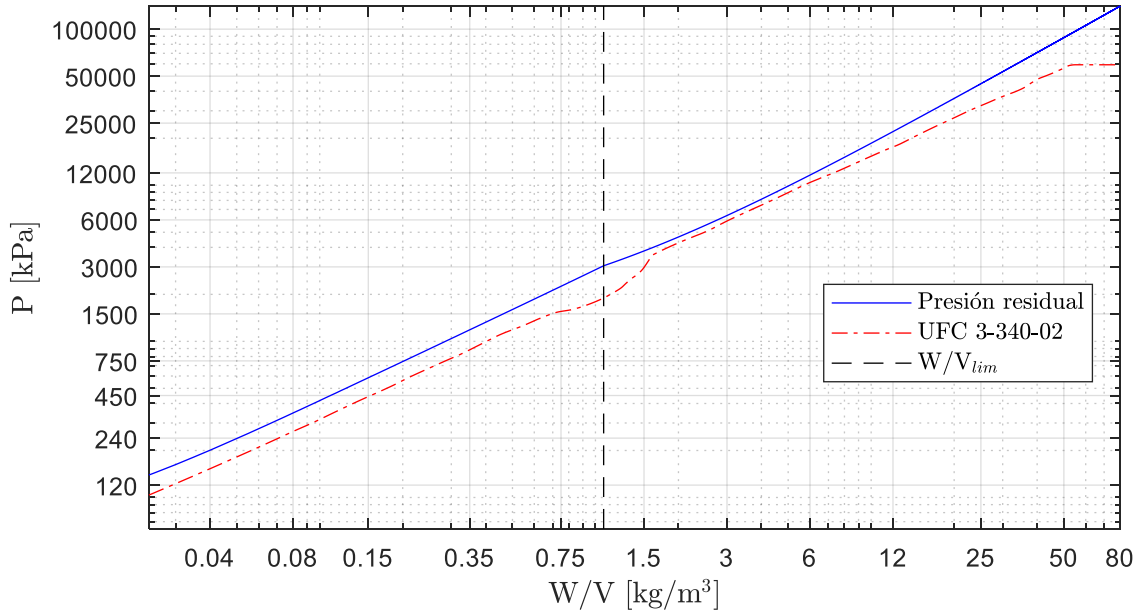


Figura 6-92: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-07-2.

A.2.24. LX-09-0

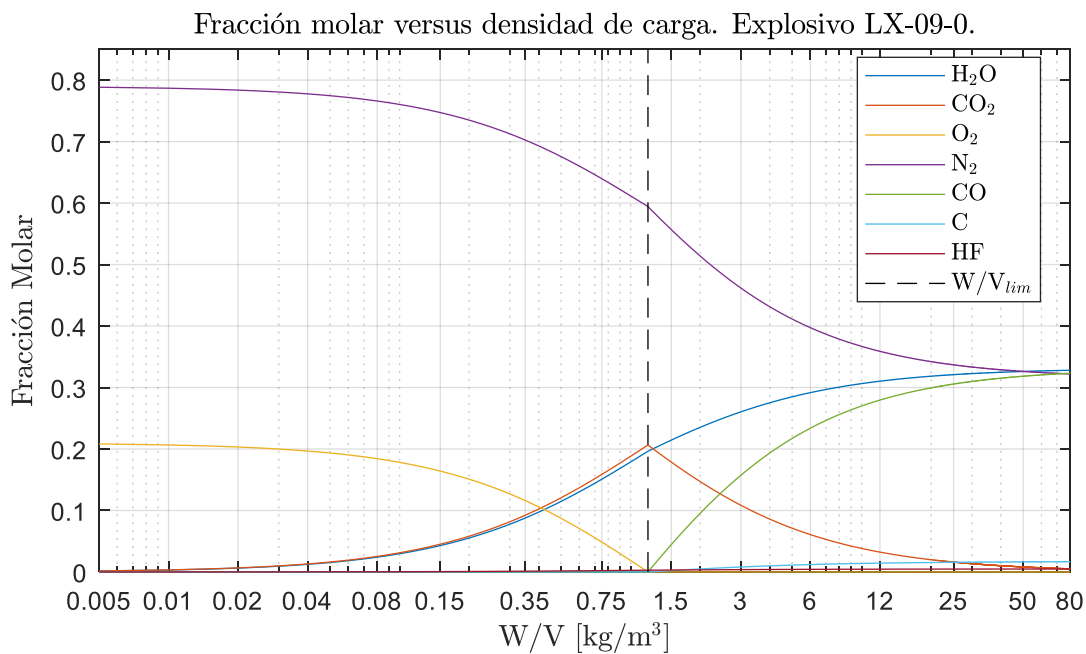


Figura 6-93: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-09-0

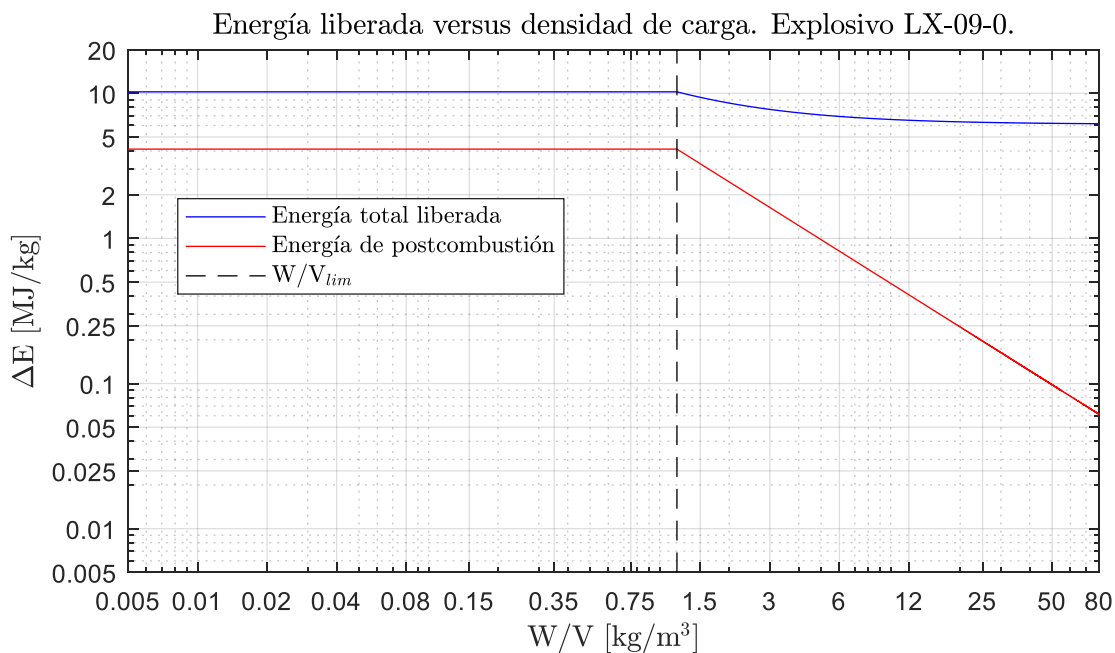


Figura 6-94: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-09-0.



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-09-0.

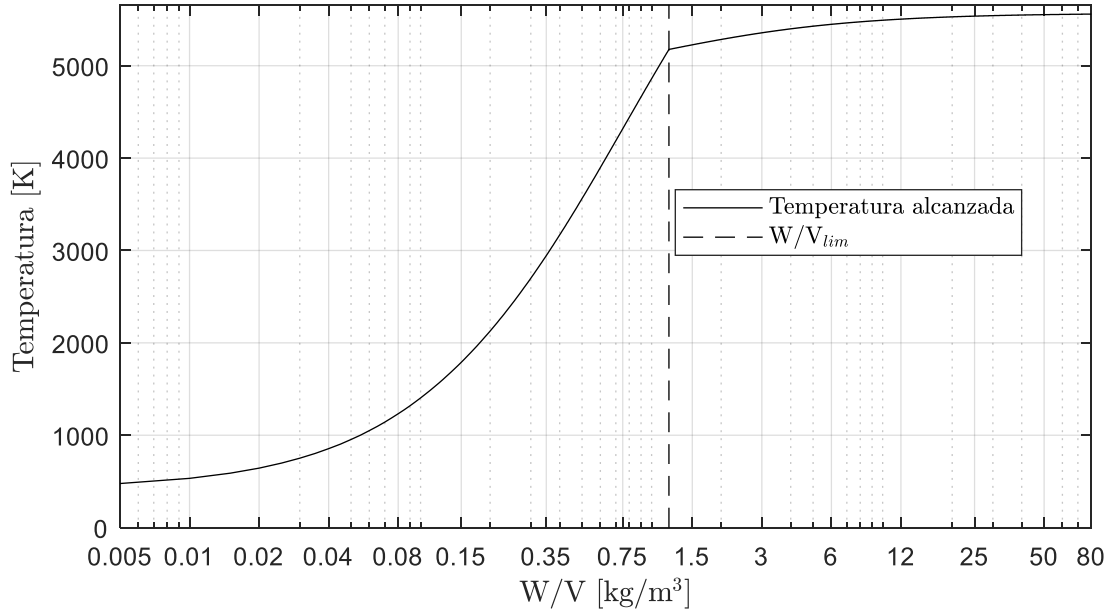


Figura 6-95: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-09-0.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-09-0.

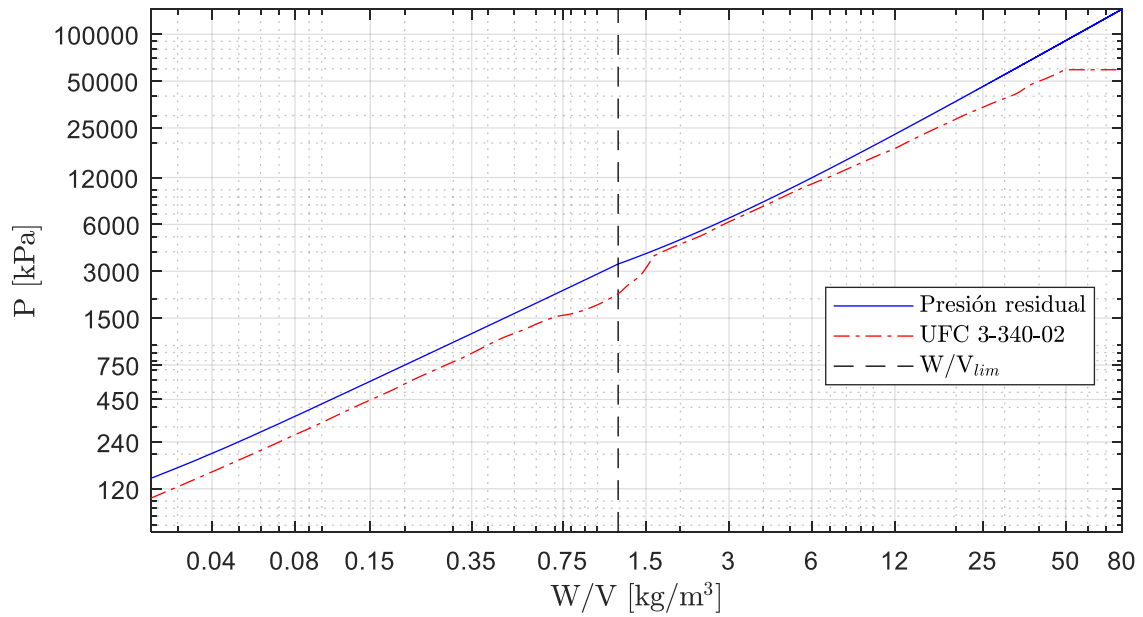


Figura 6-96: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-09-0.

A.2.25. LX-09-1

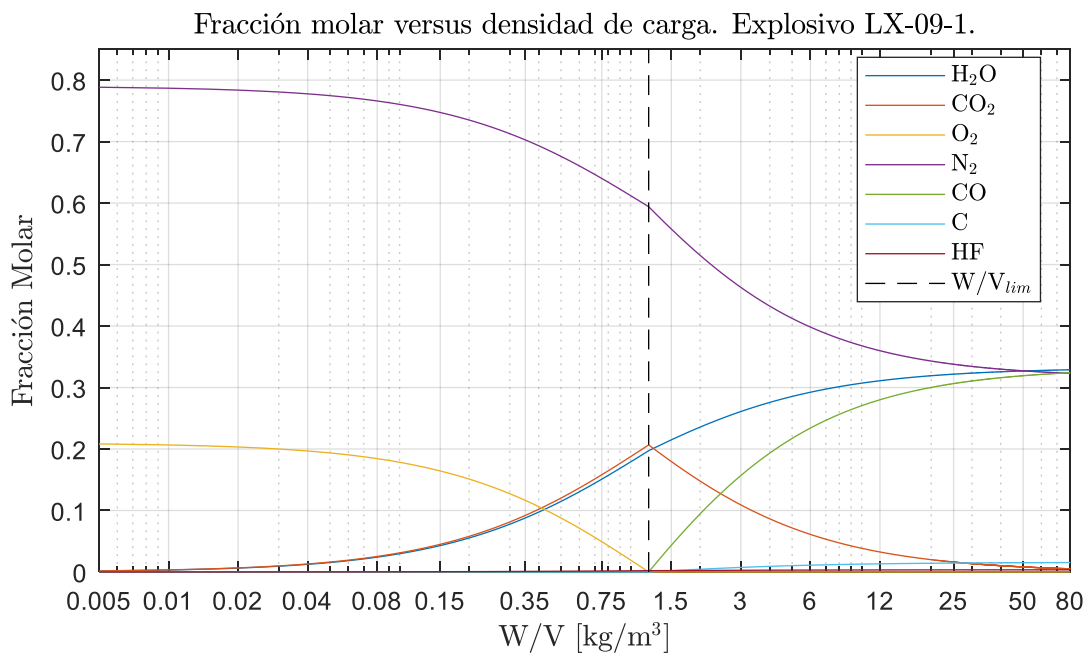


Figura 6-97: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-09-1.

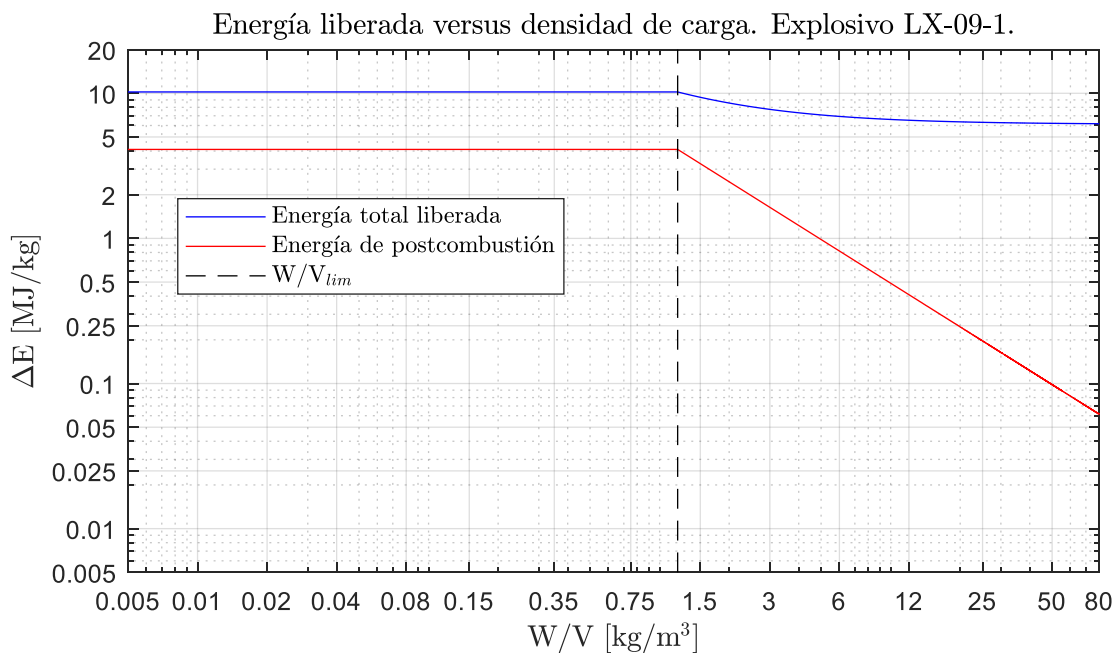


Figura 6-98: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-09-1.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-09-1.

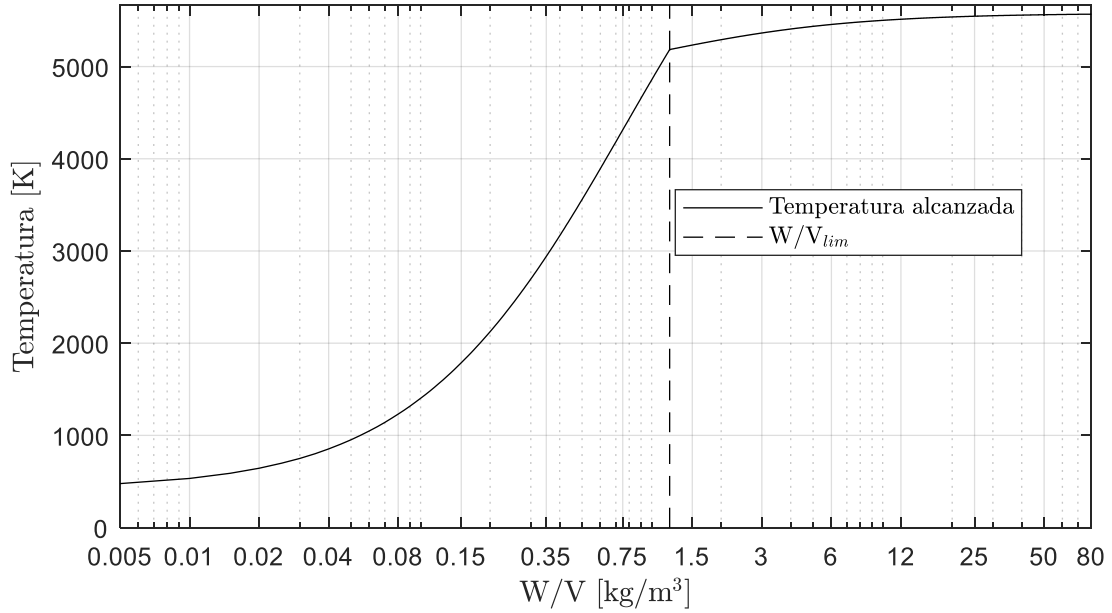


Figura 6-99: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-09-1.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-09-1.

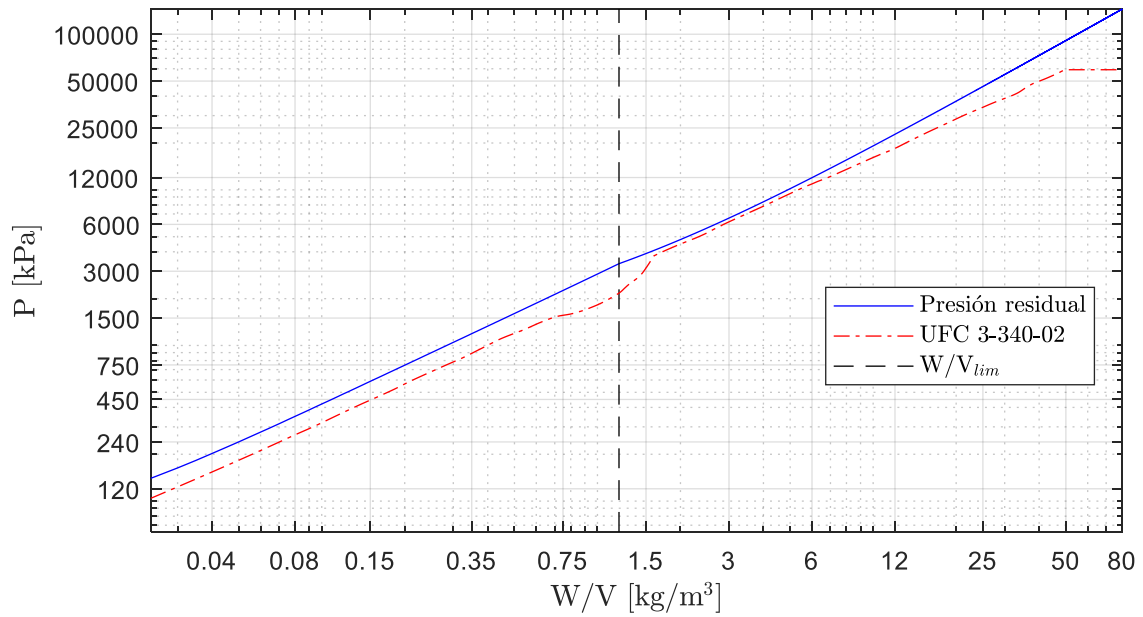


Figura 6-100: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-09-1.

A.2.26. LX-10-0

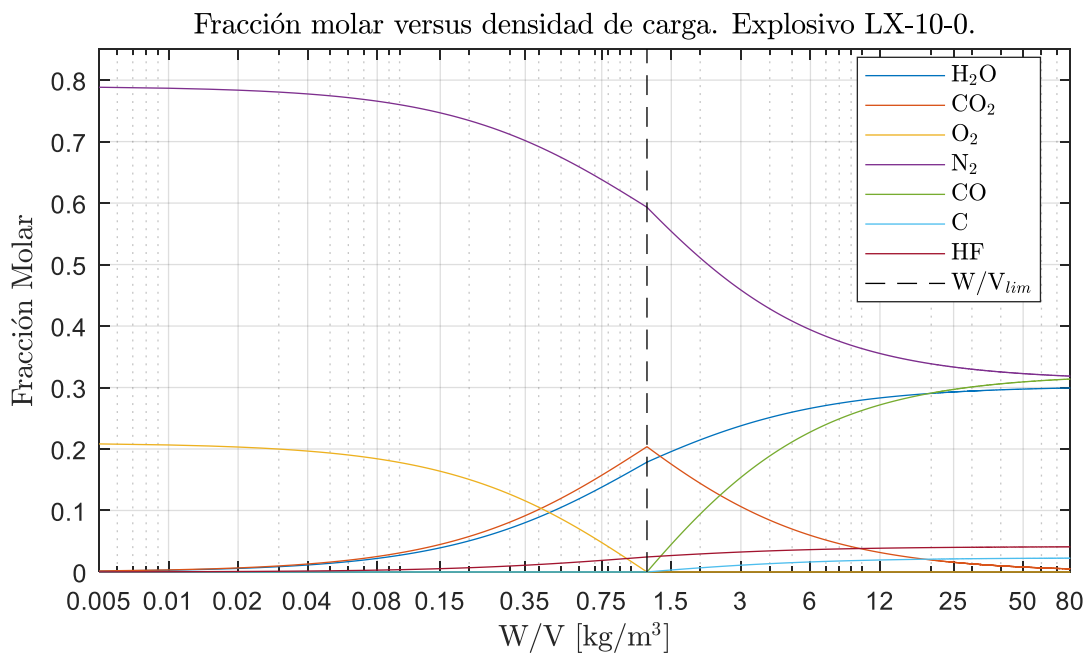


Figura 6-101: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-10-0.

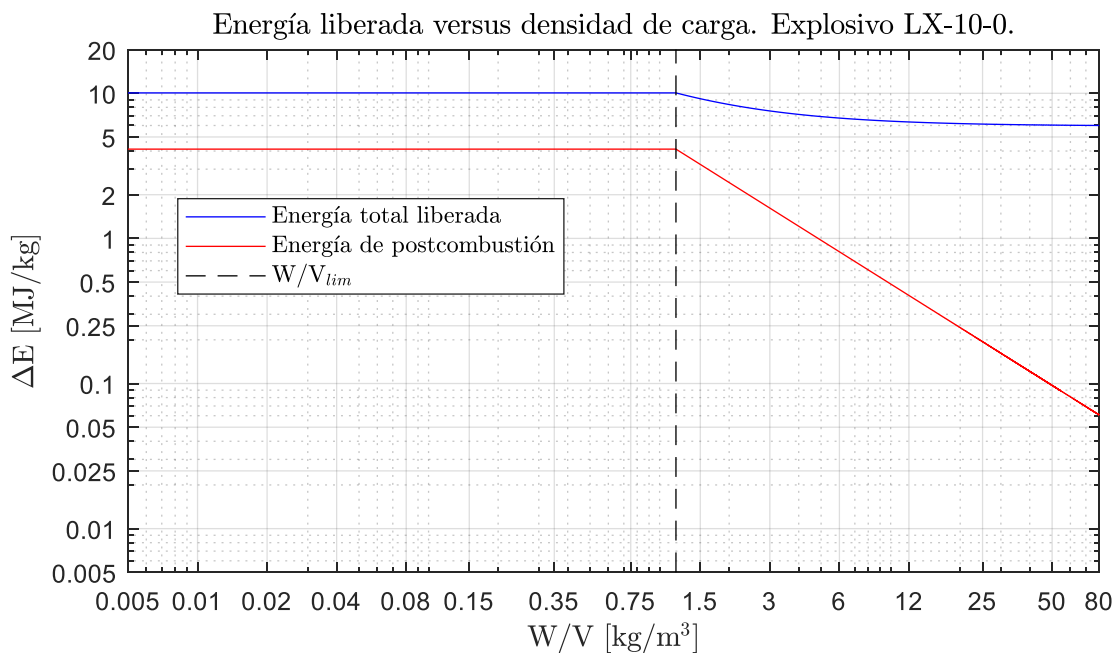


Figura 6-102: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-10-0.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-10-0.

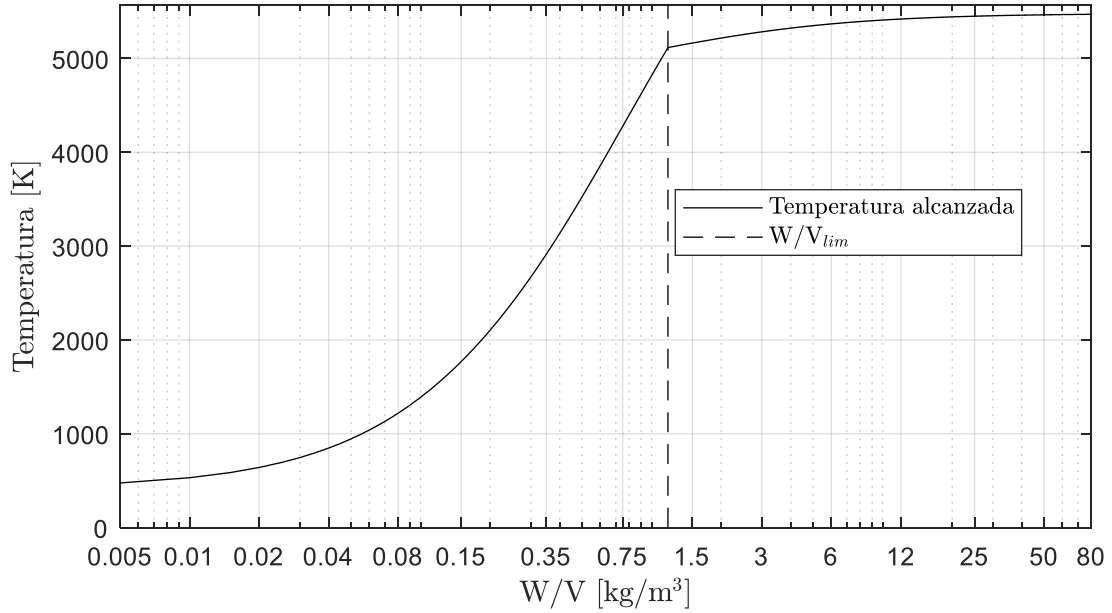


Figura 6-103: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-10-0.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-10-0.

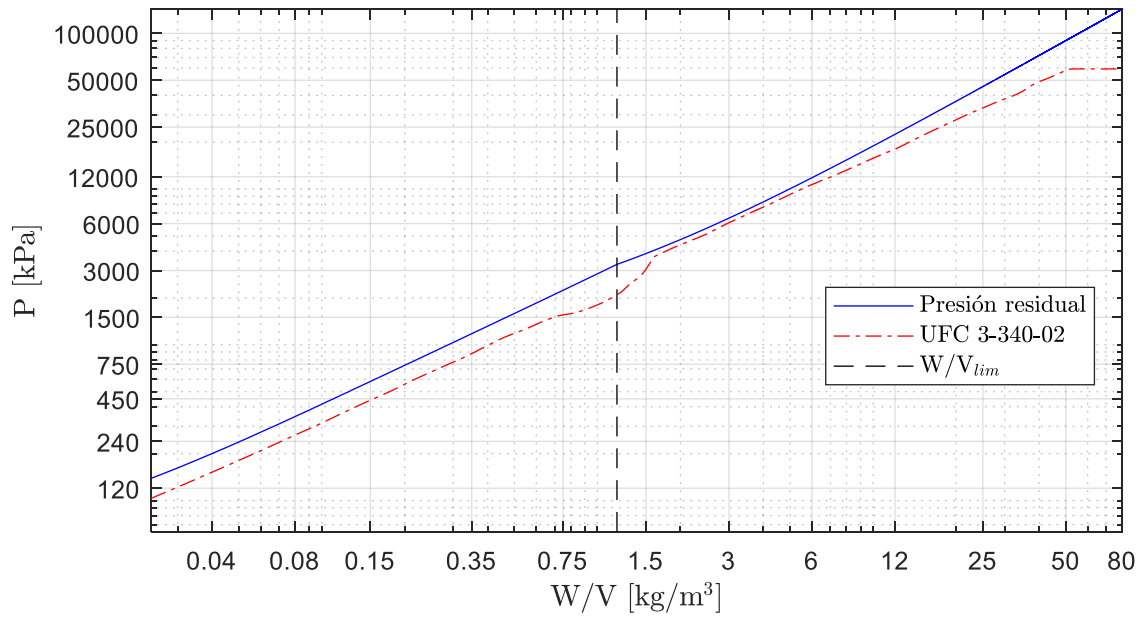


Figura 6-104: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-10-0.

A.2.27. LX-10-1

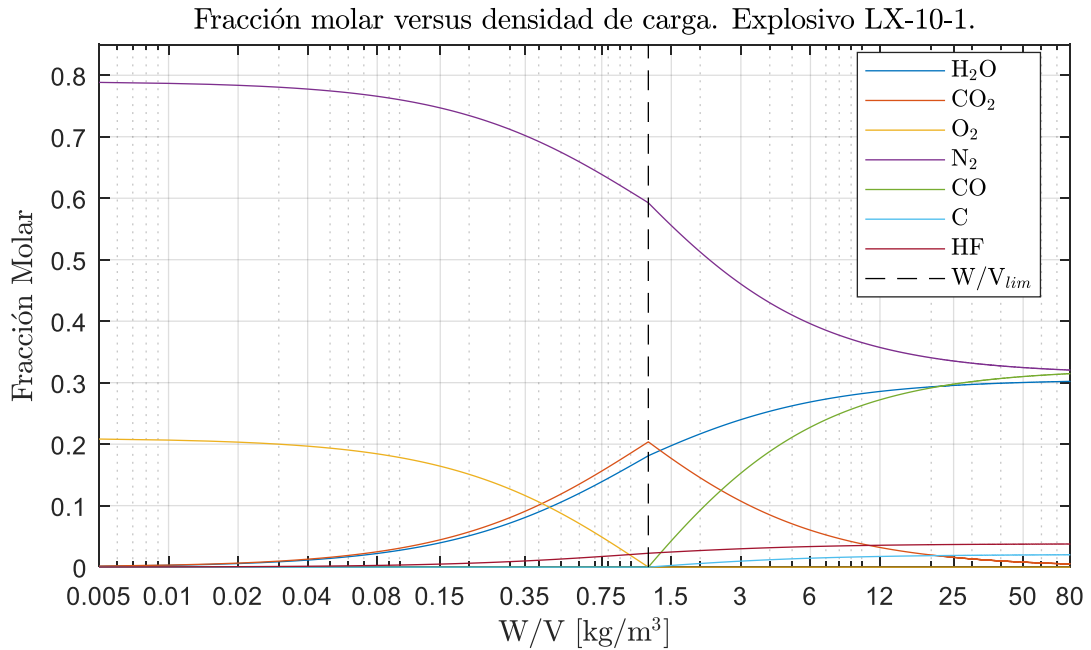


Figura 6-105: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-10-1.

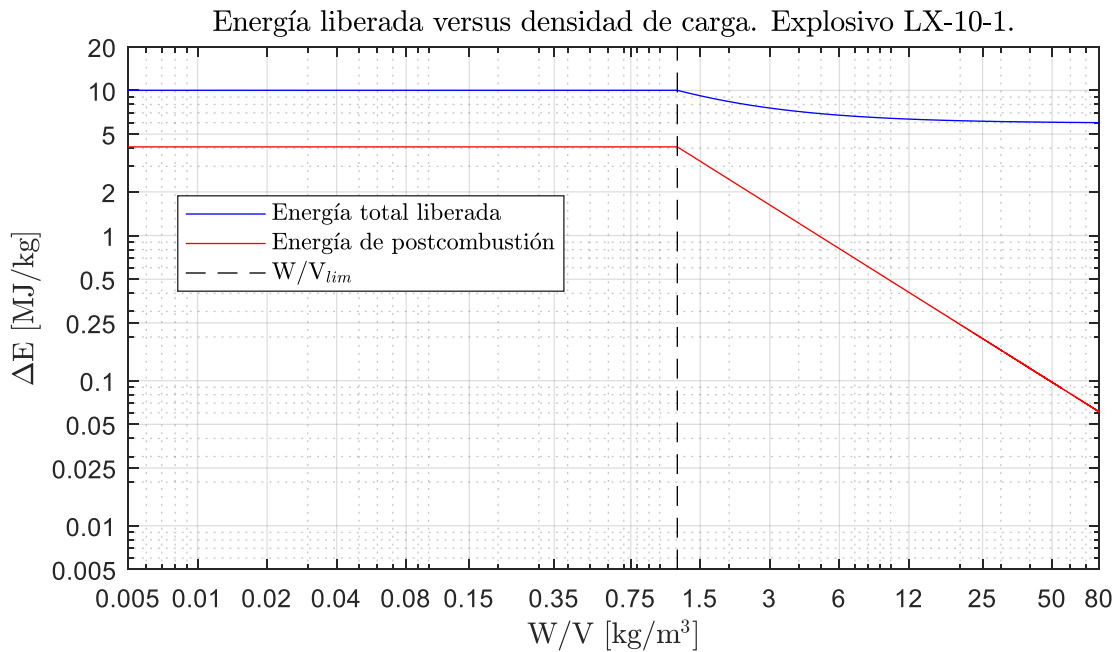


Figura 6-106: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-10-1.

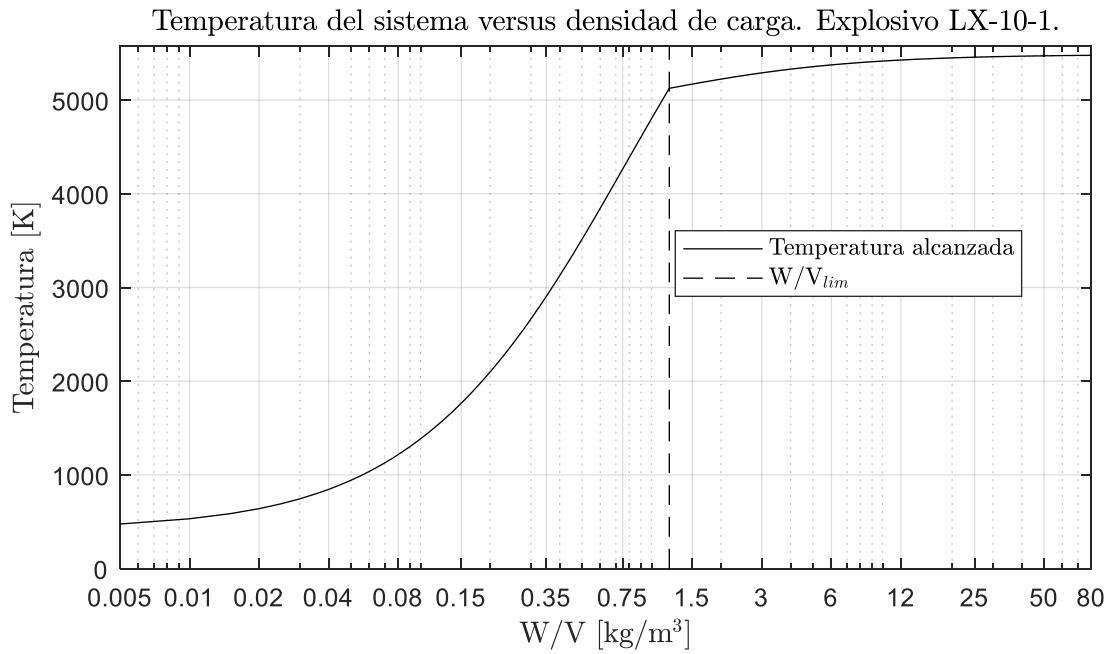


Figura 6-107: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-10-1.

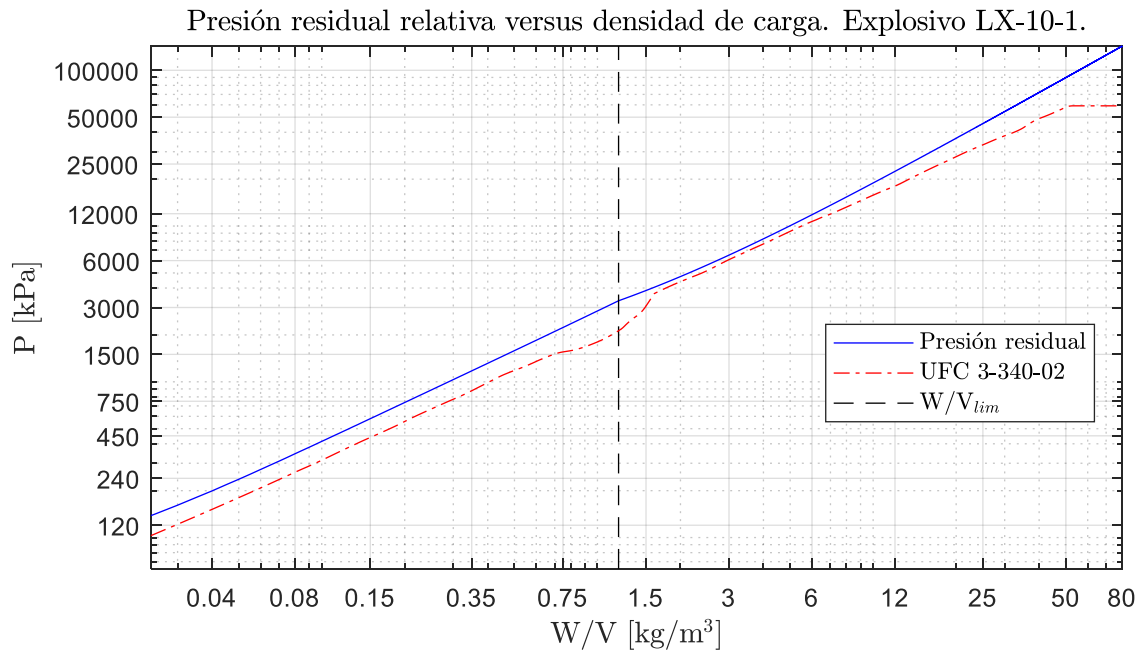


Figura 6-108: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-10-1.

A.2.28. LX-11-0

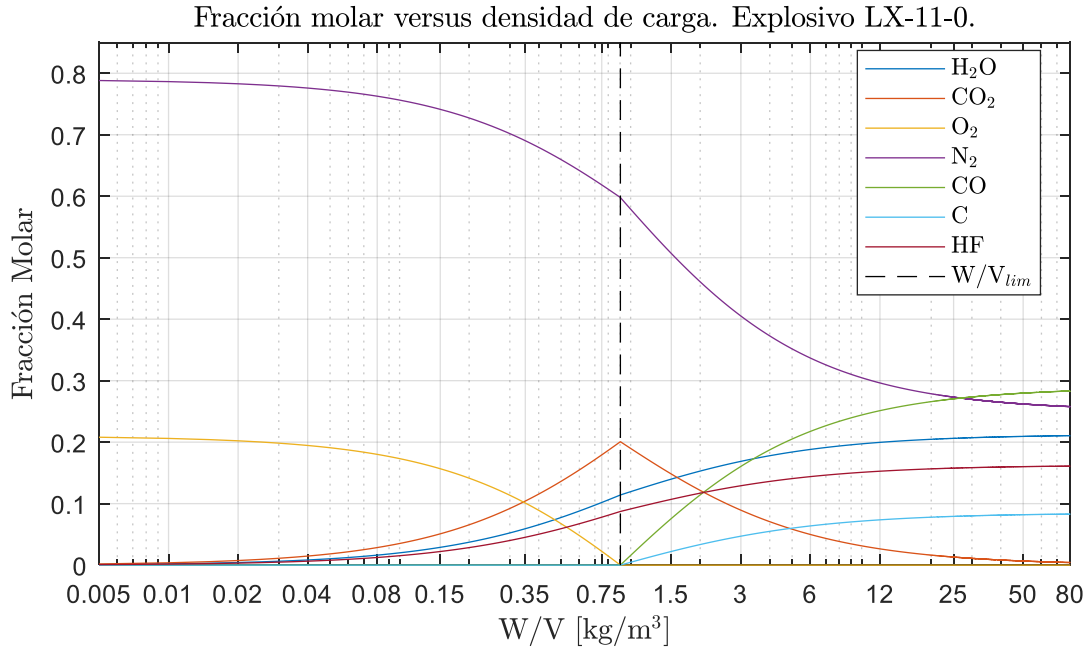


Figura 6-109: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-11-0.

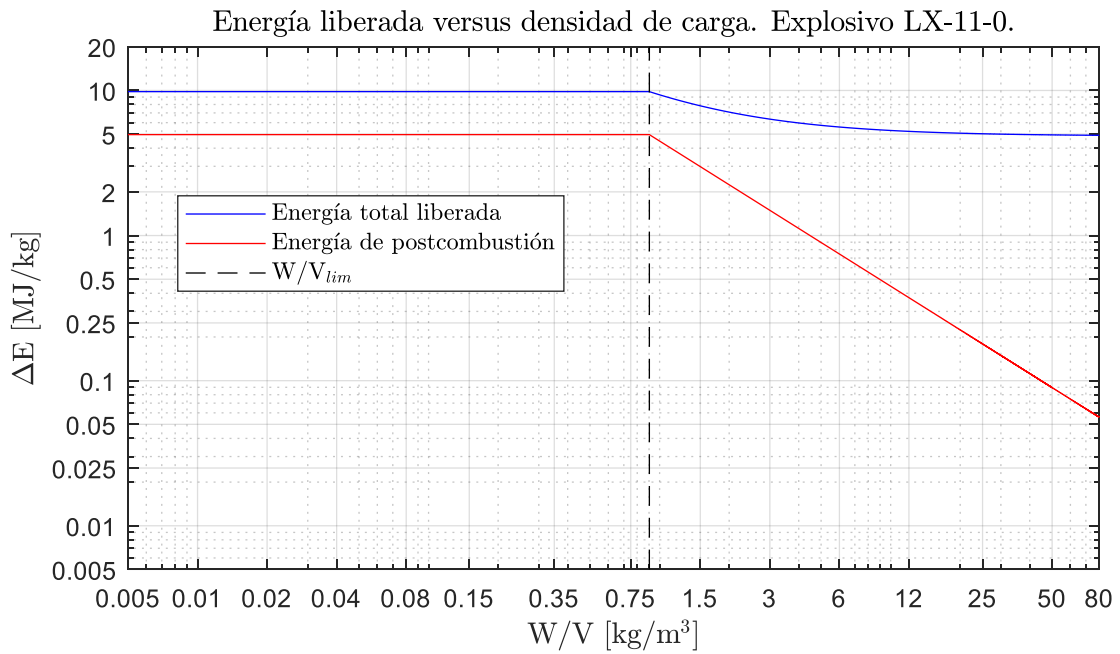


Figura 6-110: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-11-0.



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-11-0.

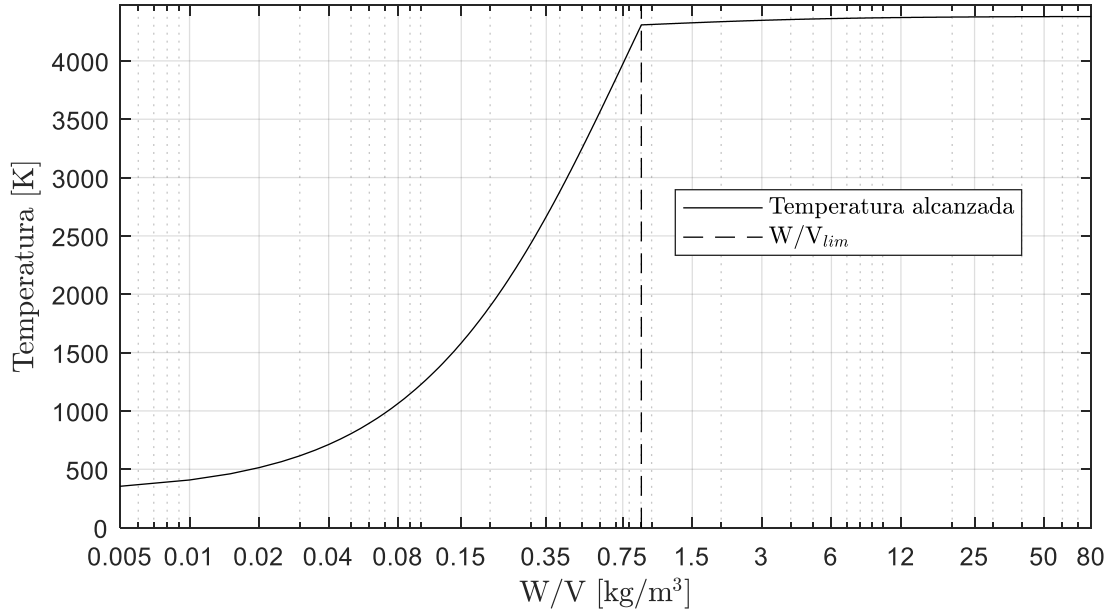


Figura 6-111: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-11-0.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-11-0.

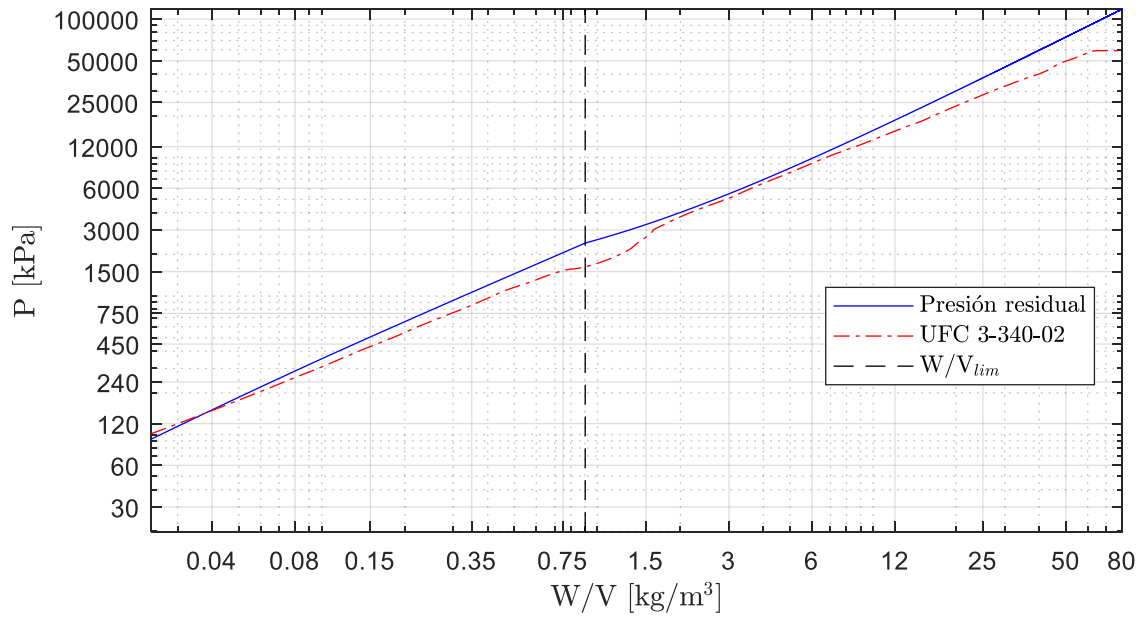


Figura 6-112: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-11-0.

A.2.29. LX-14-0

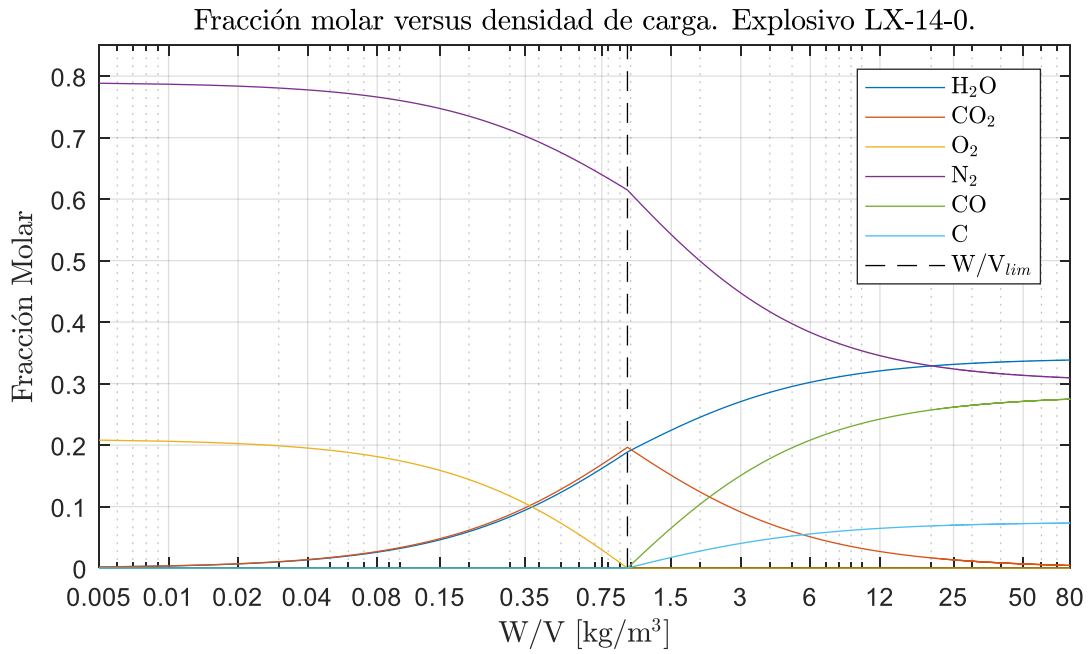


Figura 6-113: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-14-0.

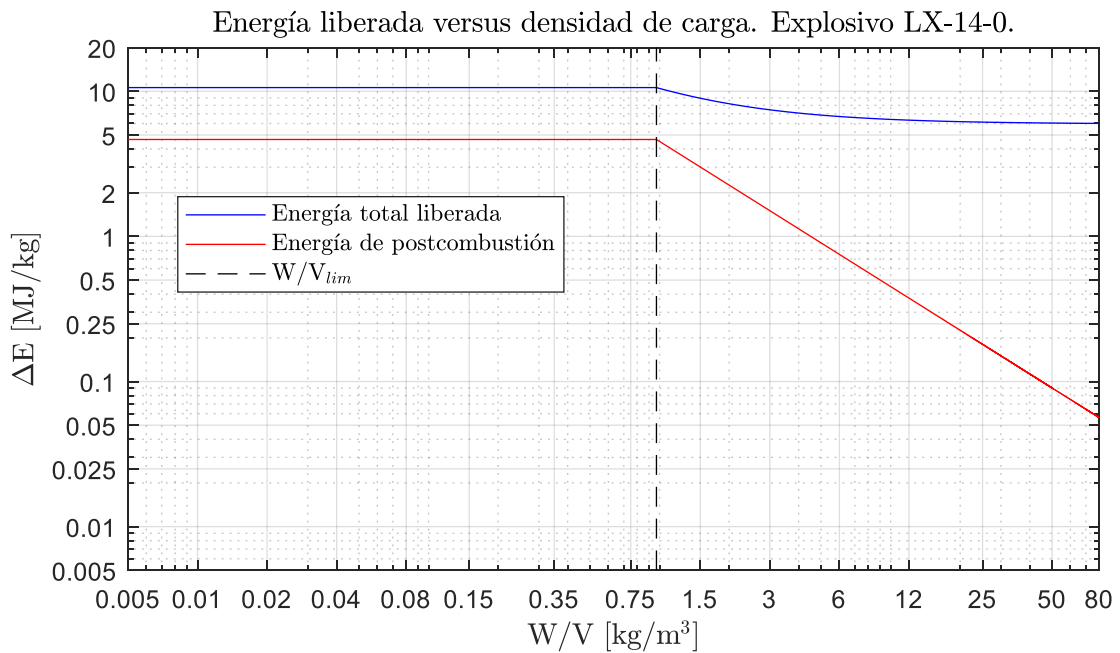


Figura 6-114: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-14-0.

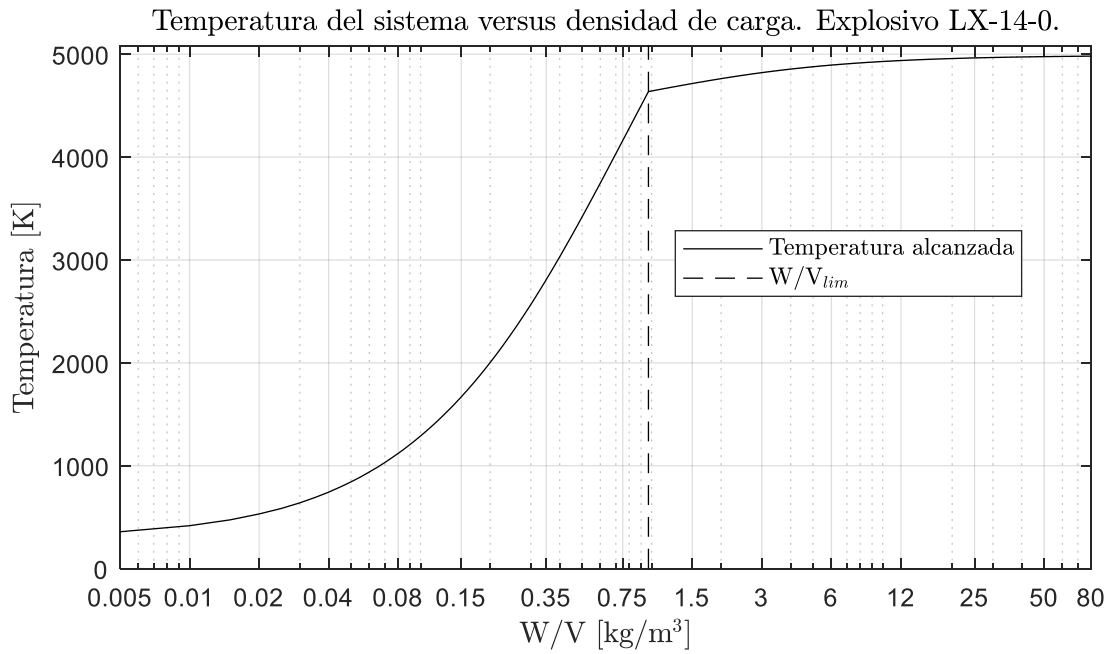


Figura 6-115: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-14-0.

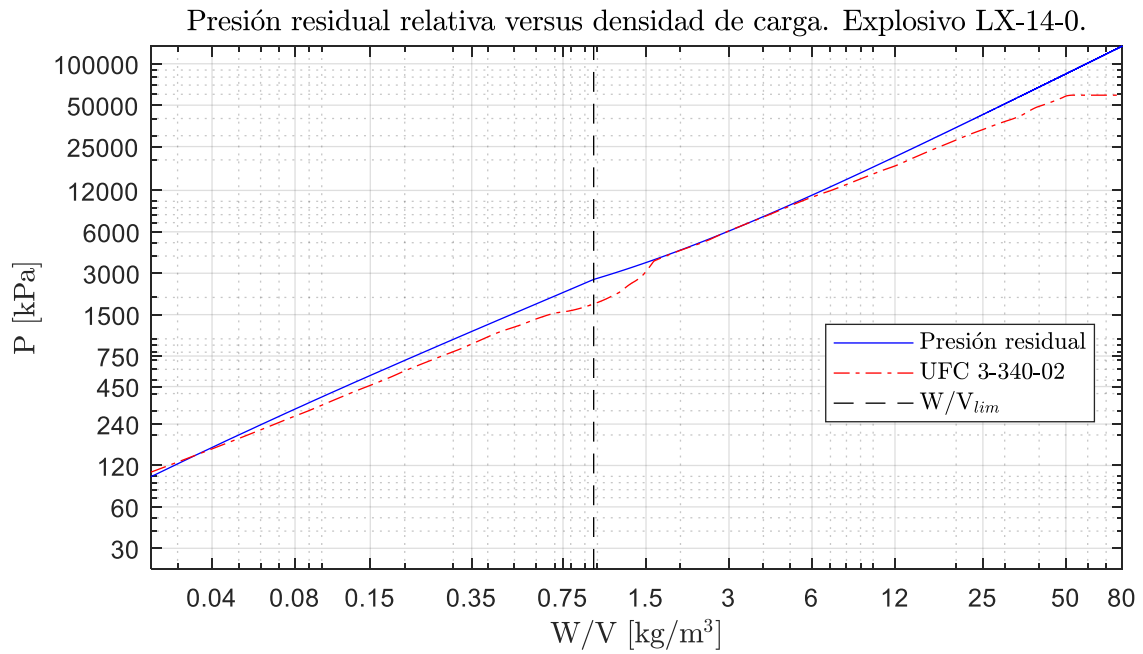


Figura 6-116: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-14-0.

A.2.30. LX-15

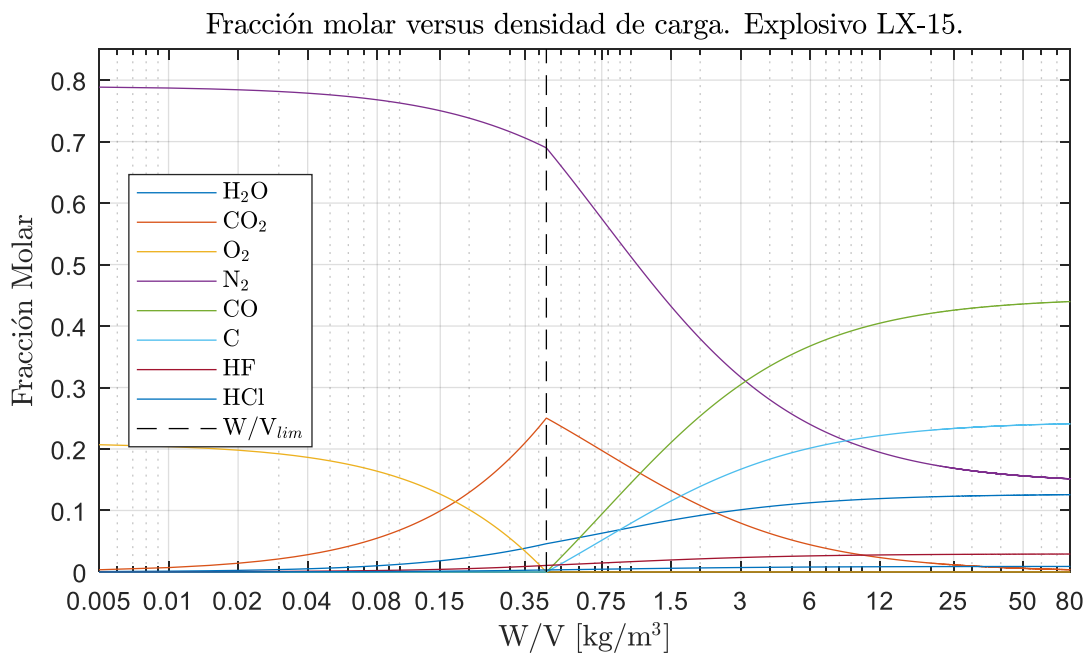


Figura 6-117: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-15.

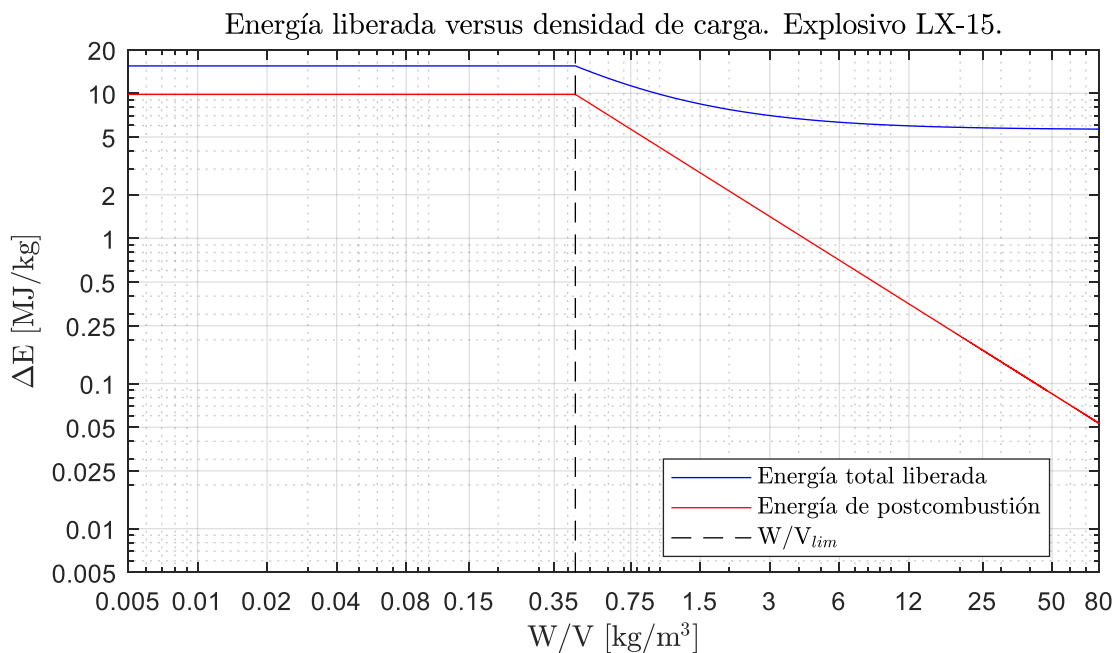


Figura 6-118: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-15.

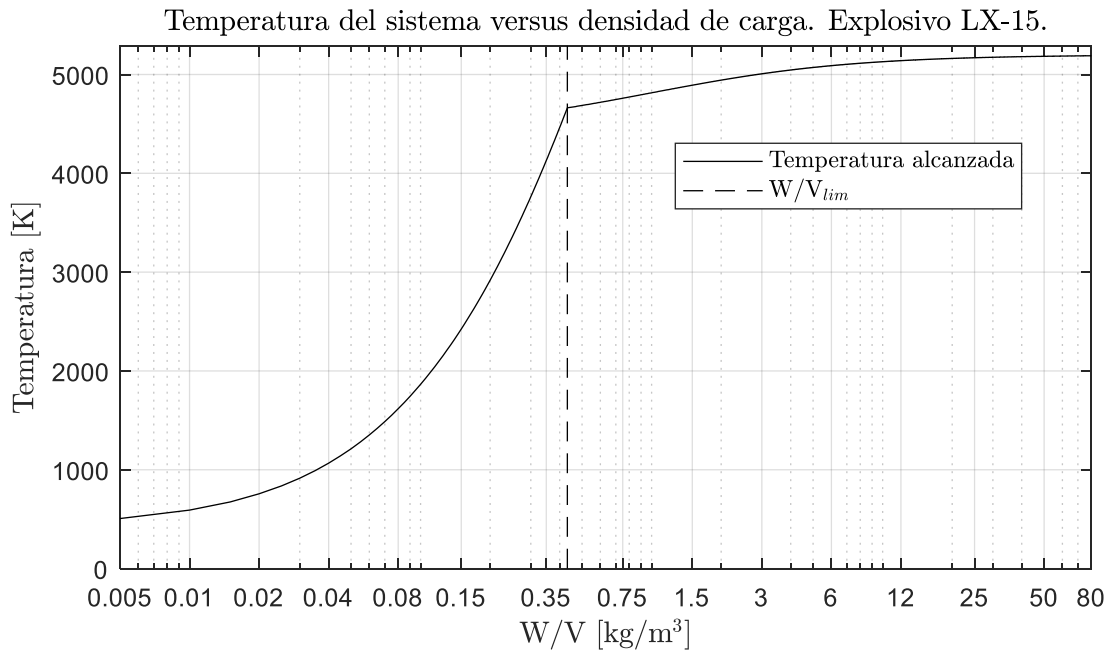


Figura 6-119: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-15.

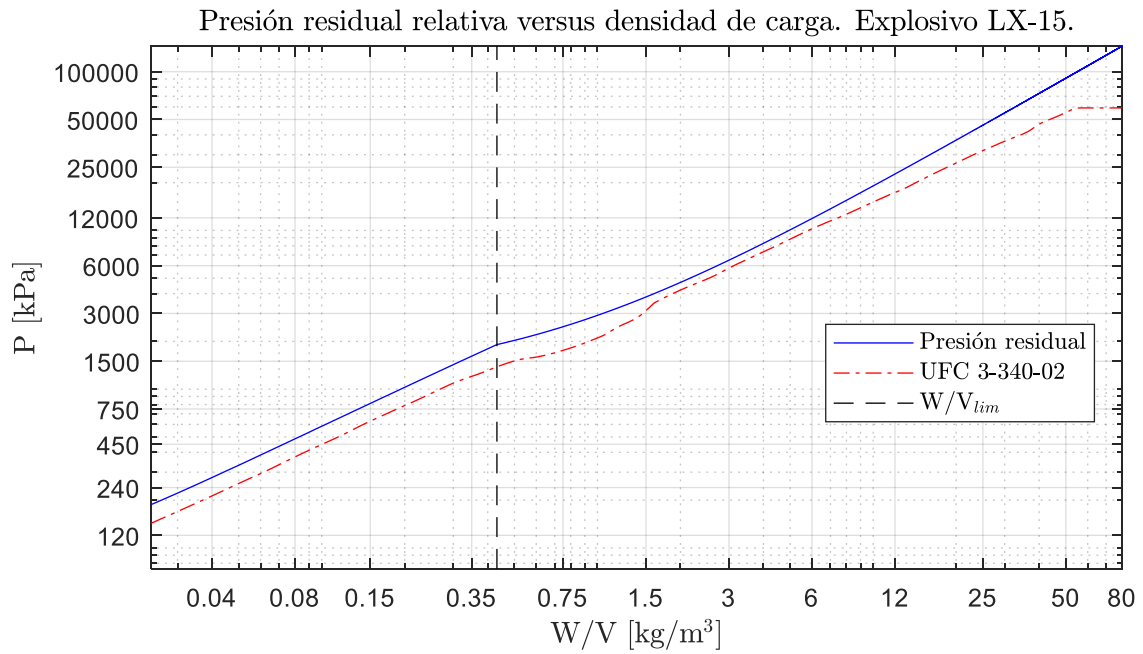


Figura 6-120: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-15.

A.2.31. LX-16

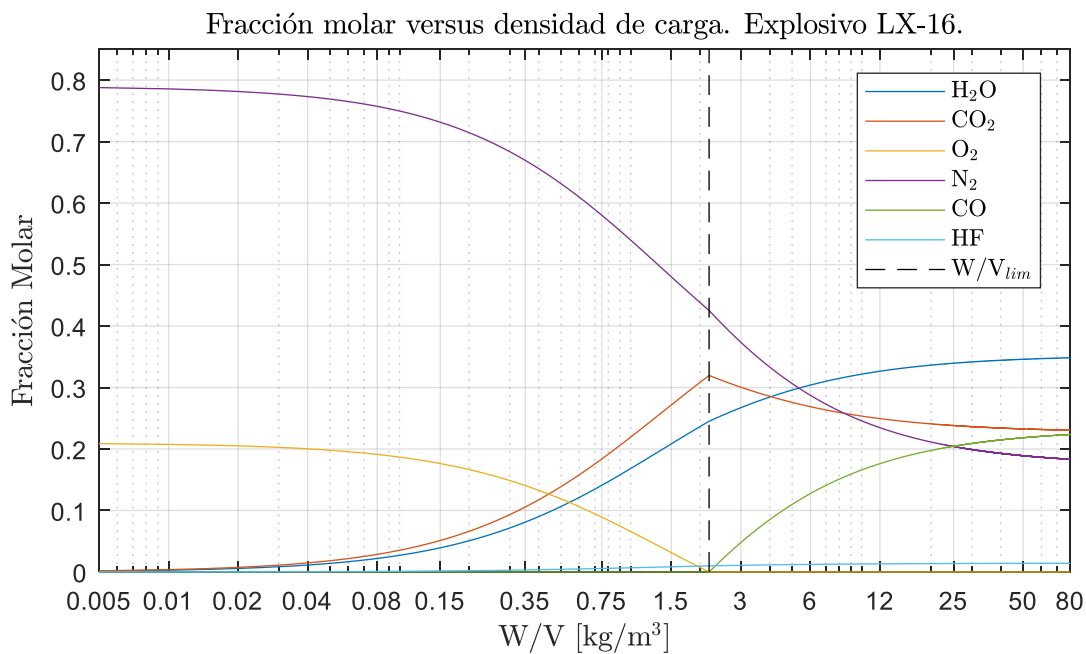


Figura 6-121: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-16

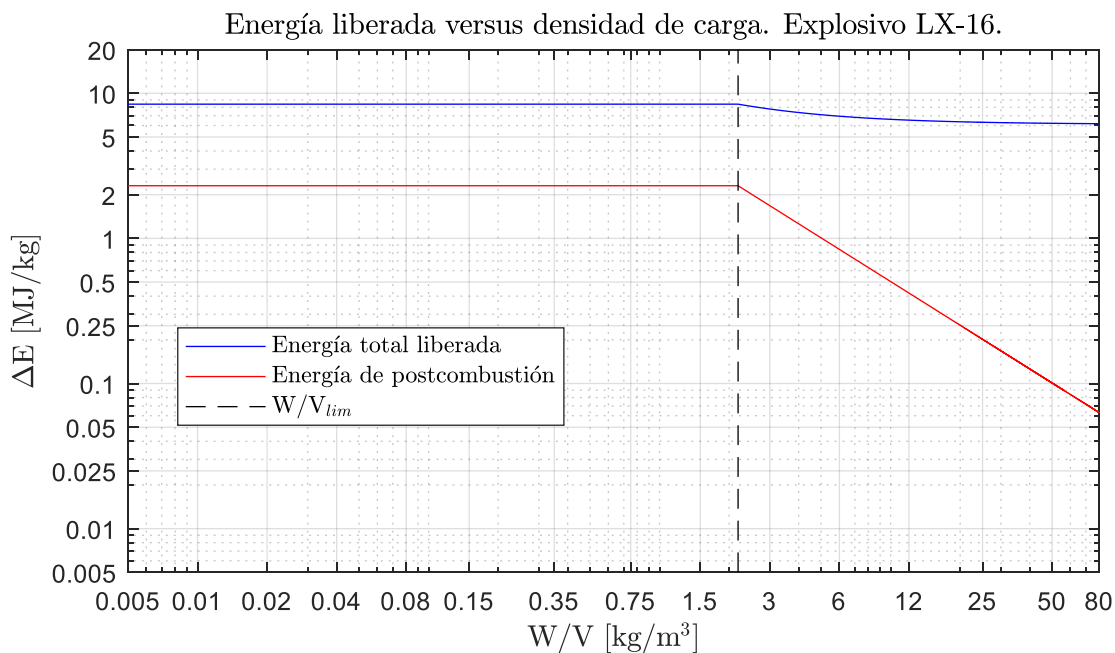


Figura 6-122: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-16.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo LX-16.

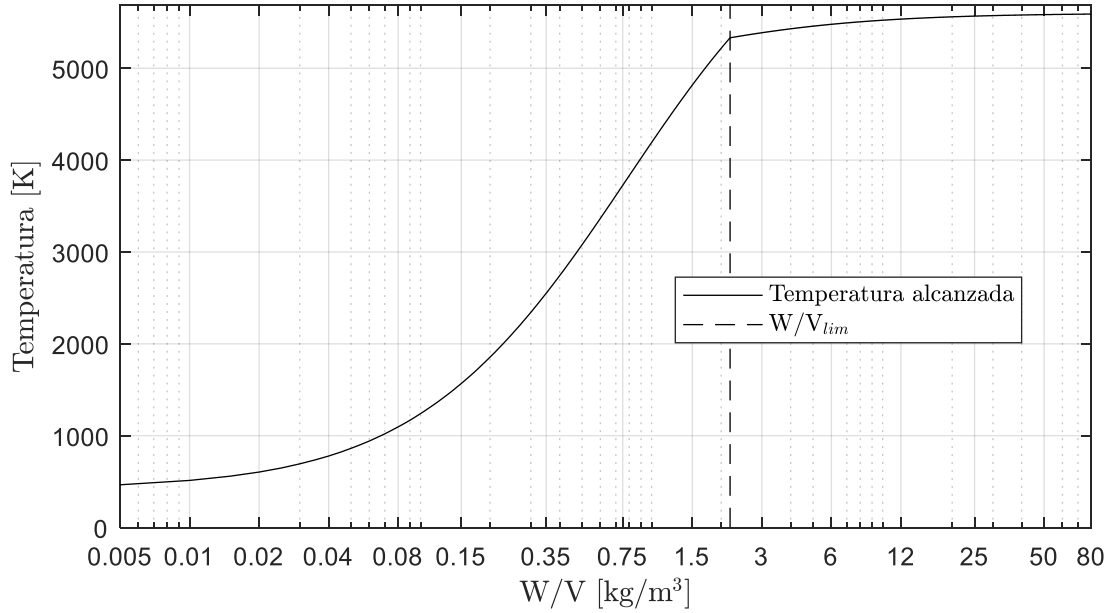


Figura 6-123: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-16.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo LX-16.

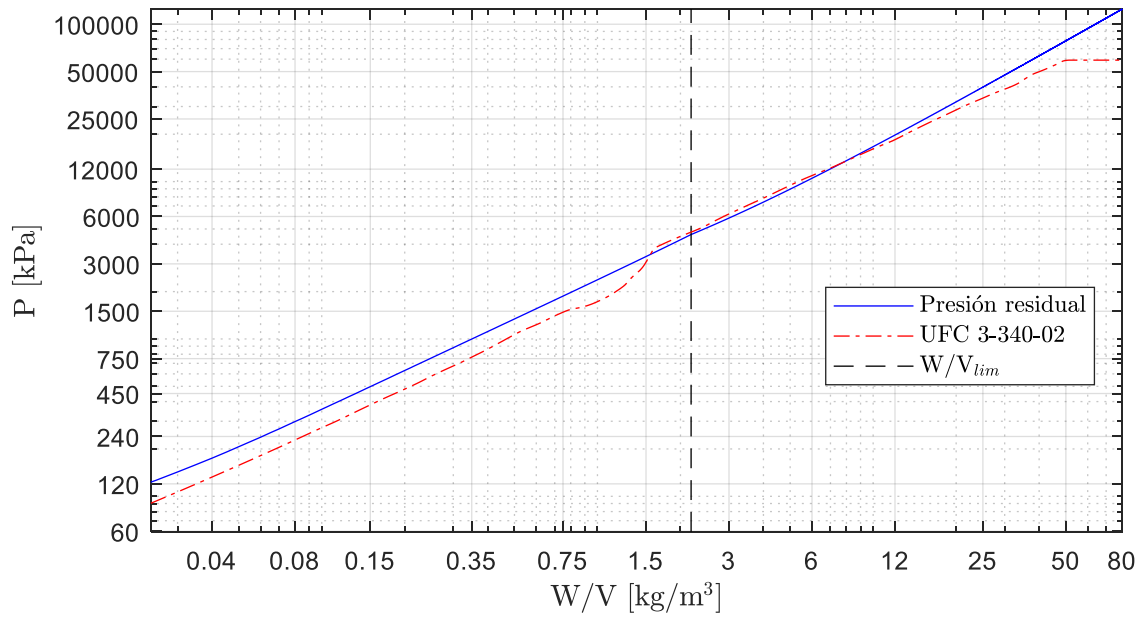


Figura 6-124: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-16.

A.2.32. LX-17-0

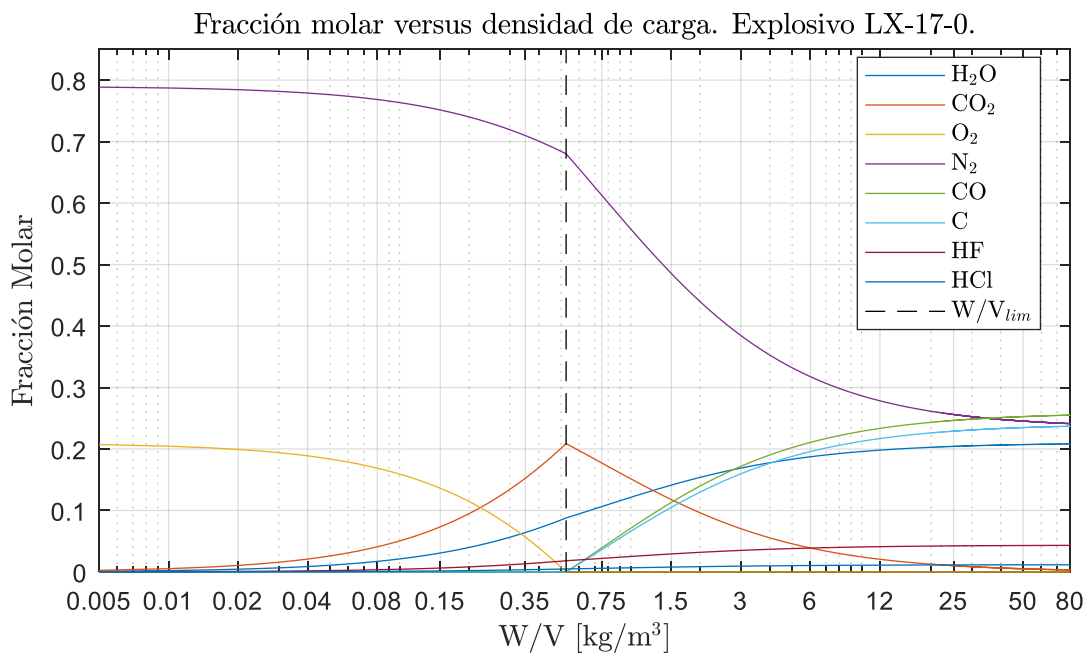


Figura 6-125: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo LX-17-0.

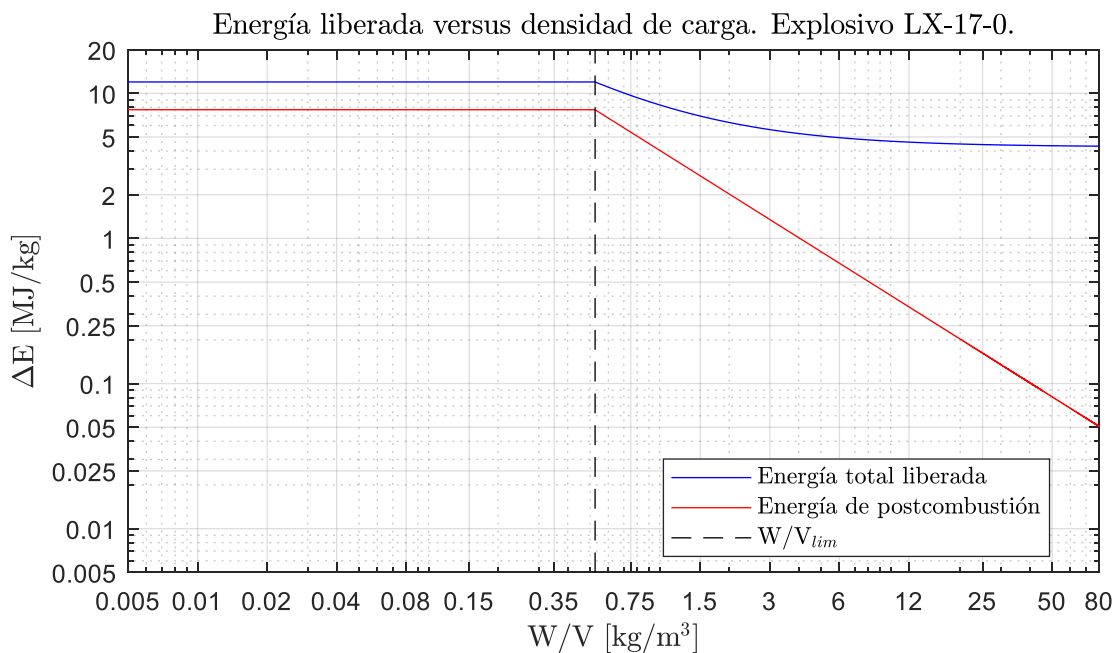


Figura 6-126: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo LX-17-0.



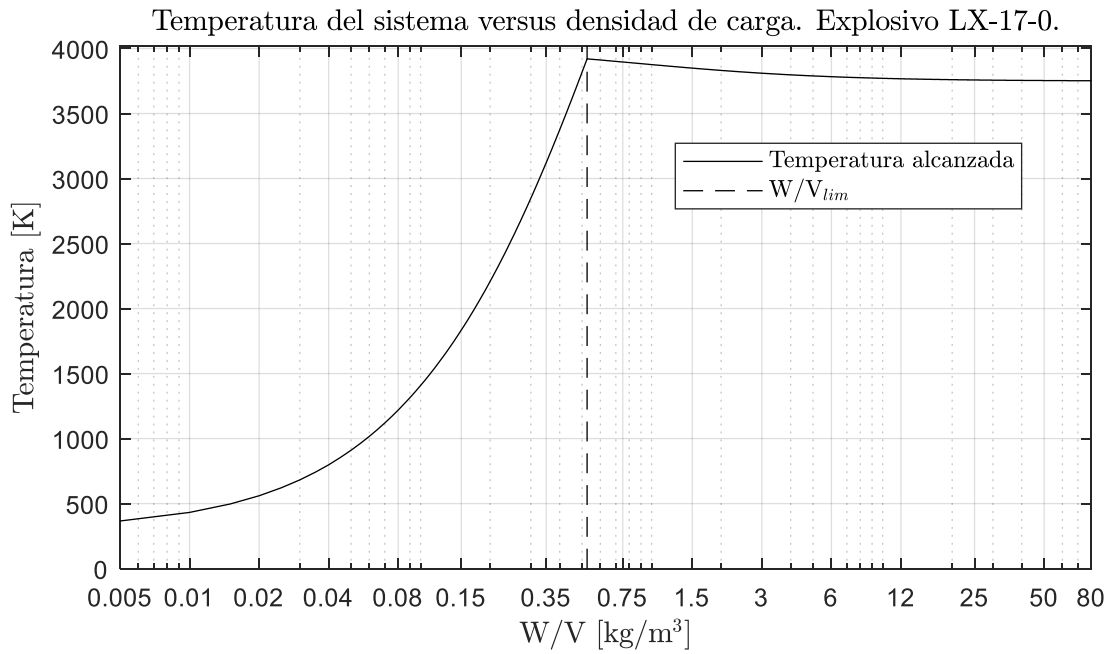


Figura 6-127: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo LX-17-0.

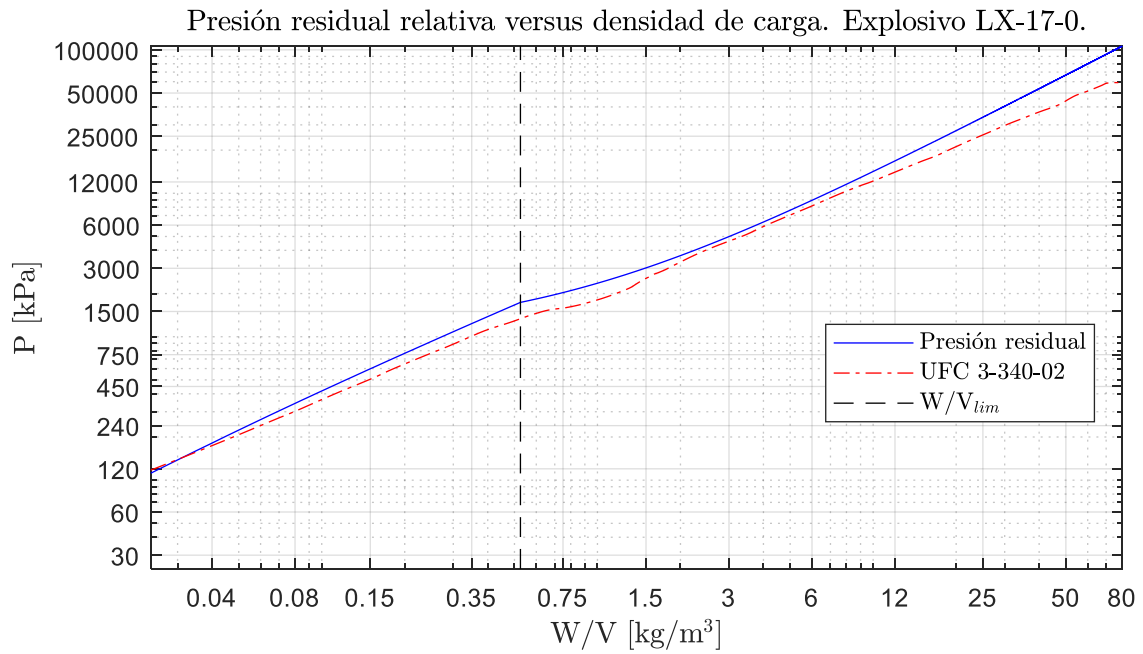


Figura 6-128: Presión residual relativa del sistema para explosivo LX-17-0.

A.2.33. MEN-II

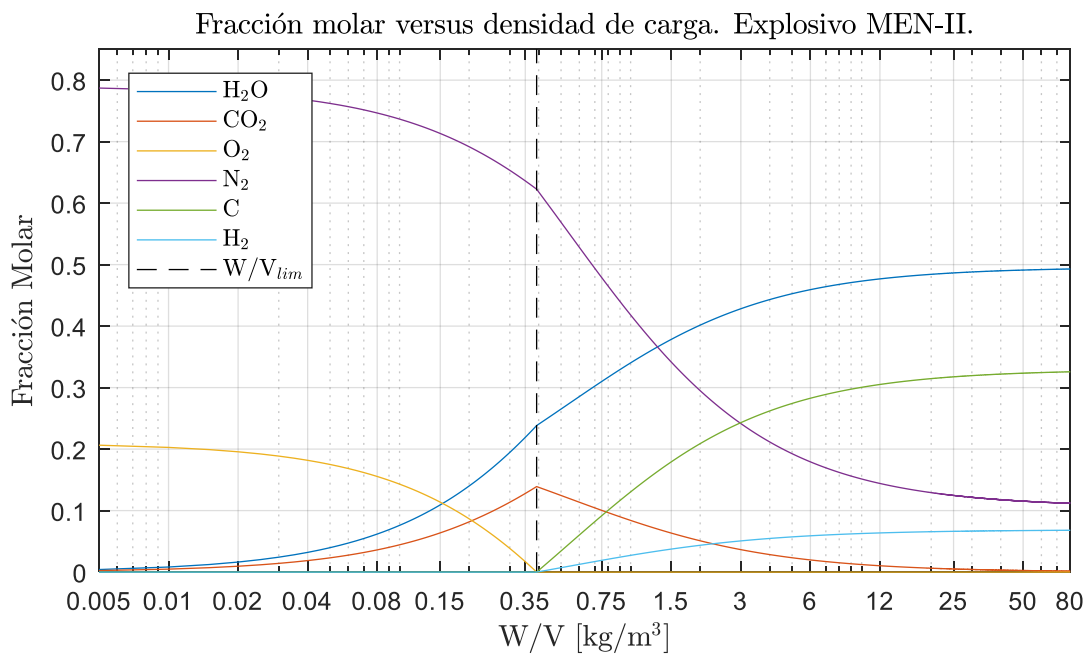


Figura 6-129: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo MEN-II.

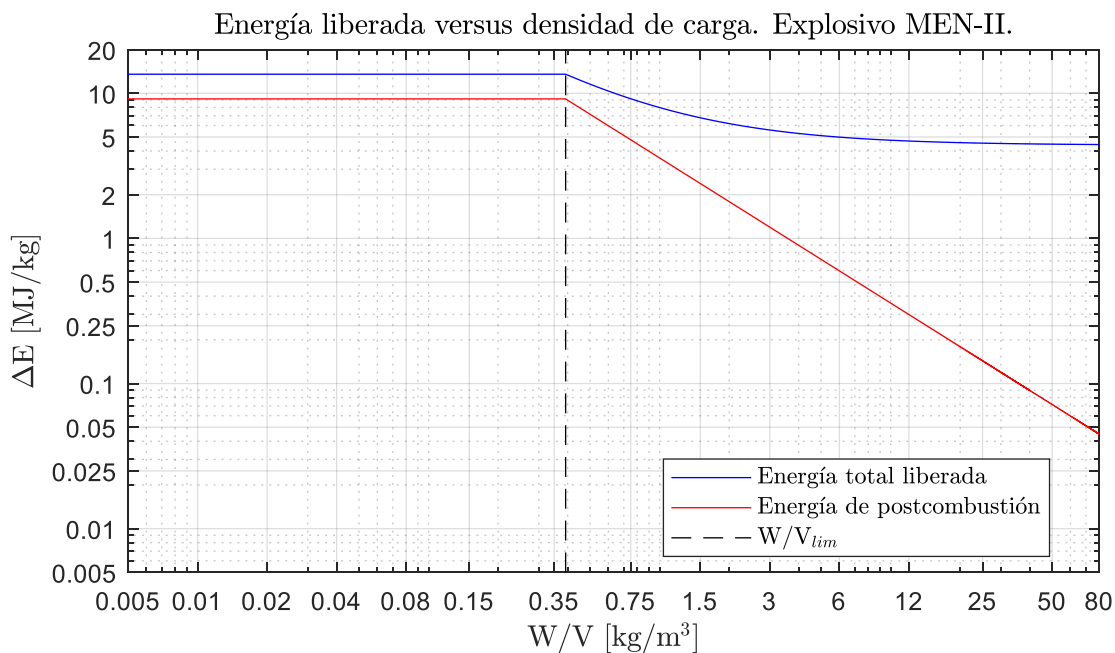


Figura 6-130: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo MEN-II.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo MEN-II.

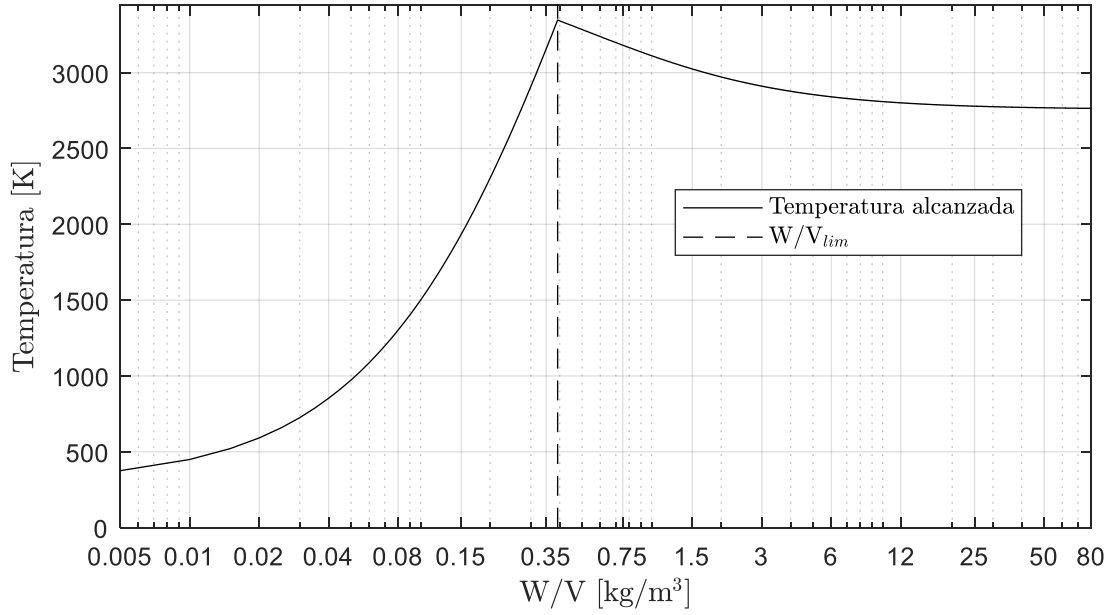


Figura 6-131: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo MEN-II.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo MEN-II.

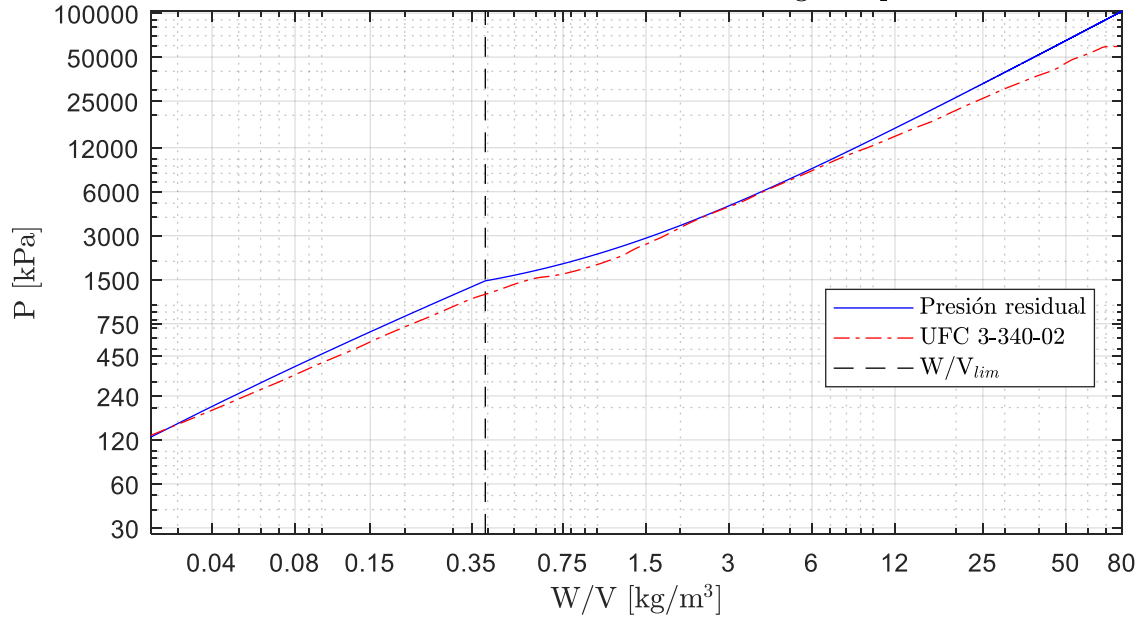


Figura 6-132: Presión residual relativa del sistema para explosivo MEN-II.

A.2.34. NC (12.0% N)

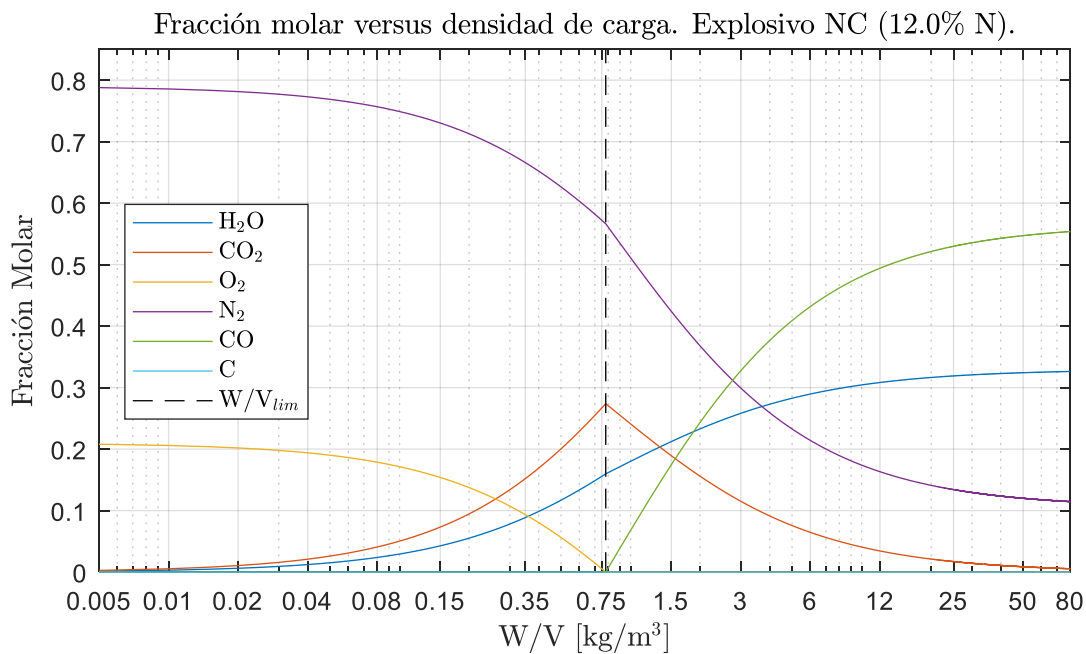


Figura 6-133: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NC (12% N).

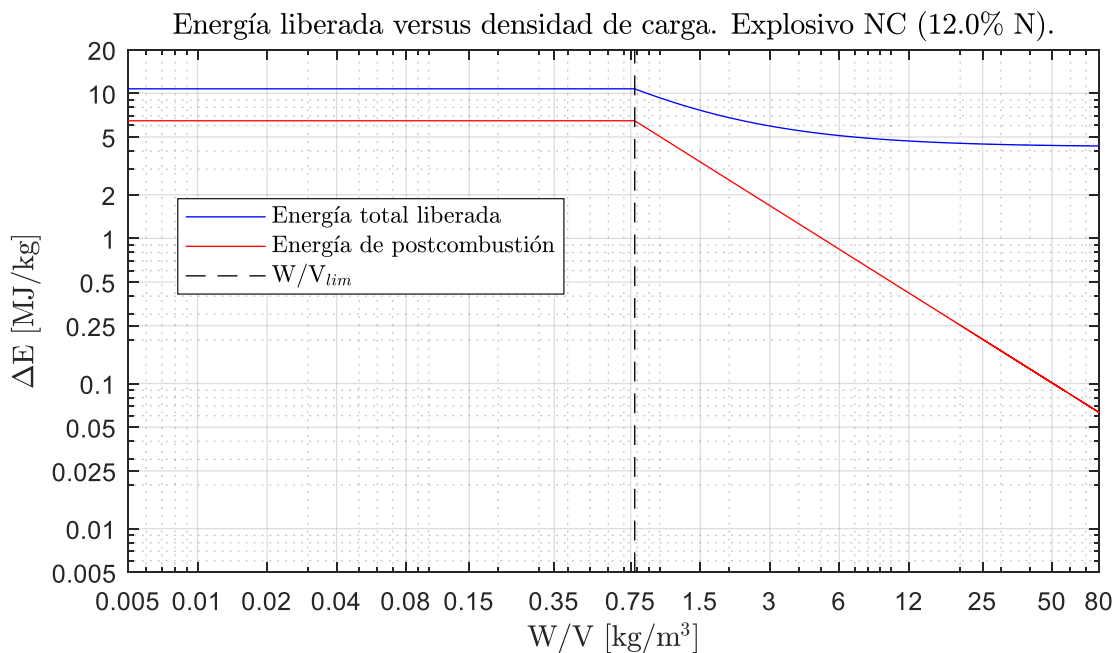


Figura 6-134: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NC (12% N).

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo NC (12.0% N).

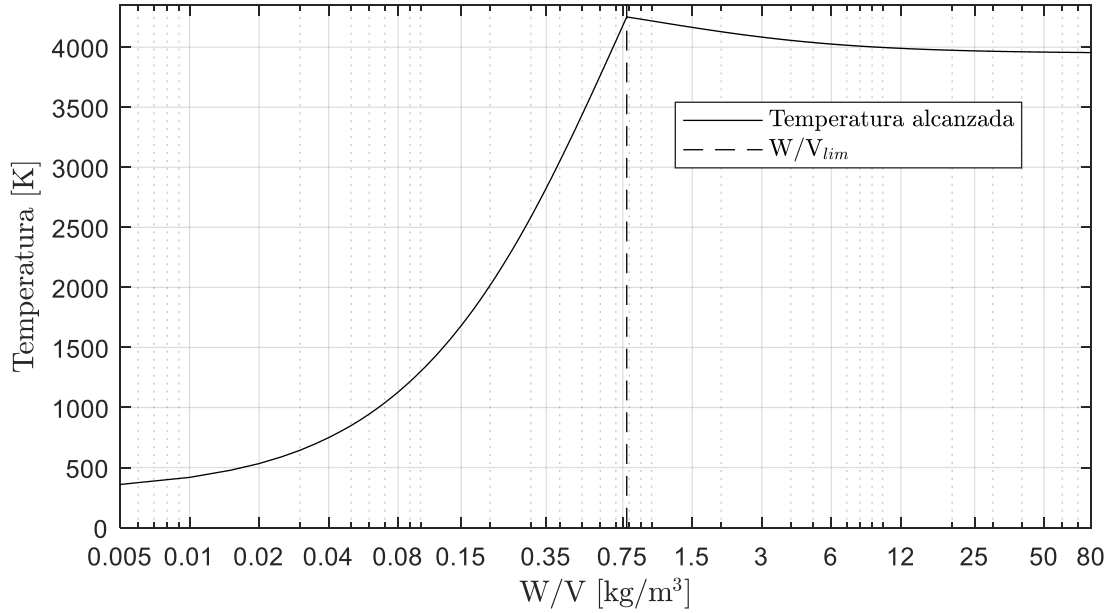


Figura 6-135: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NC (12% N).

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo NC (12.0% N).

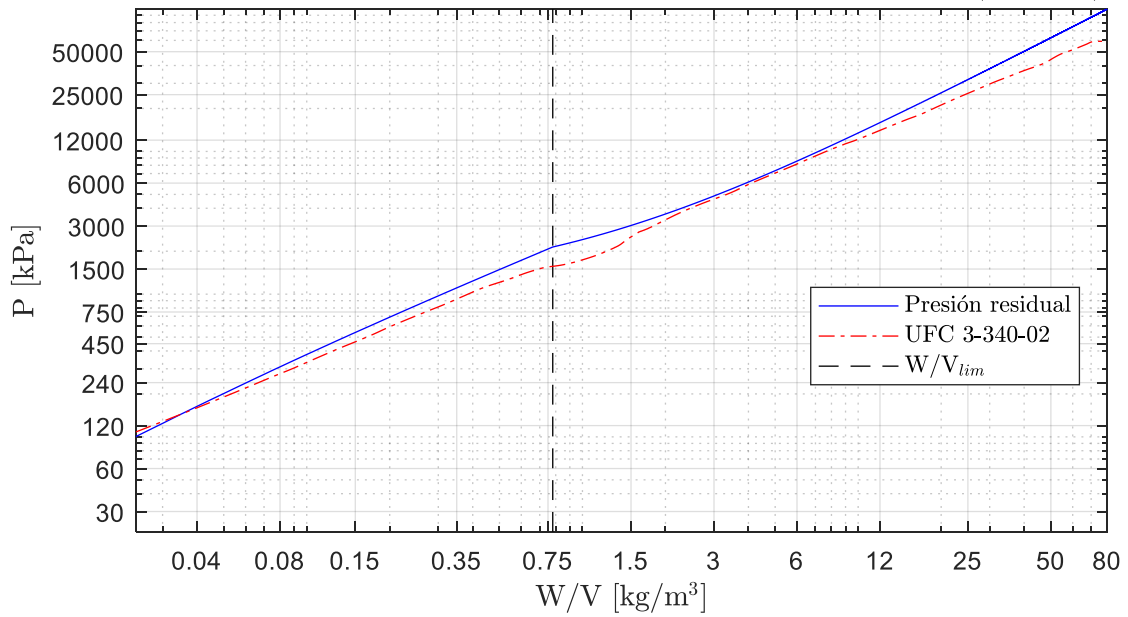


Figura 6-136: Presión residual relativa del sistema para explosivo NC (12% N).

A.2.35. NC (13.35% N)

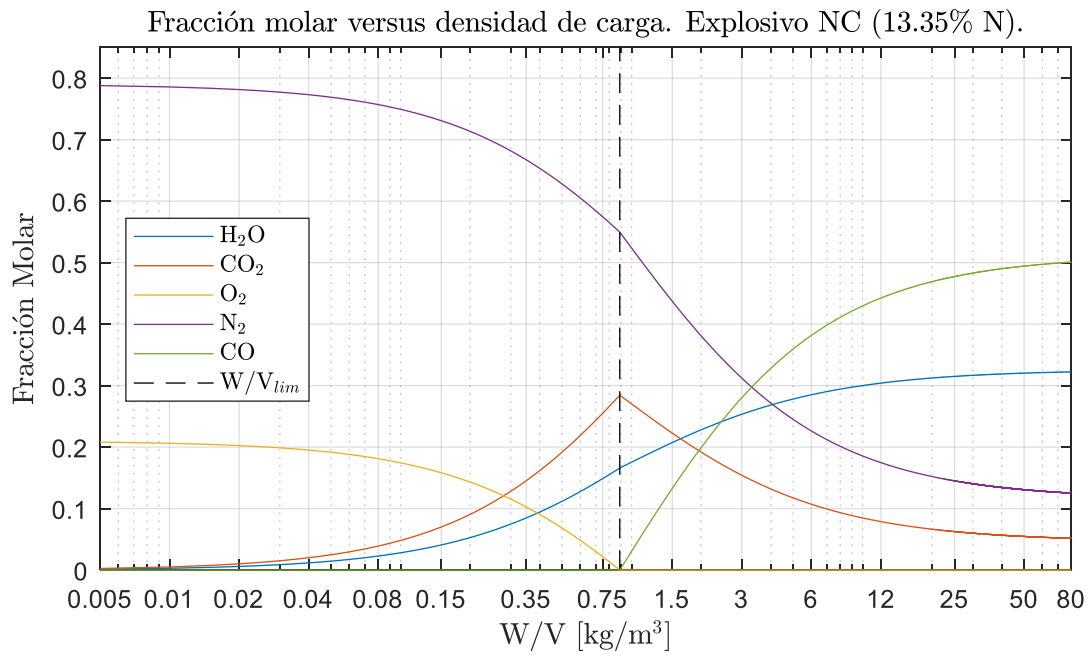


Figura 6-137: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NC (13.35% N).

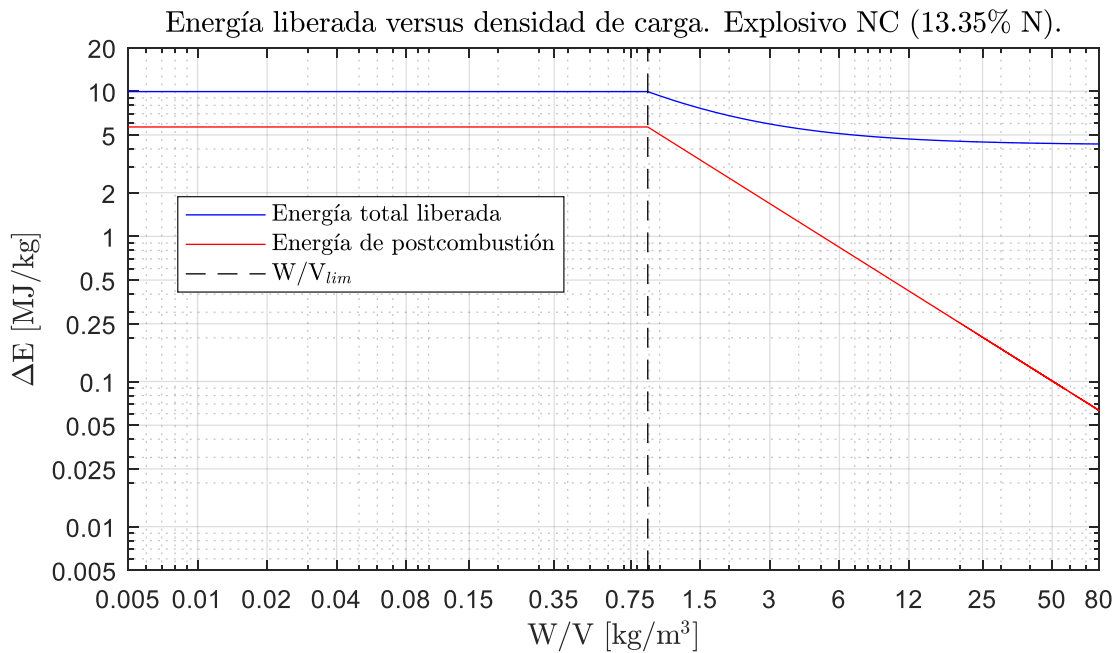


Figura 6-138: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NC (13.35% N).

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo NC (13.35% N).

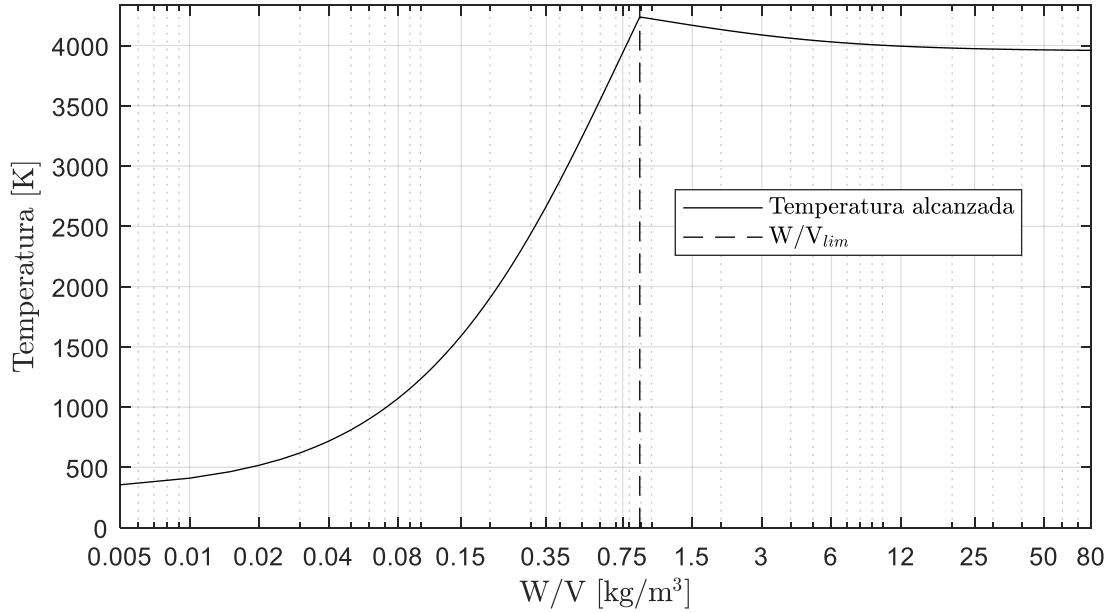


Figura 6-139: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NC (13.35% N).

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo NC (13.35% N).

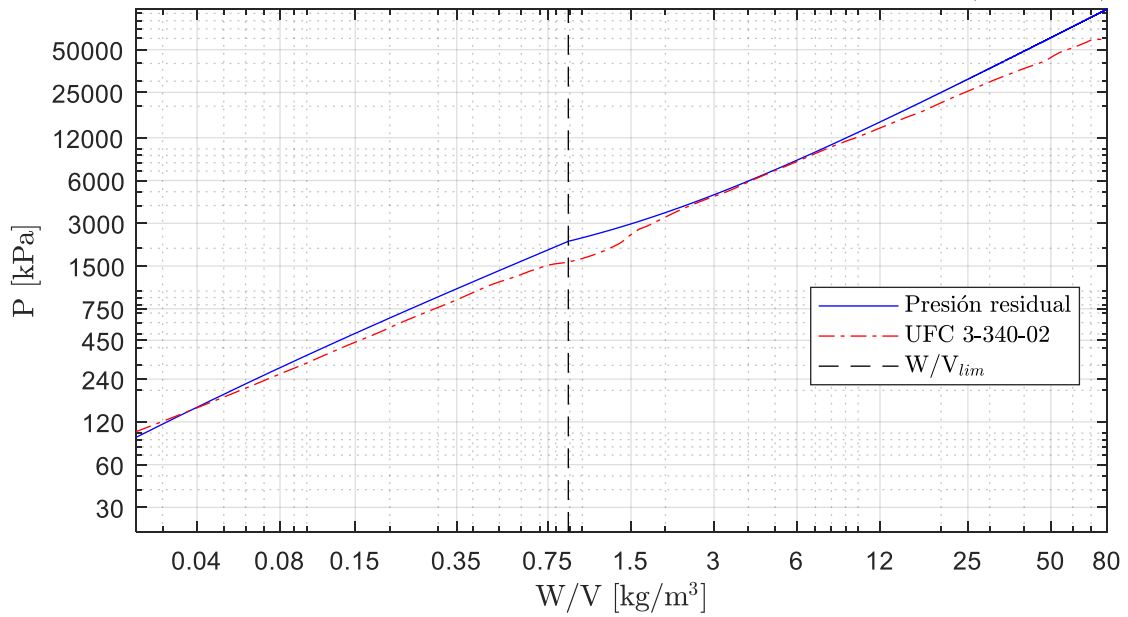


Figura 6-140: Presión residual relativa del sistema para explosivo NC (13.35% N).

A.2.36. NC (14.14% N)

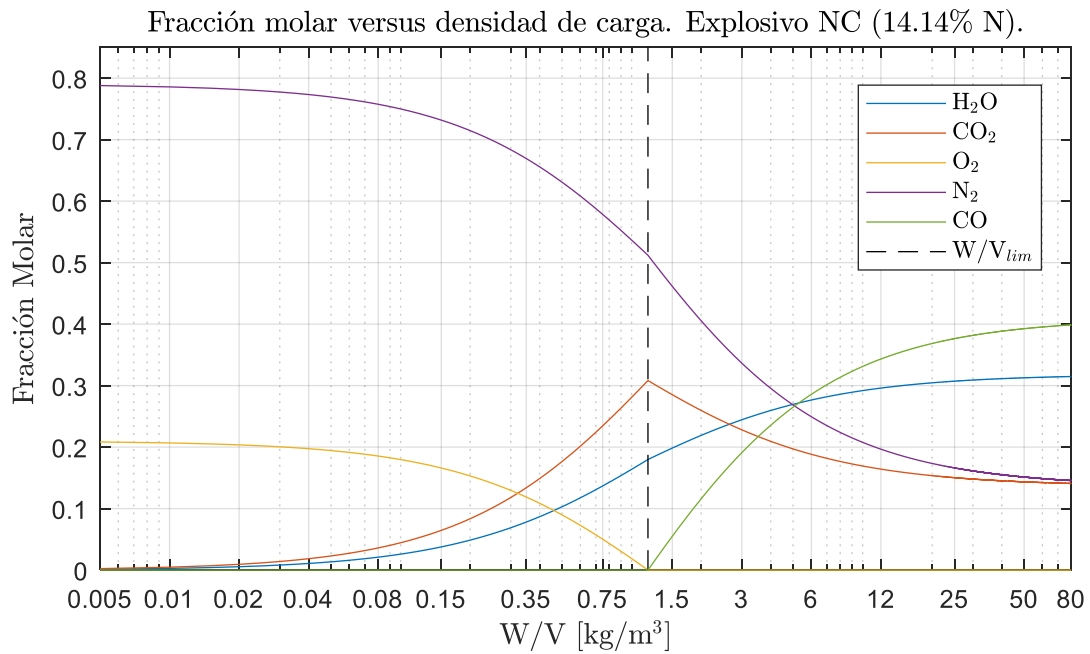


Figura 6-141: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NC (14.14% N).

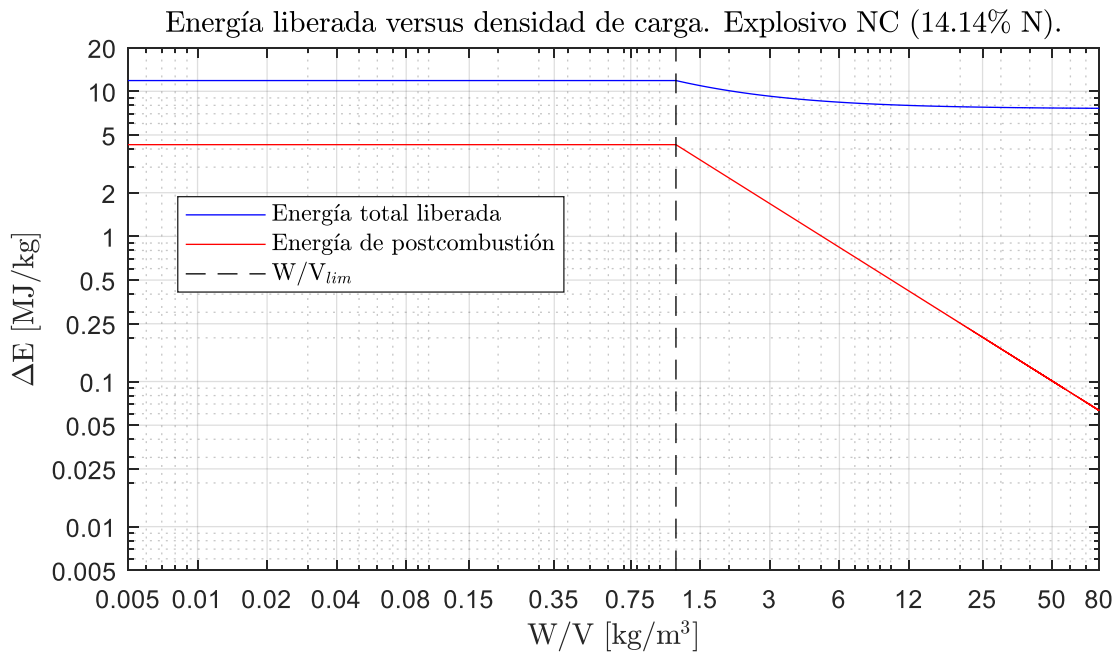


Figura 6-142: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NC (14.14% N).



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo NC (14.14% N).

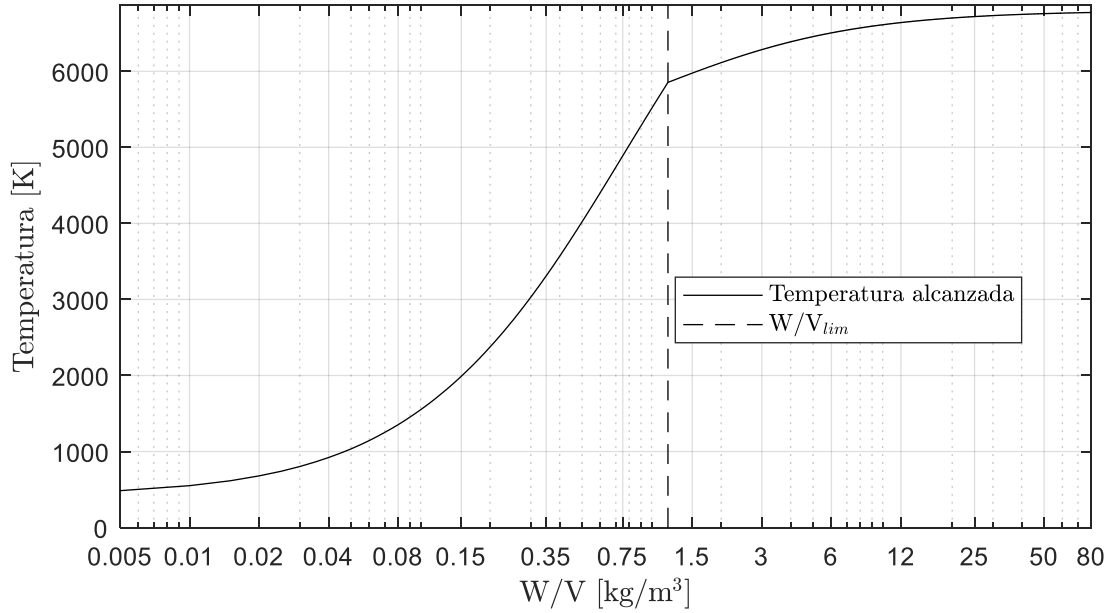


Figura 6-143: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NC (14.14% N).

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo NC (14.14% N).

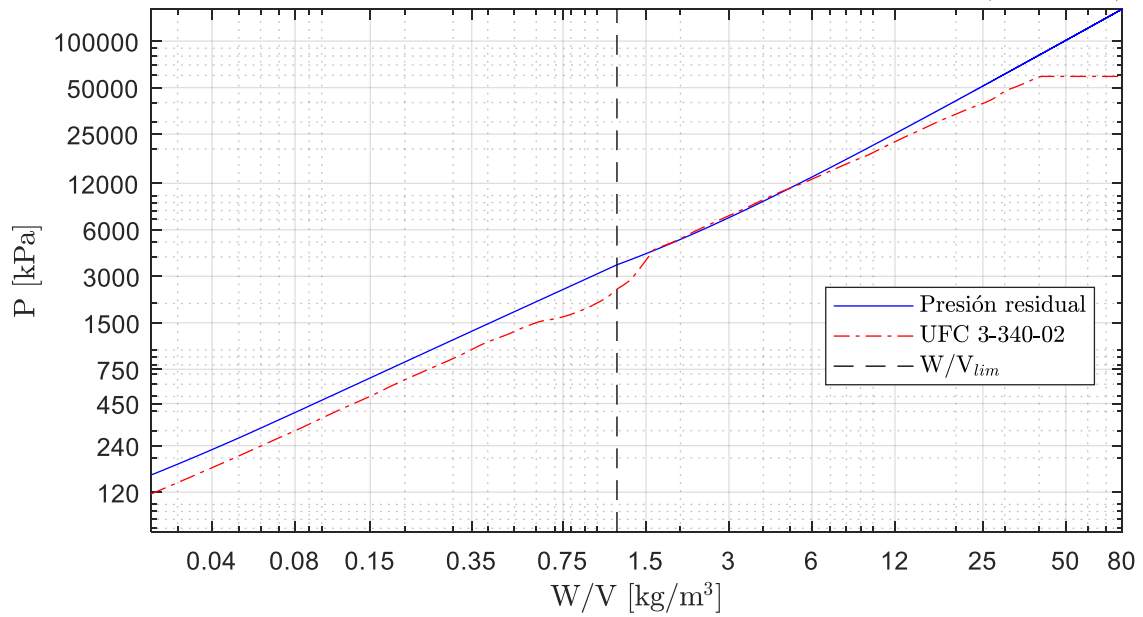


Figura 6-144: Presión residual relativa del sistema para explosivo NC (14.14% N).

A.2.37. NG

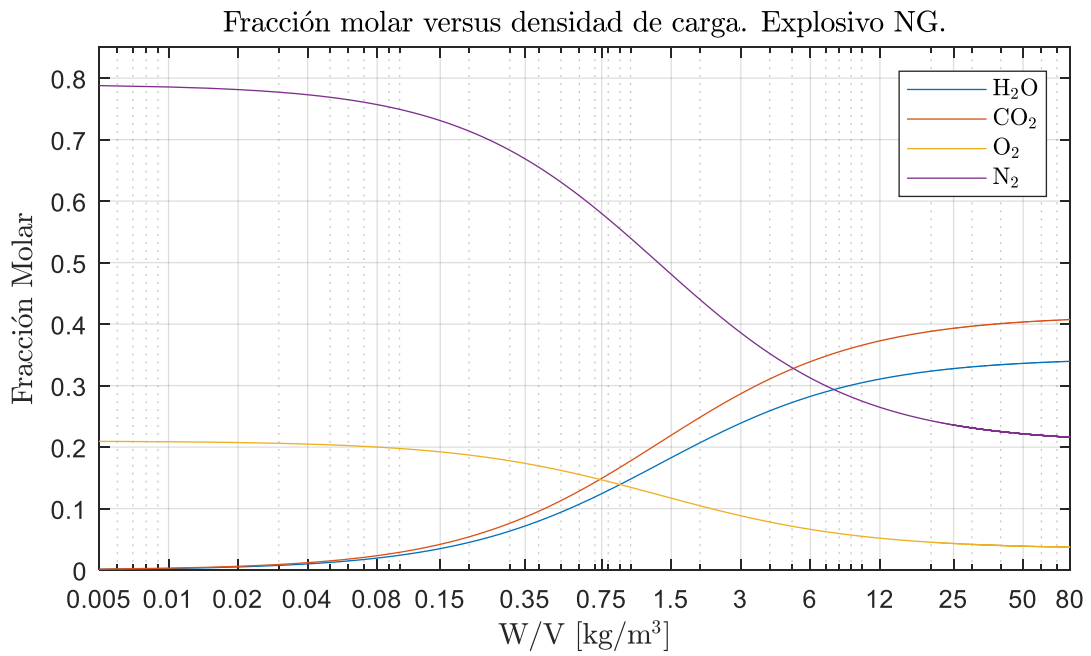


Figura 6-145: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NG.

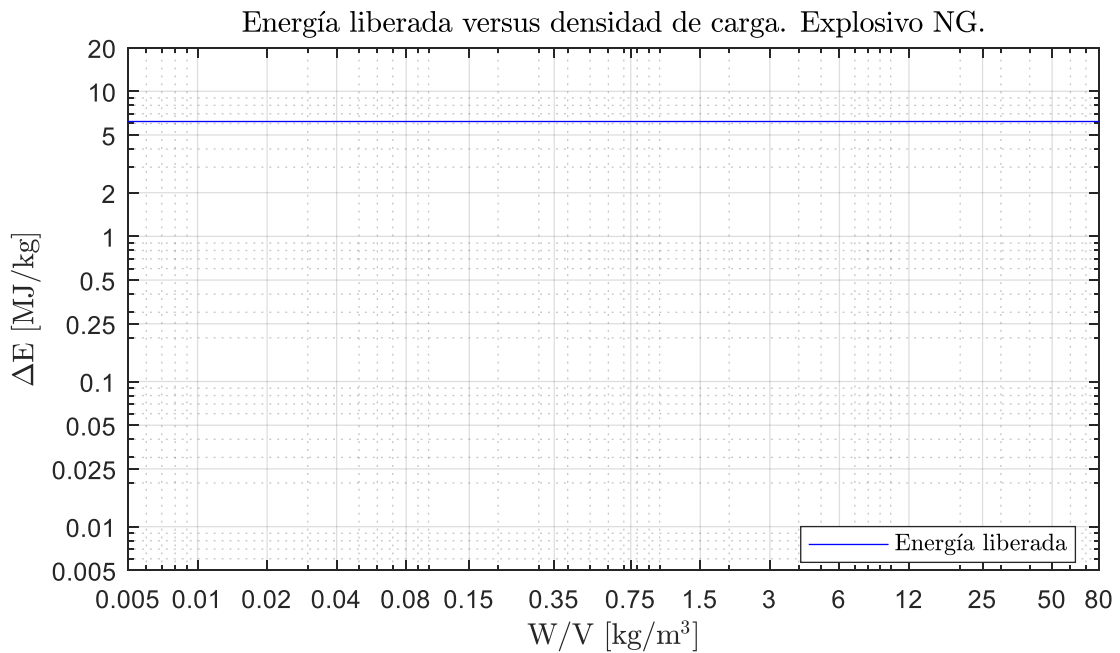


Figura 6-146: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NG.

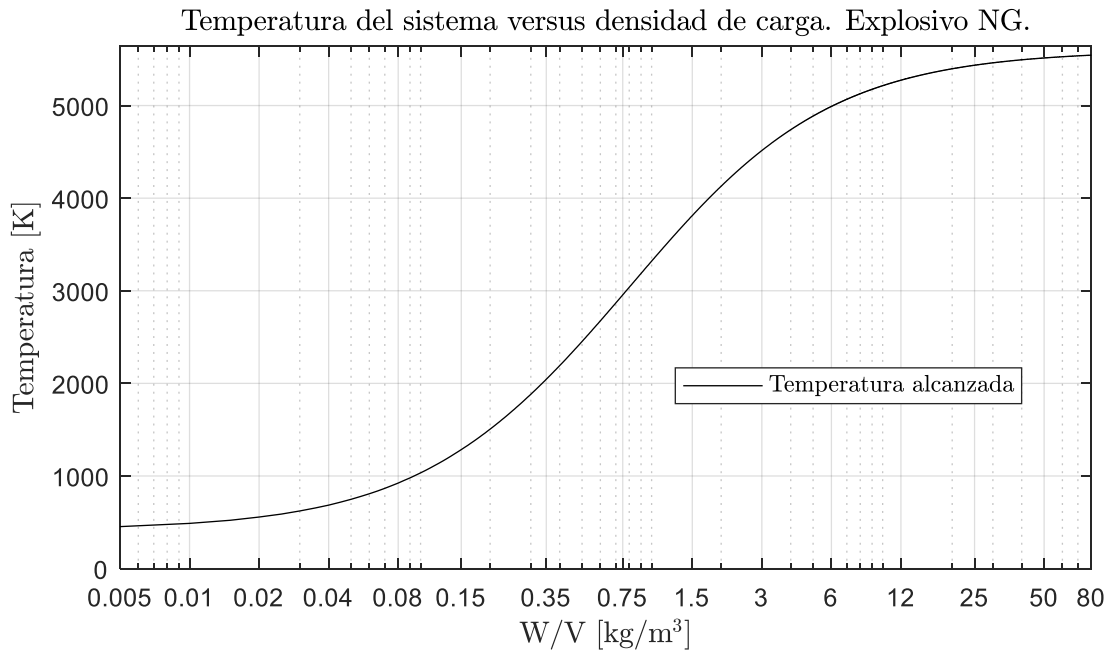


Figura 6-147: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NG.

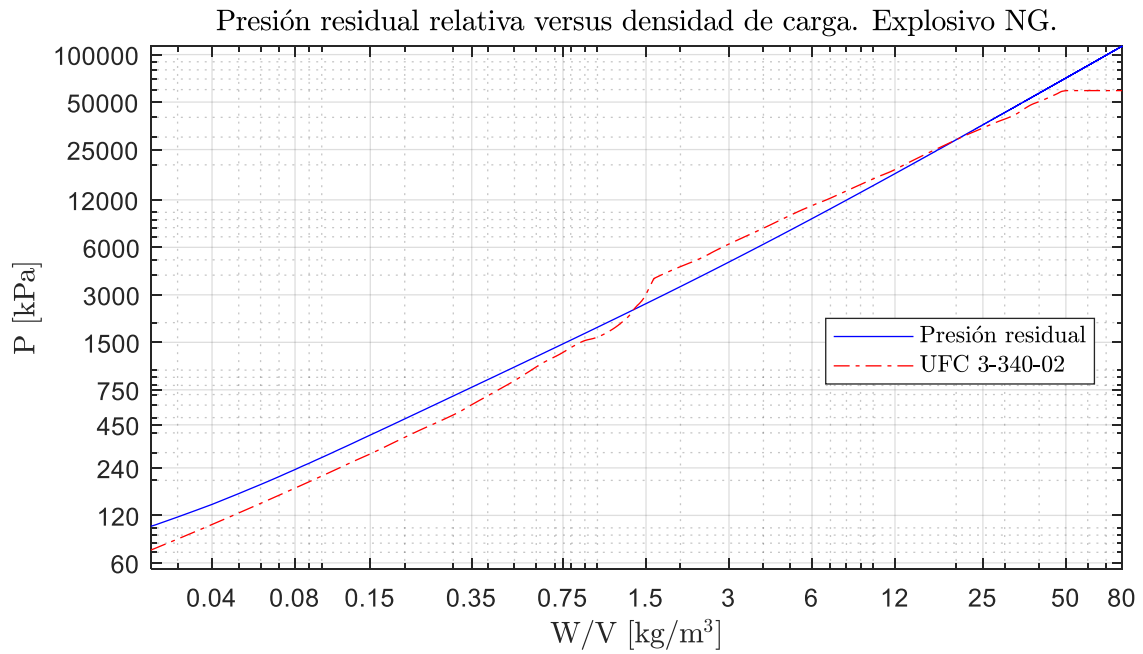


Figura 6-148: Presión residual relativa del sistema para explosivo NG.

A.2.38. NM

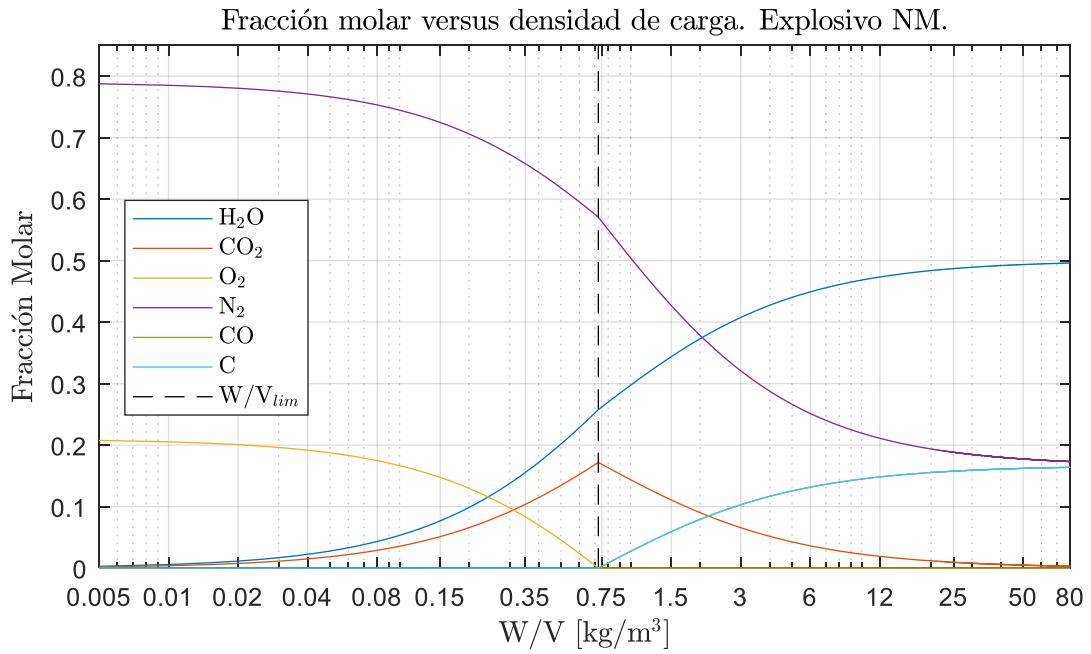


Figura 6-149: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NM.

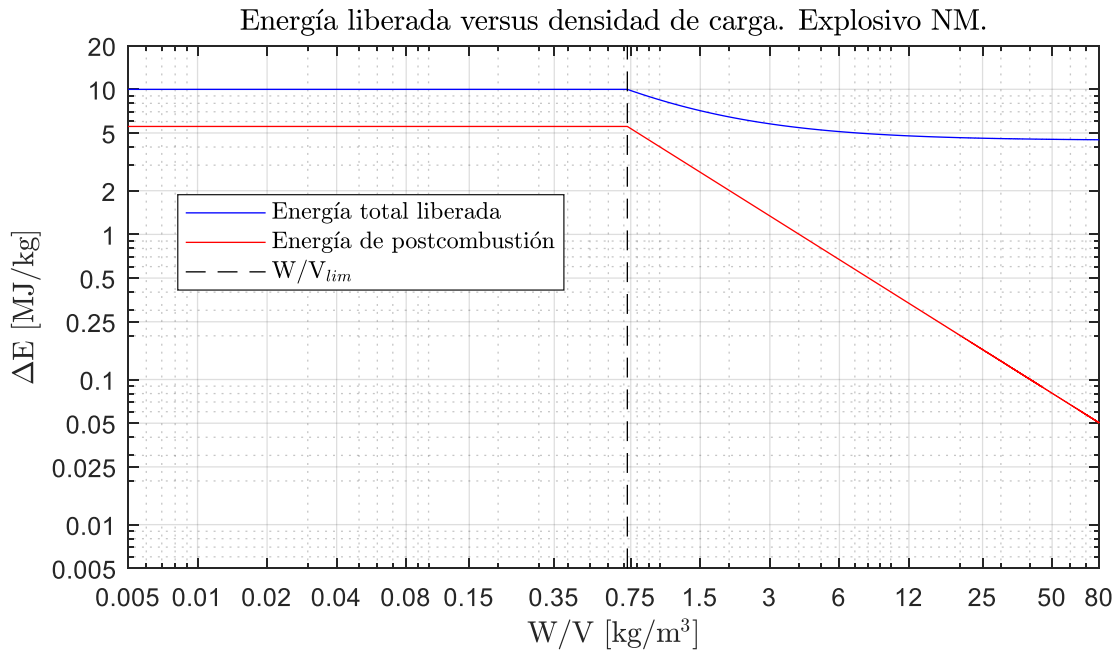


Figura 6-150: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NM.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo NM.

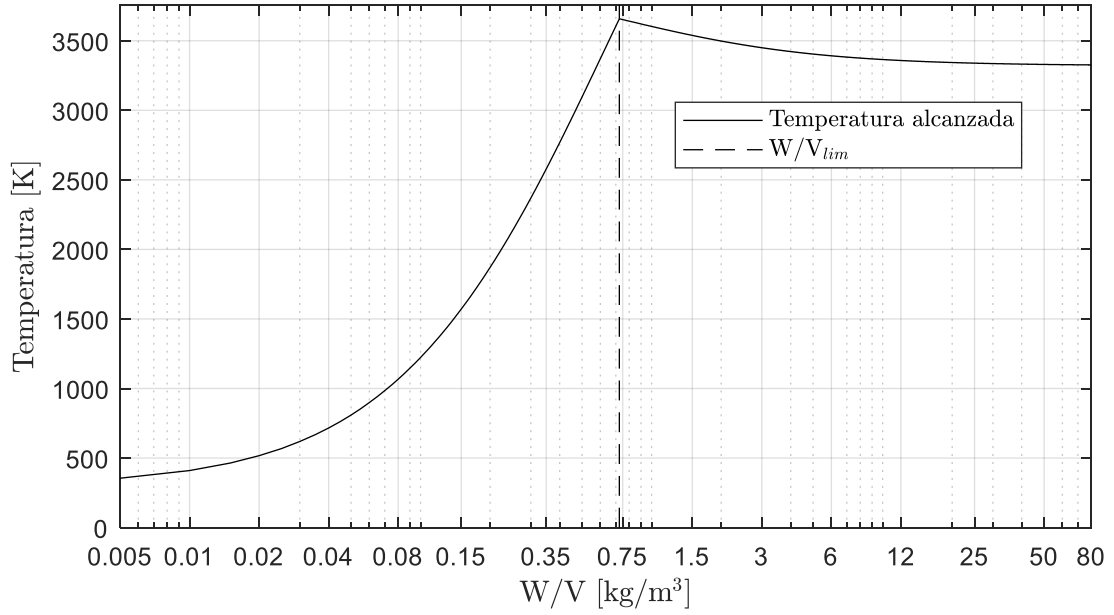


Figura 6-151: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NM.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo NM.

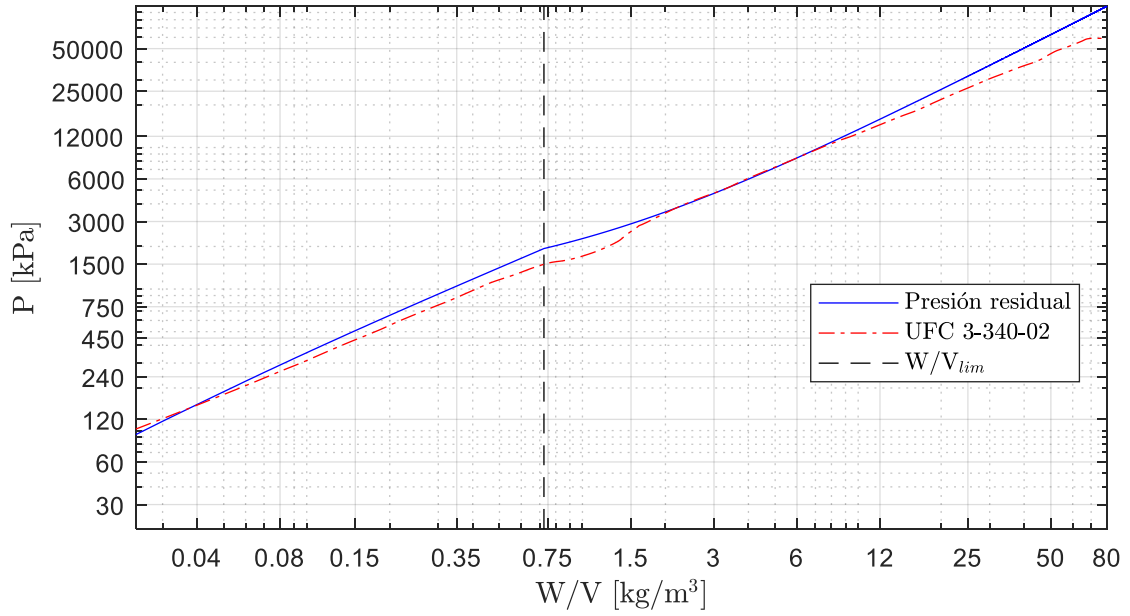


Figura 6-152: Presión residual relativa del sistema para explosivo NM.

A.2.39. NQ

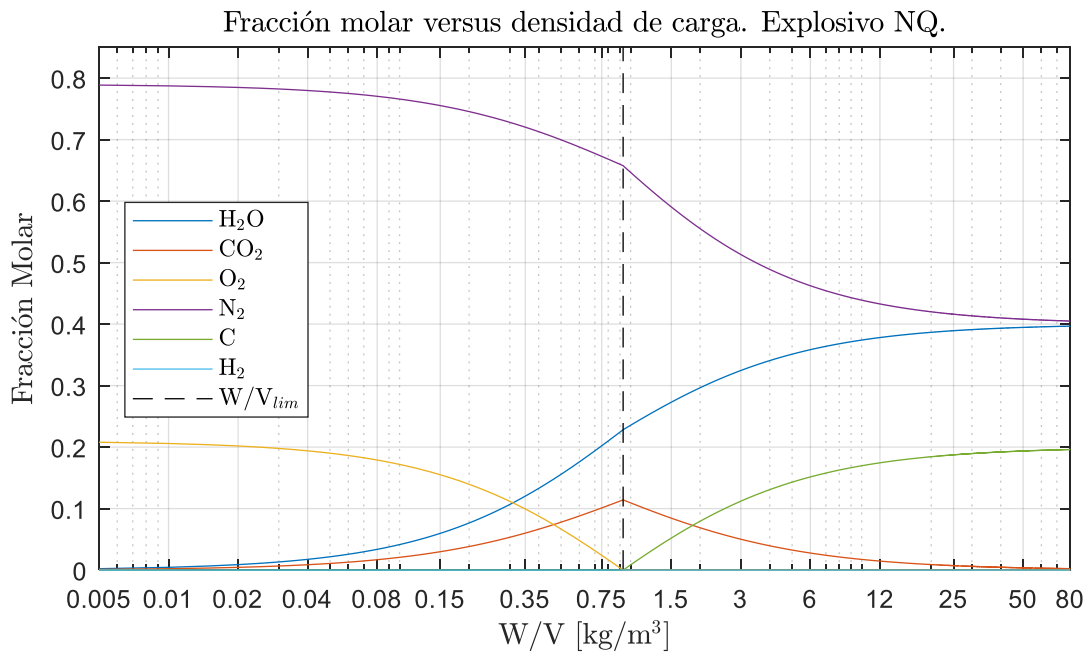


Figura 6-153: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo NQ.

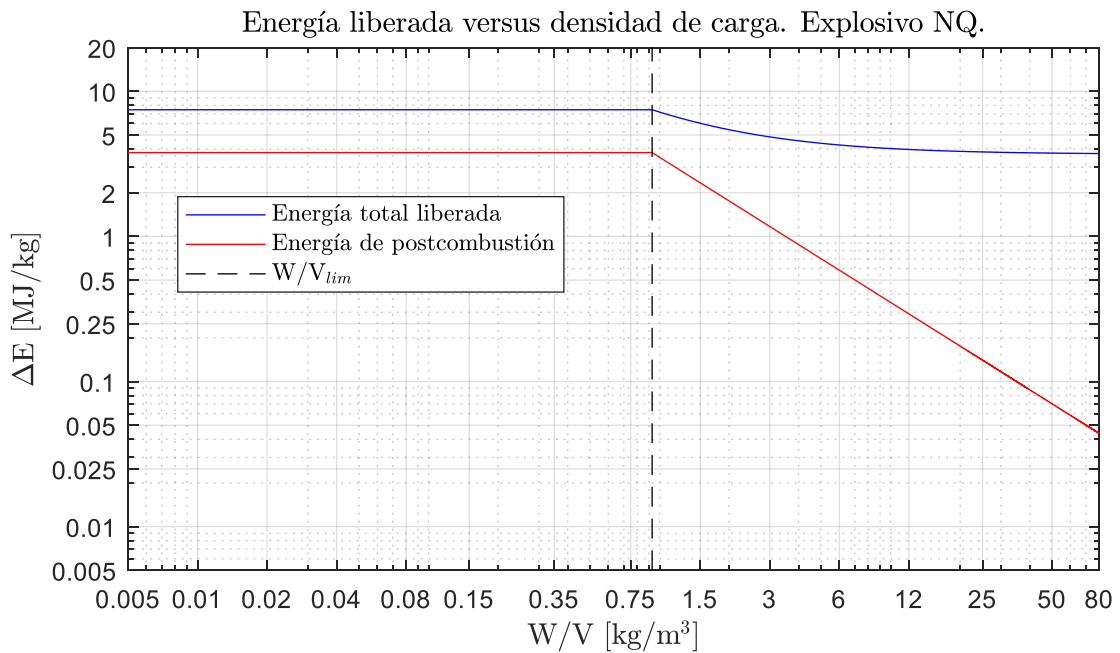


Figura 6-154: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo NQ.

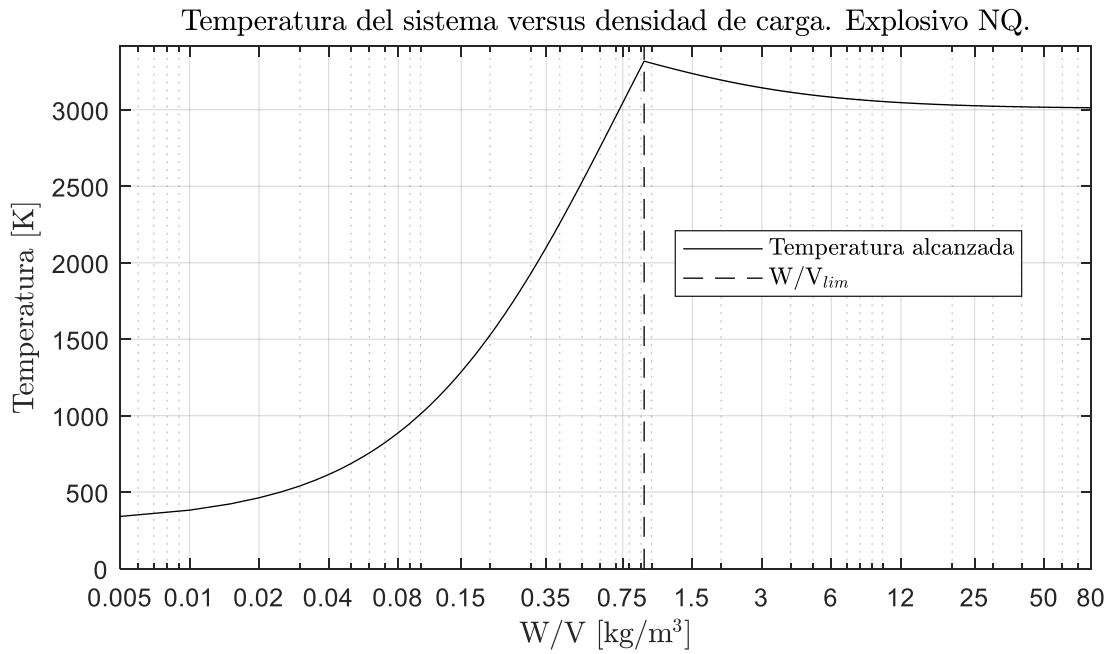


Figura 6-155: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo NQ.

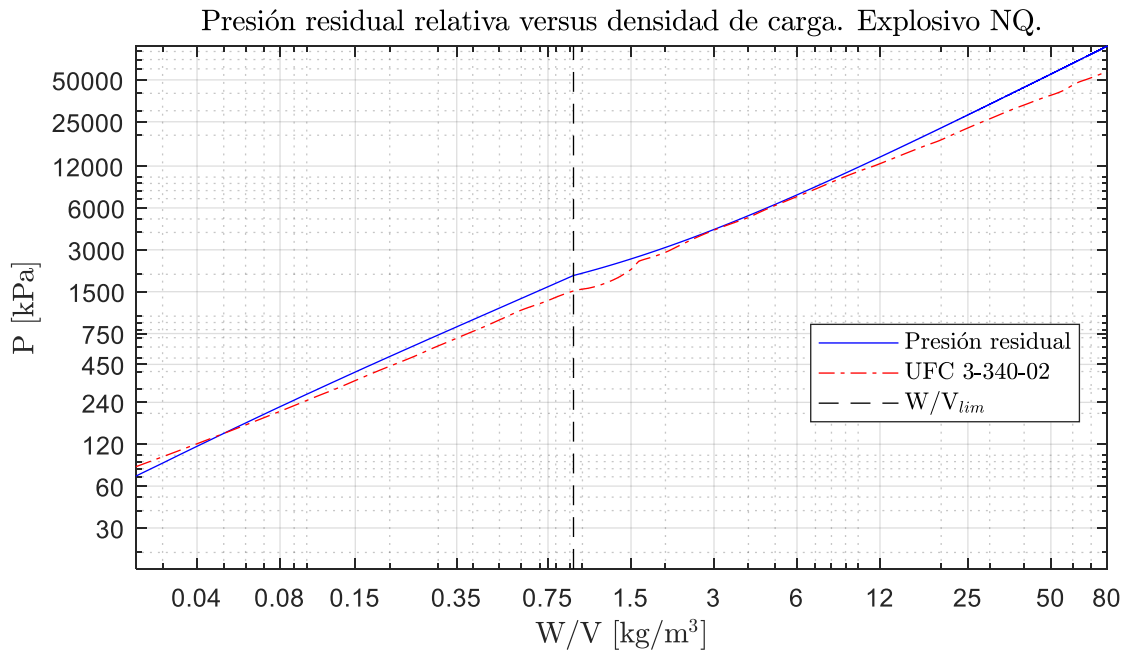


Figura 6-156: Presión residual relativa del sistema para explosivo NQ.

A.2.40. PBX-9007

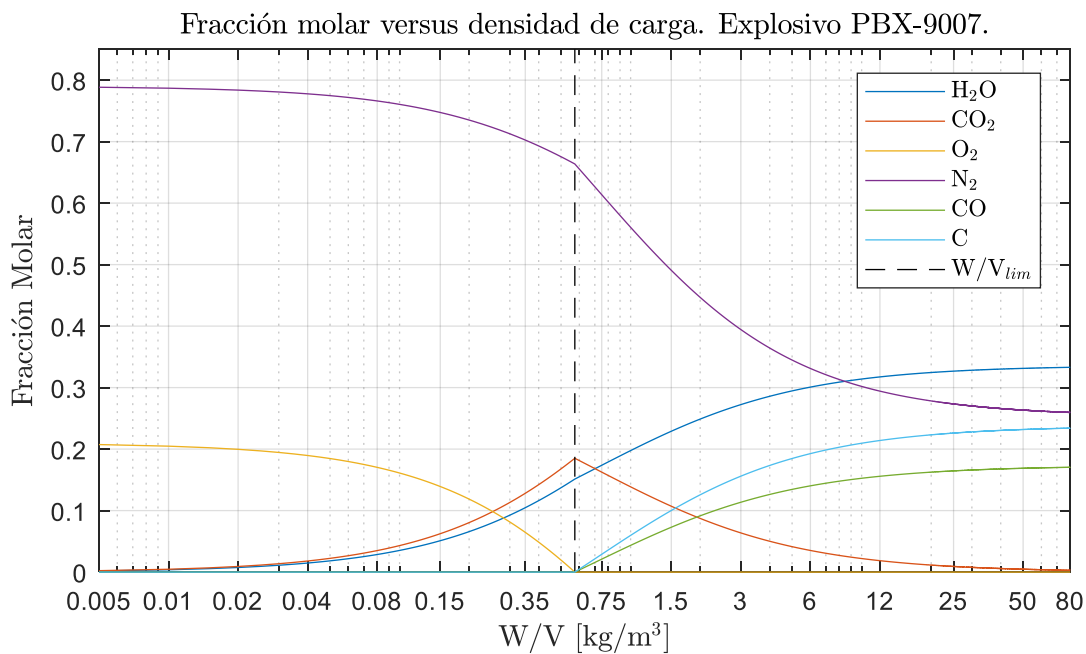


Figura 6-157: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9007.

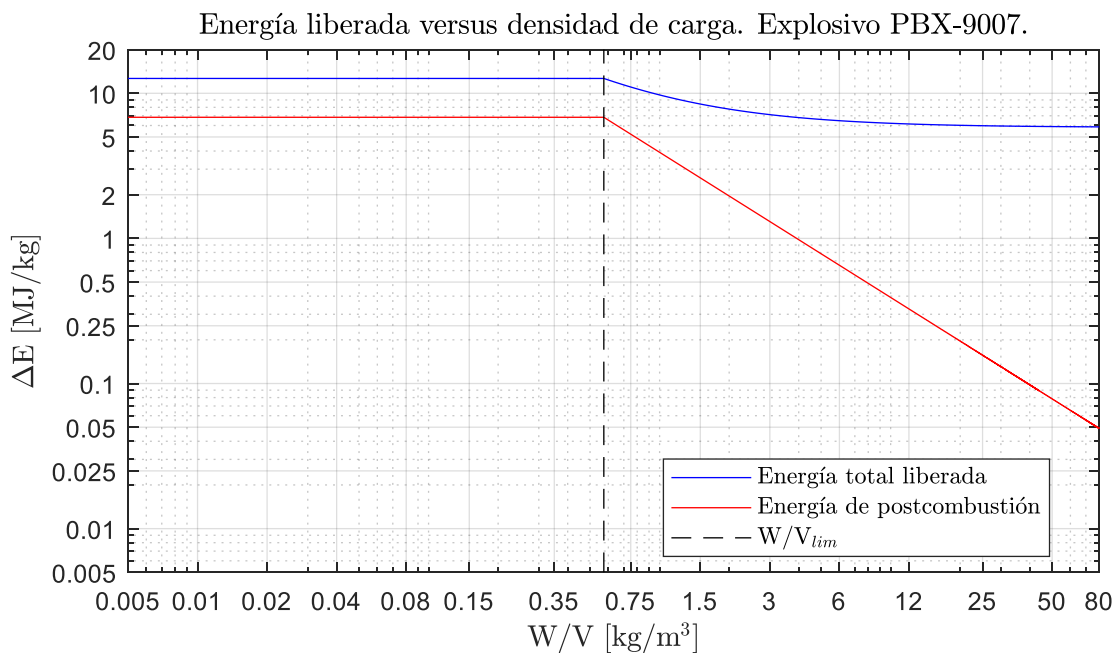


Figura 6-158: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9007.



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9007.

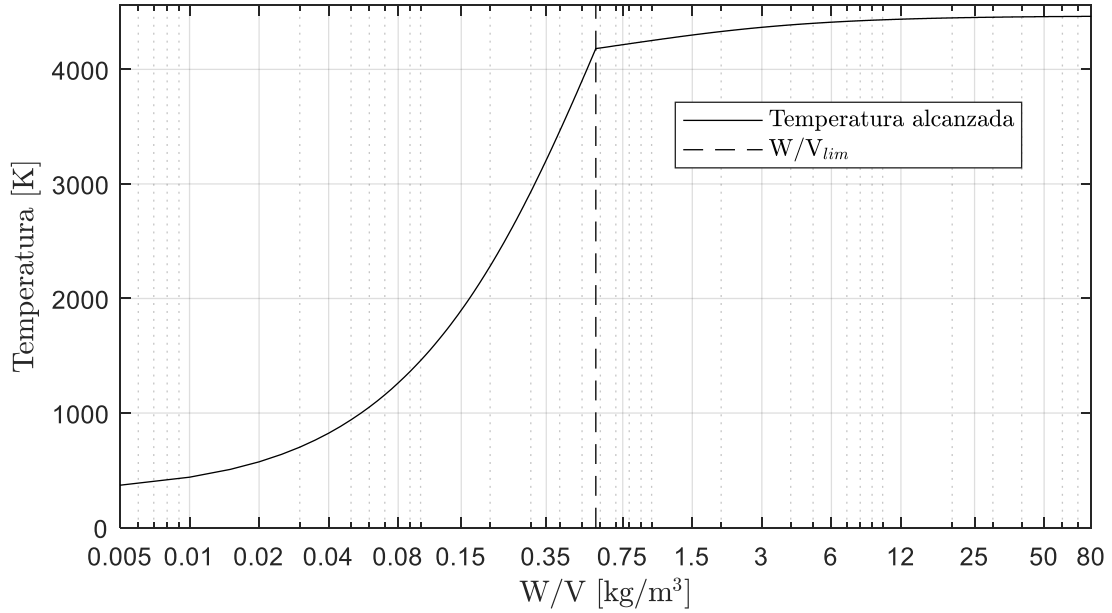


Figura 6-159: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9007.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9007.

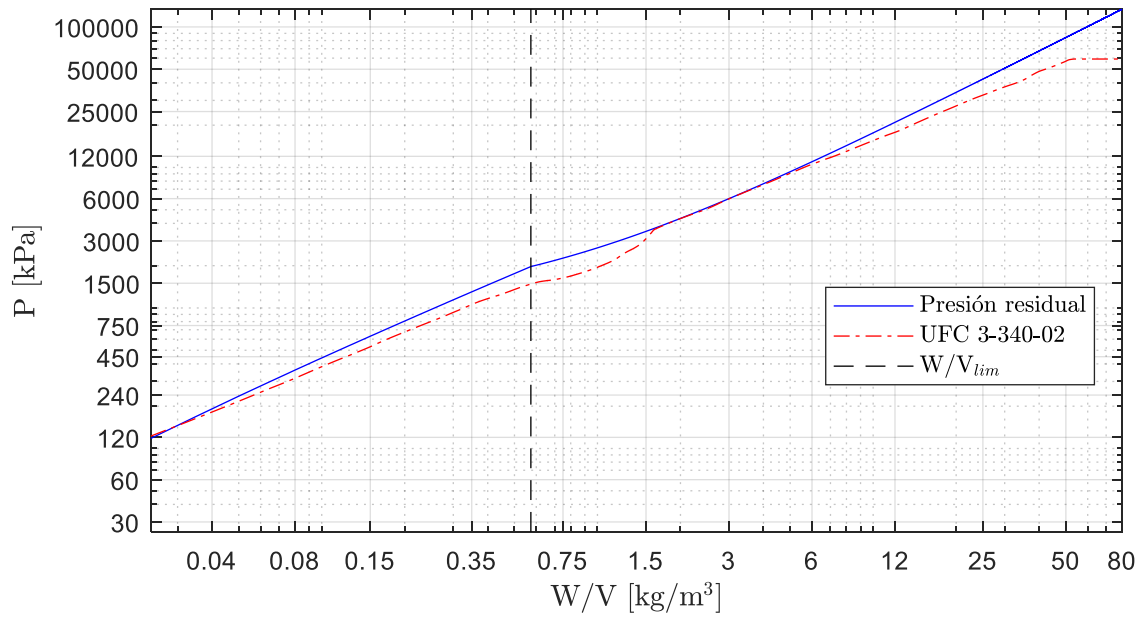


Figura 6-160: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9007.

A.2.41. PBX-9010

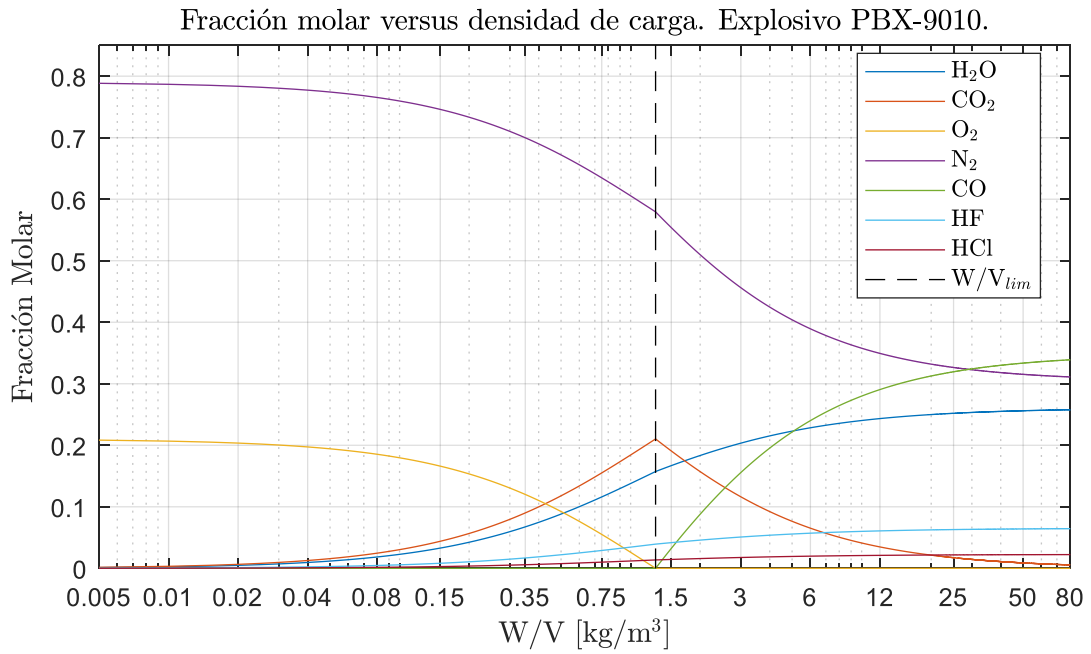


Figura 6-161: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9010.

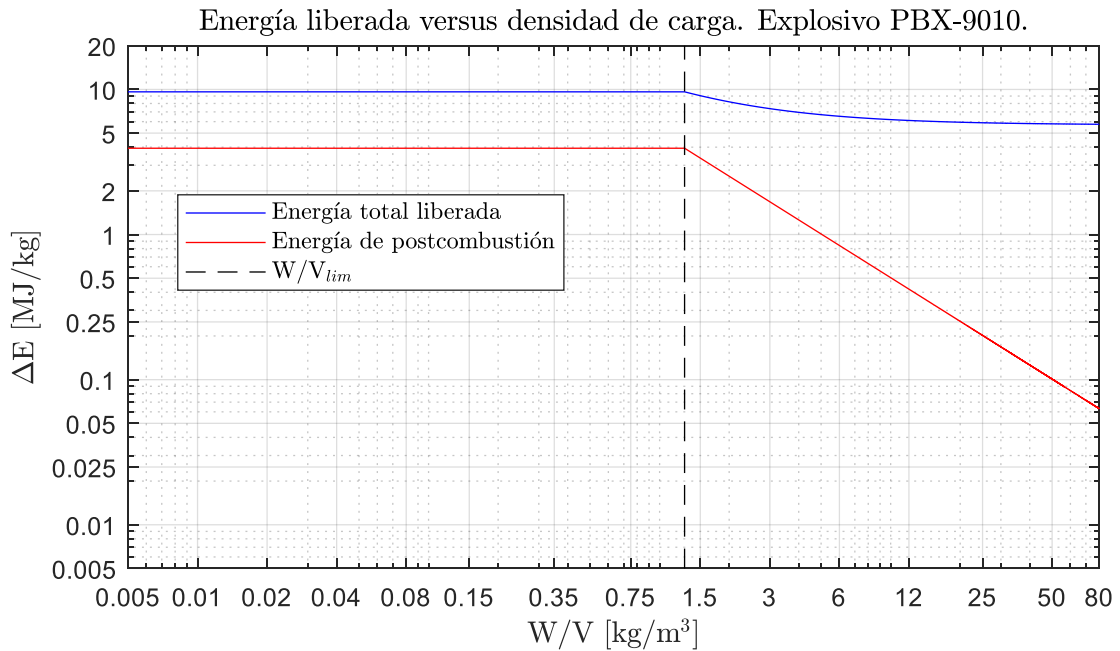


Figura 6-162: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9010.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9010.

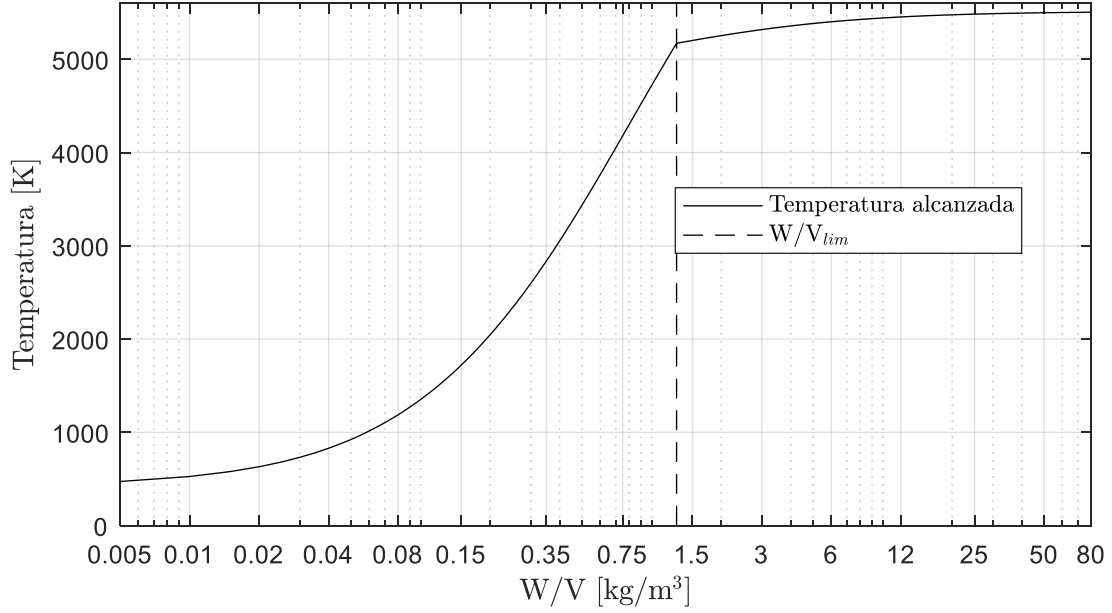


Figura 6-163: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9010.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9010.

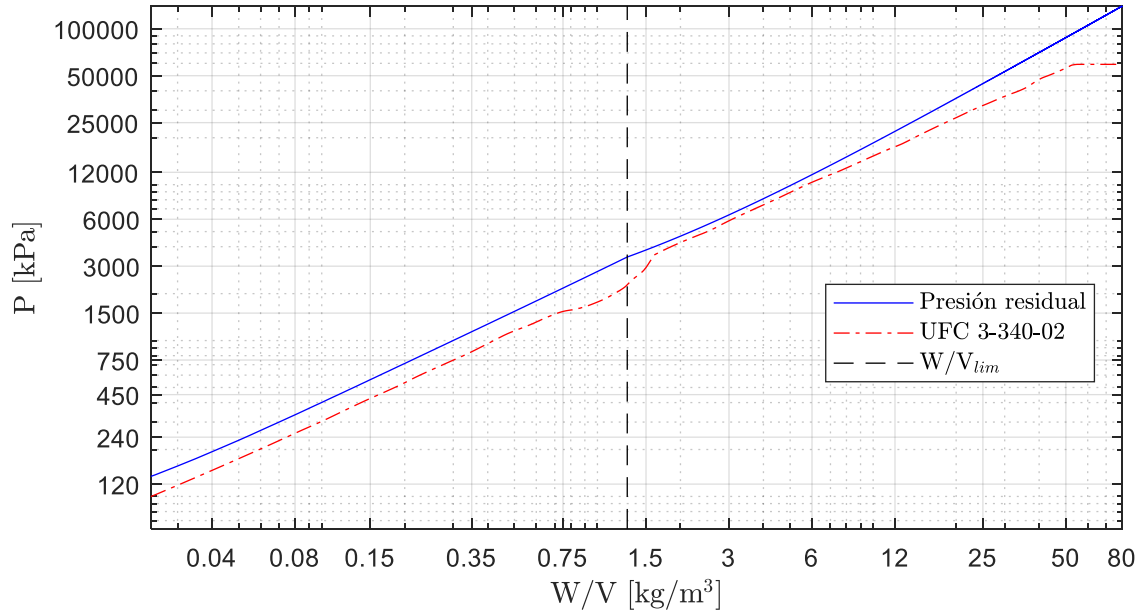


Figura 6-164: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9010.

A.2.42. PBX-9011

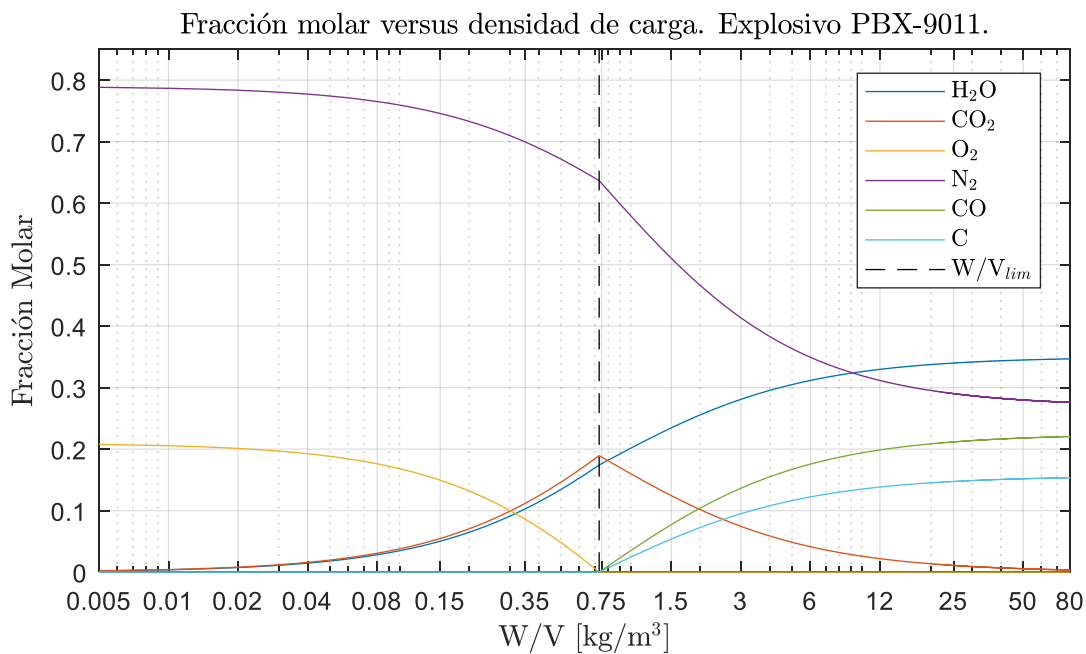


Figura 6-165: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9011.

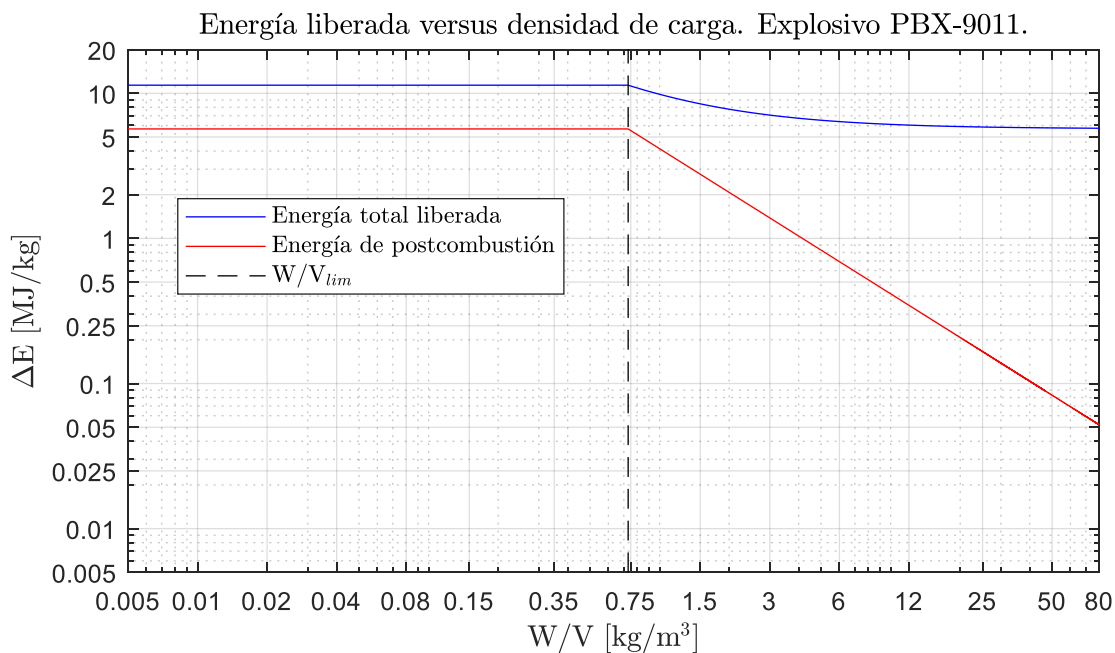


Figura 6-166: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9011.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9011.

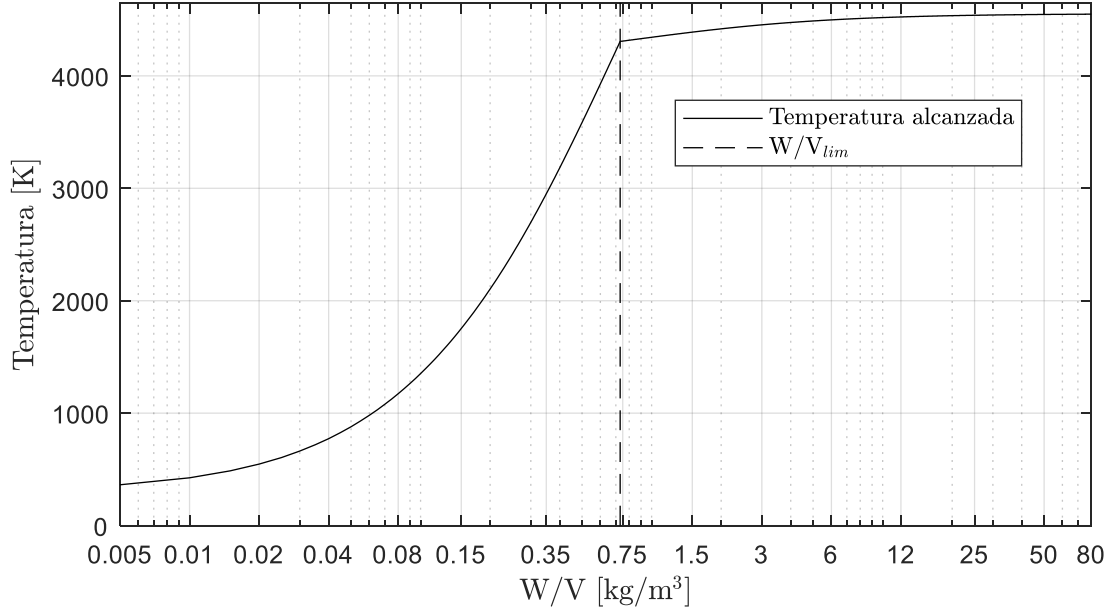


Figura 6-167: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9011.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9011.

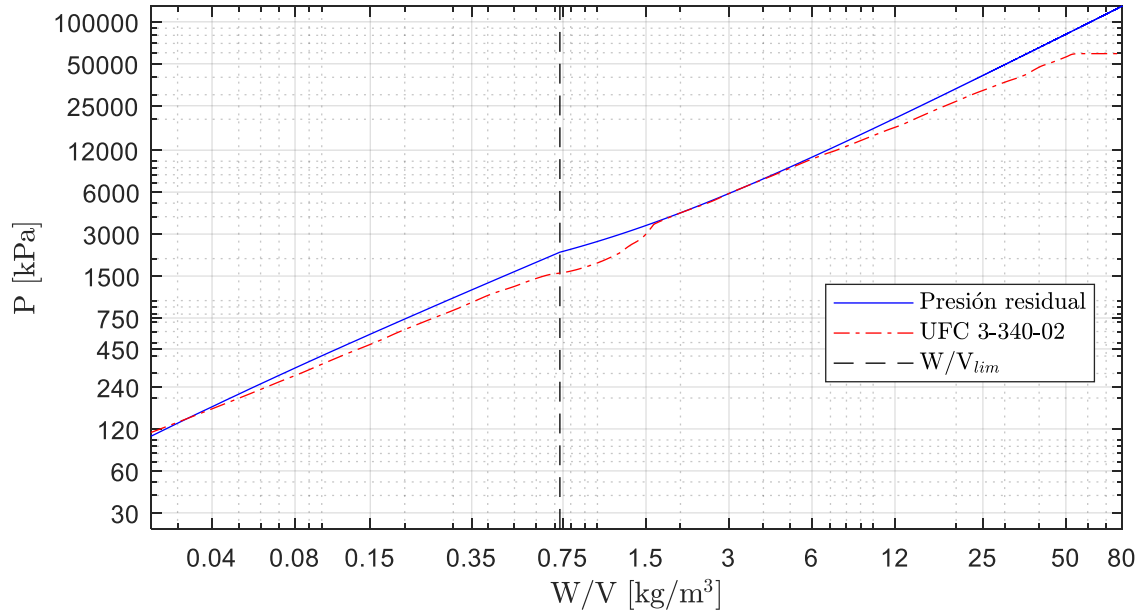


Figura 6-168: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9011.

A.2.43. PBX-9205

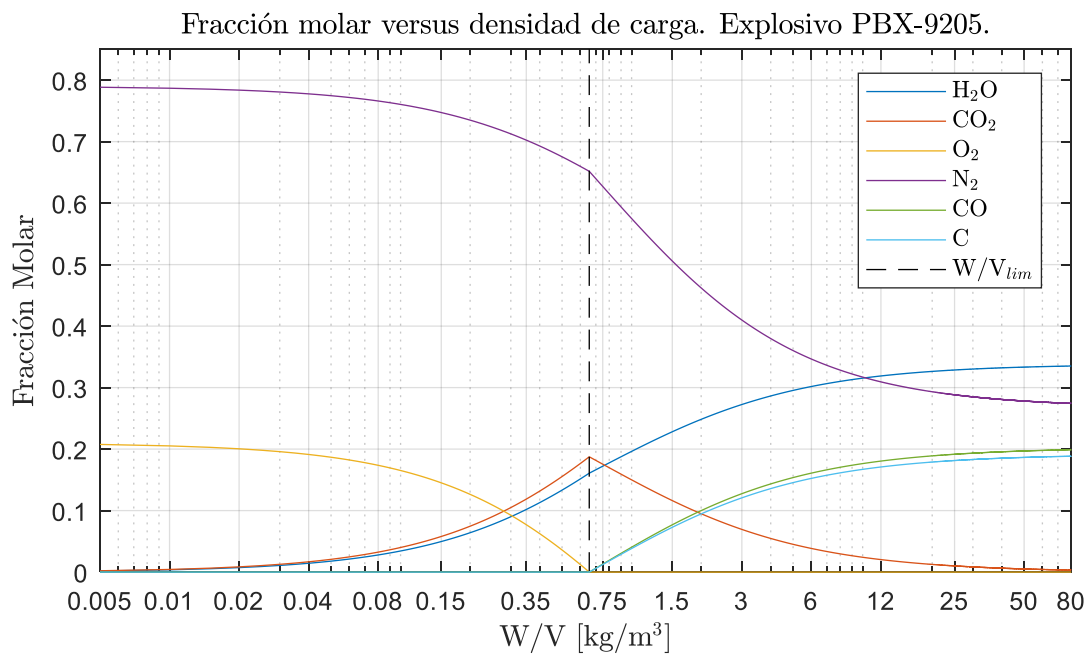


Figura 6-169: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9205.

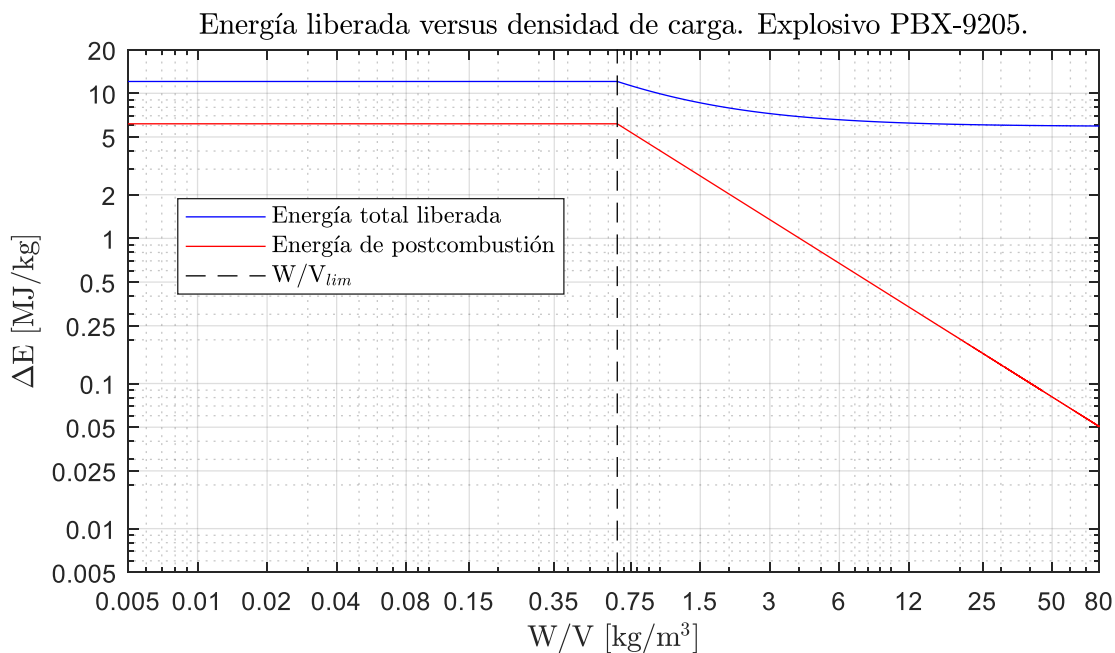


Figura 6-170: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9205.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9205.

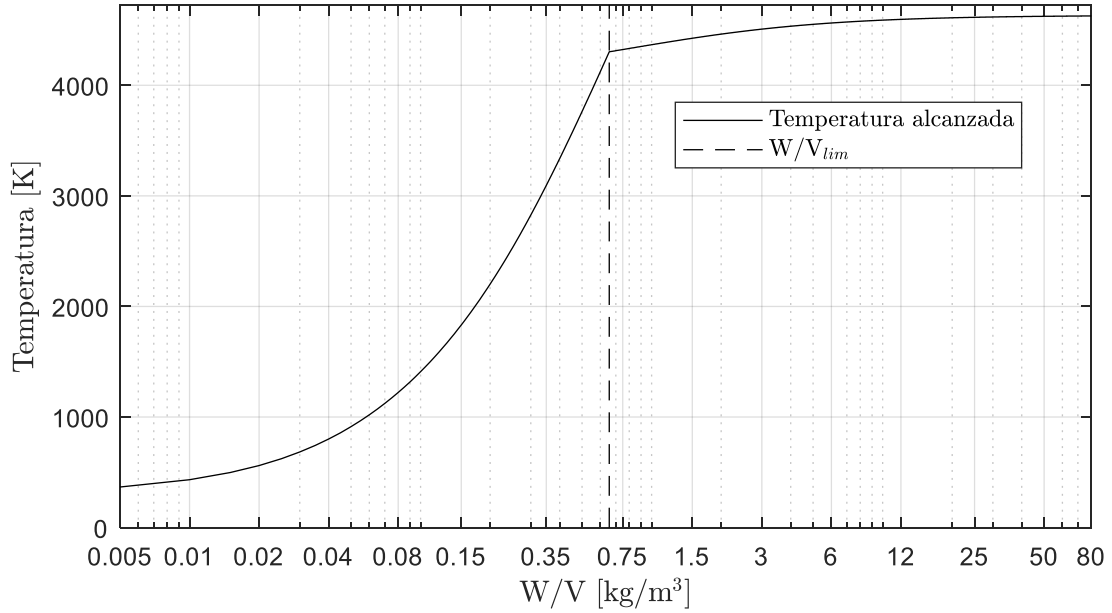


Figura 6-171: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9205.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9205.

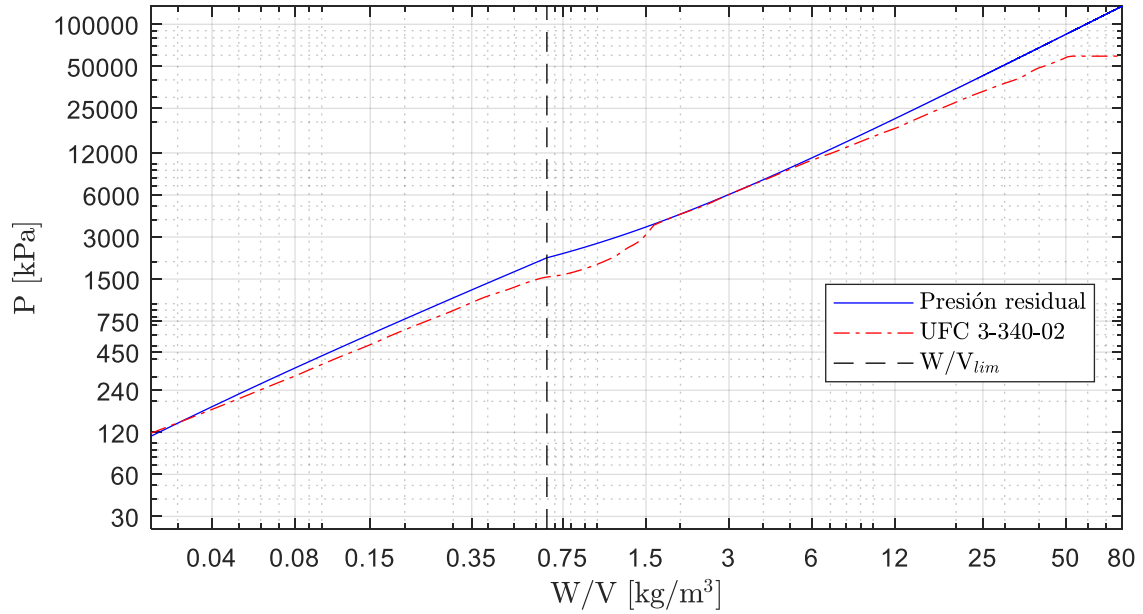


Figura 6-172: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9205.

A.2.44. PBX-9407

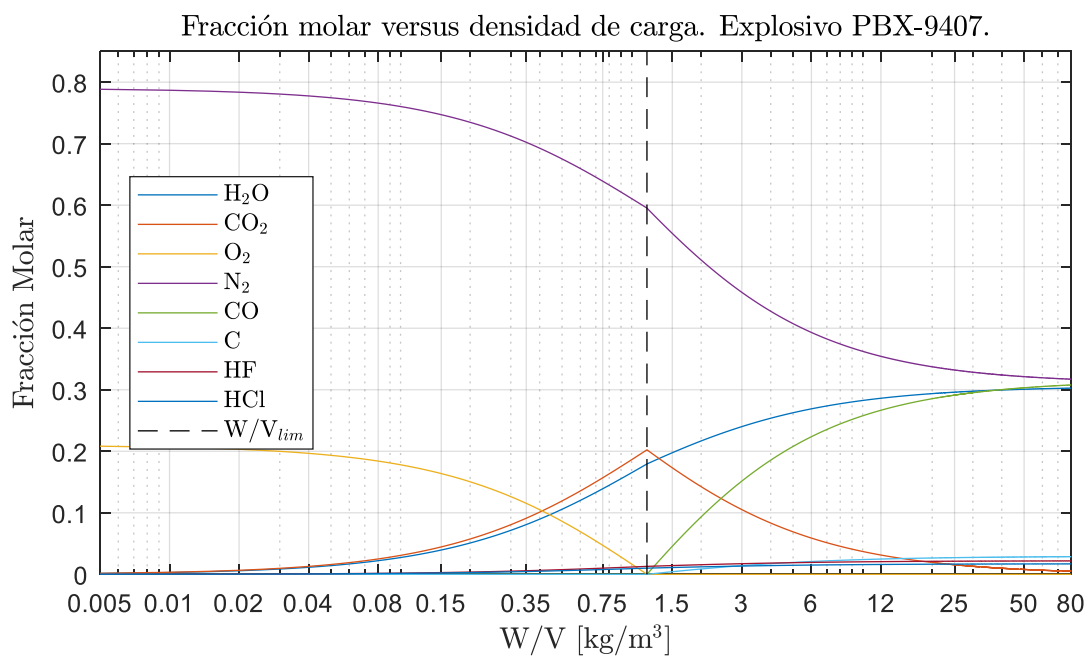


Figura 6-173: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9407.

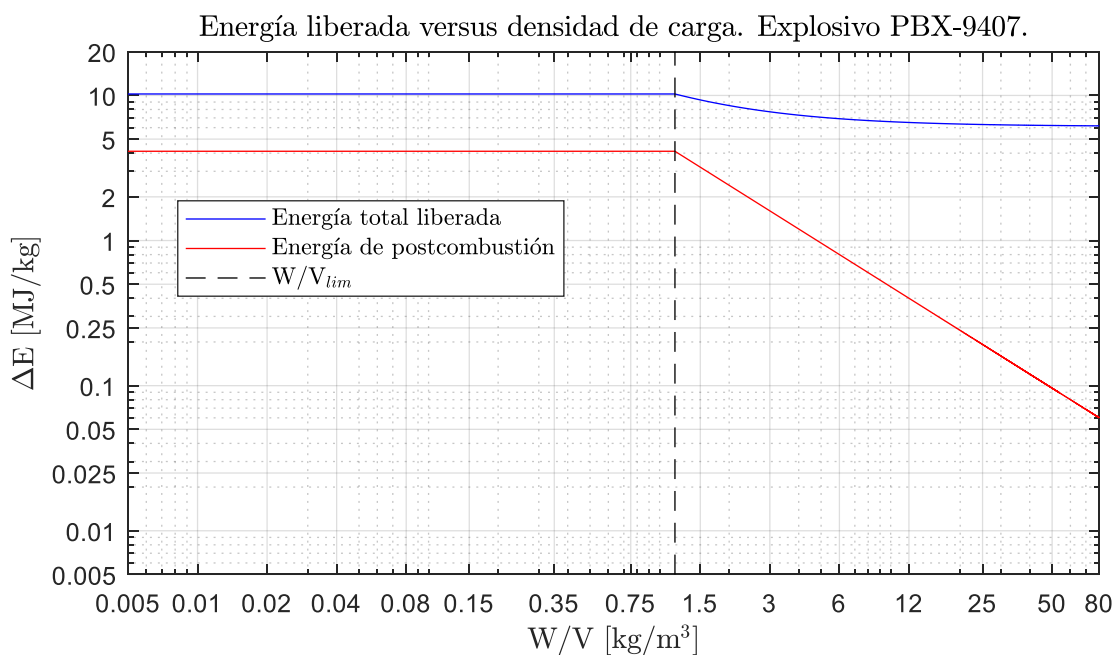


Figura 6-174: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9407.



Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9407.

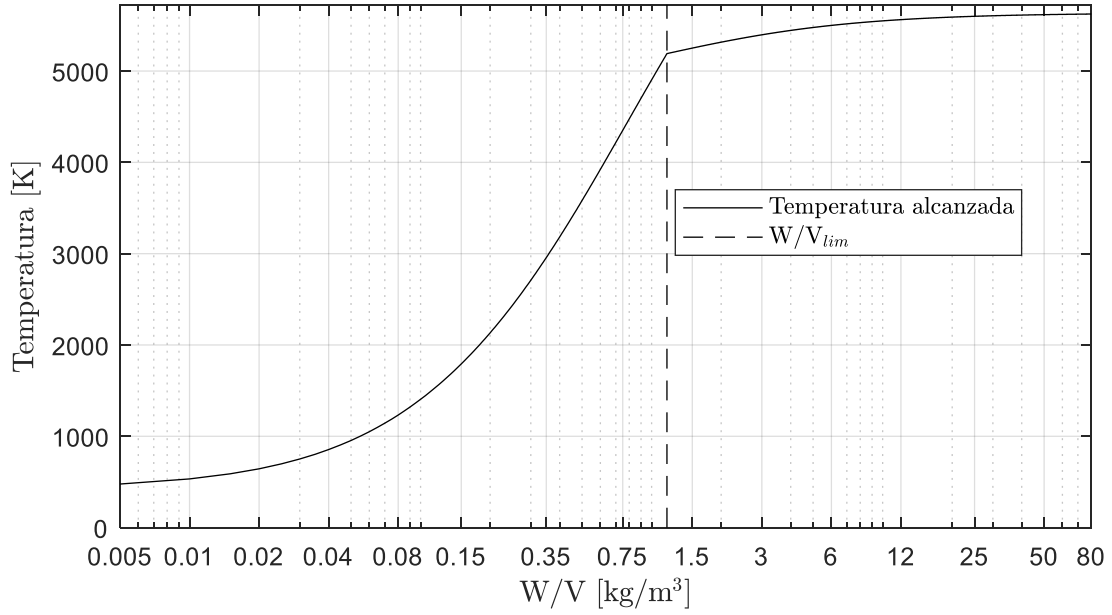


Figura 6-175: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9407.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9407.

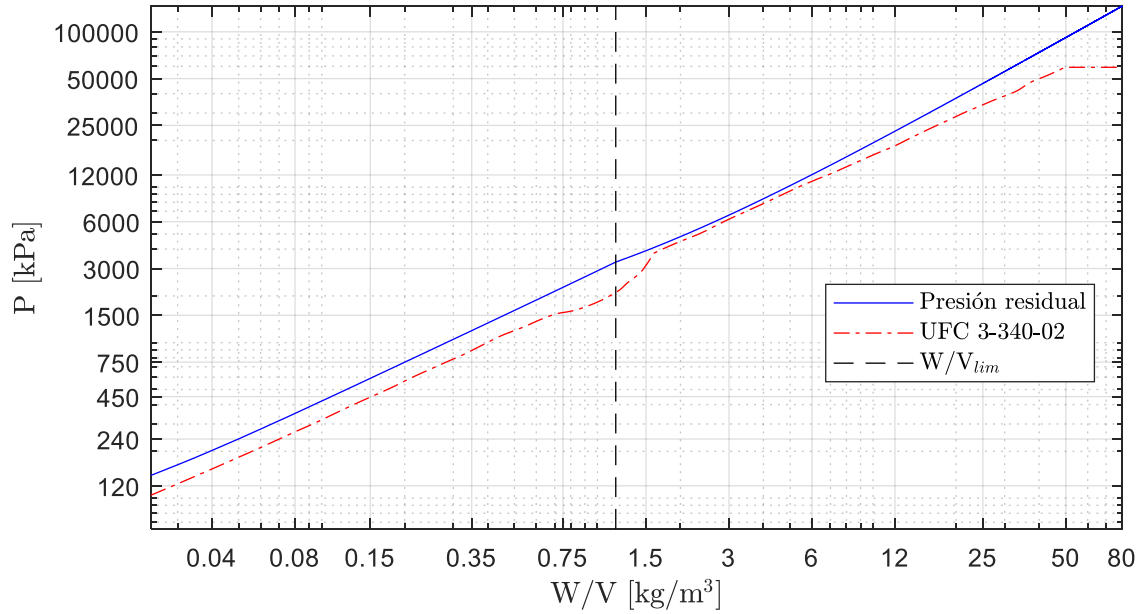


Figura 6-176: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9407.

A.2.45. PBX-9501

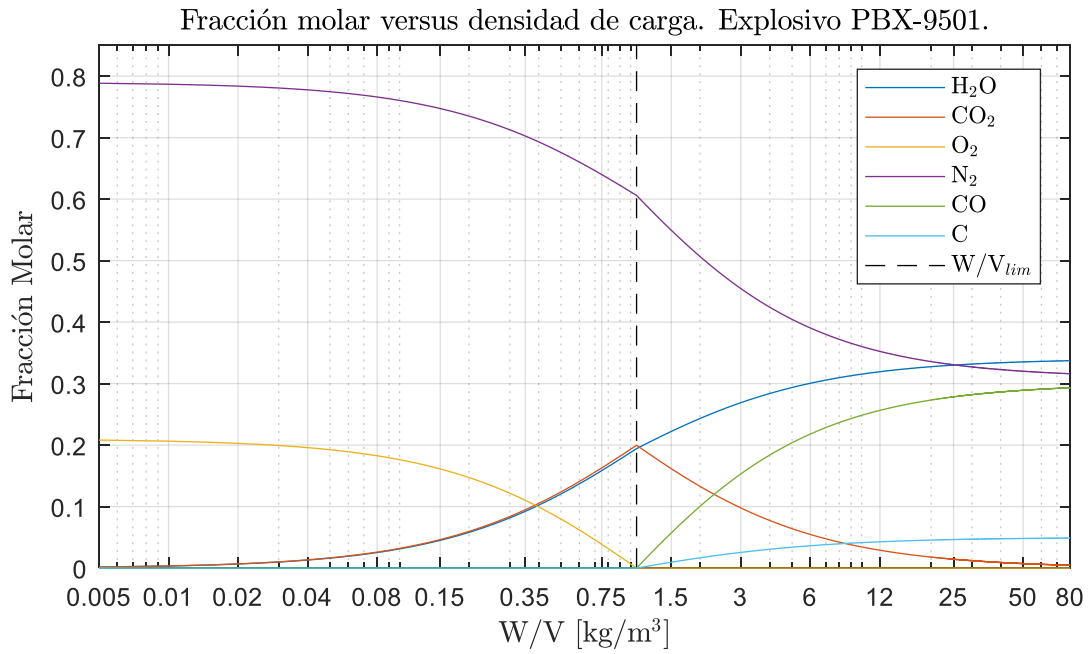


Figura 6-177: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9501.

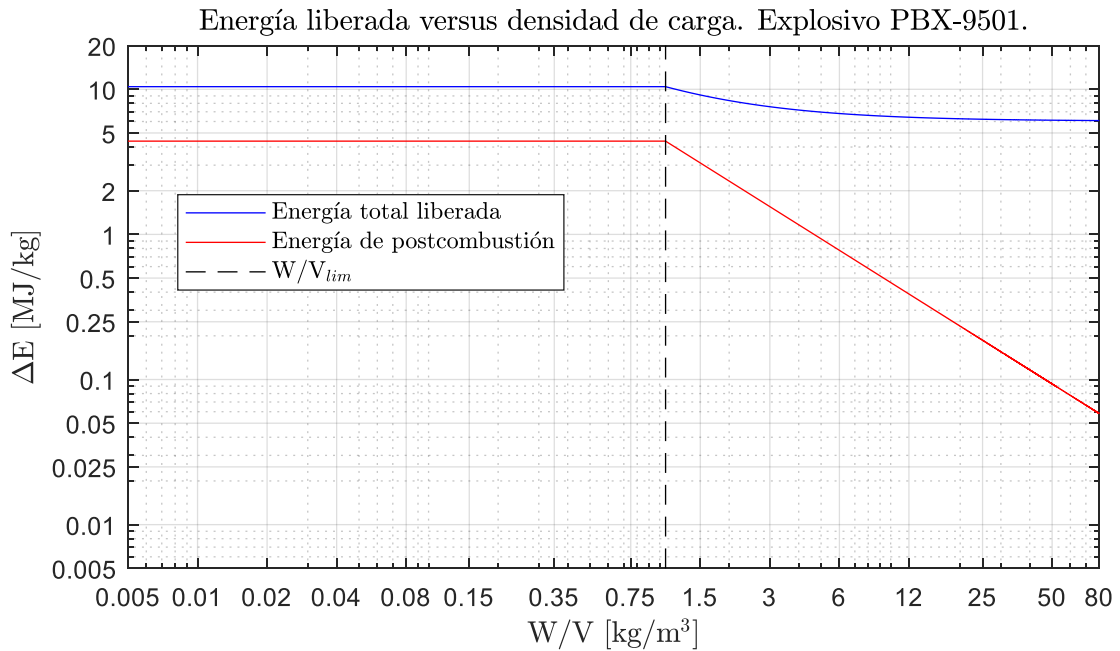


Figura 6-178: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9501.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9501.

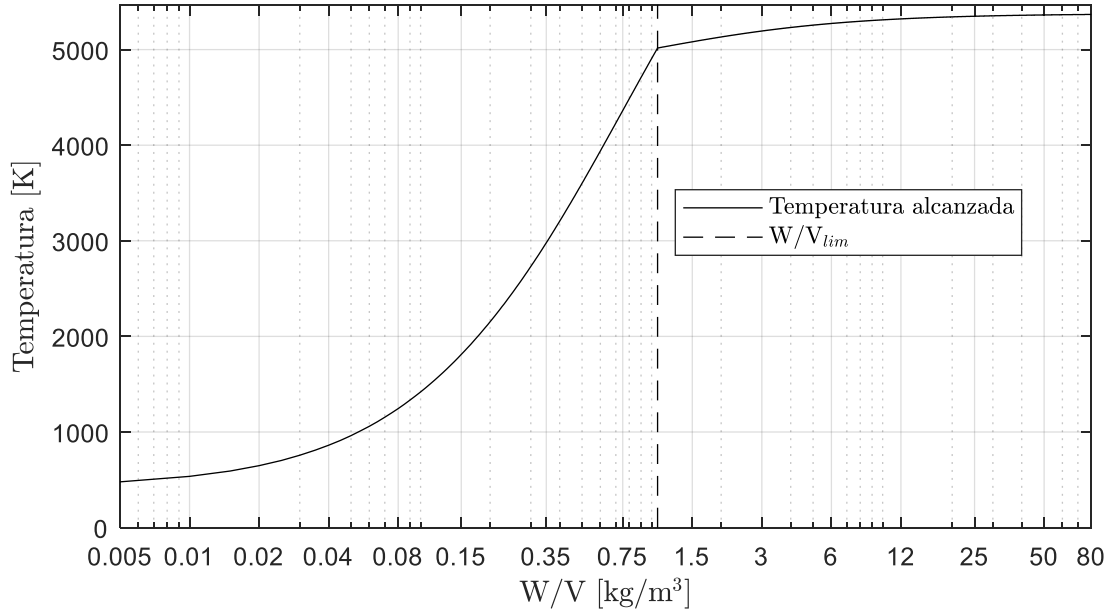


Figura 6-179: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9501.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9501.

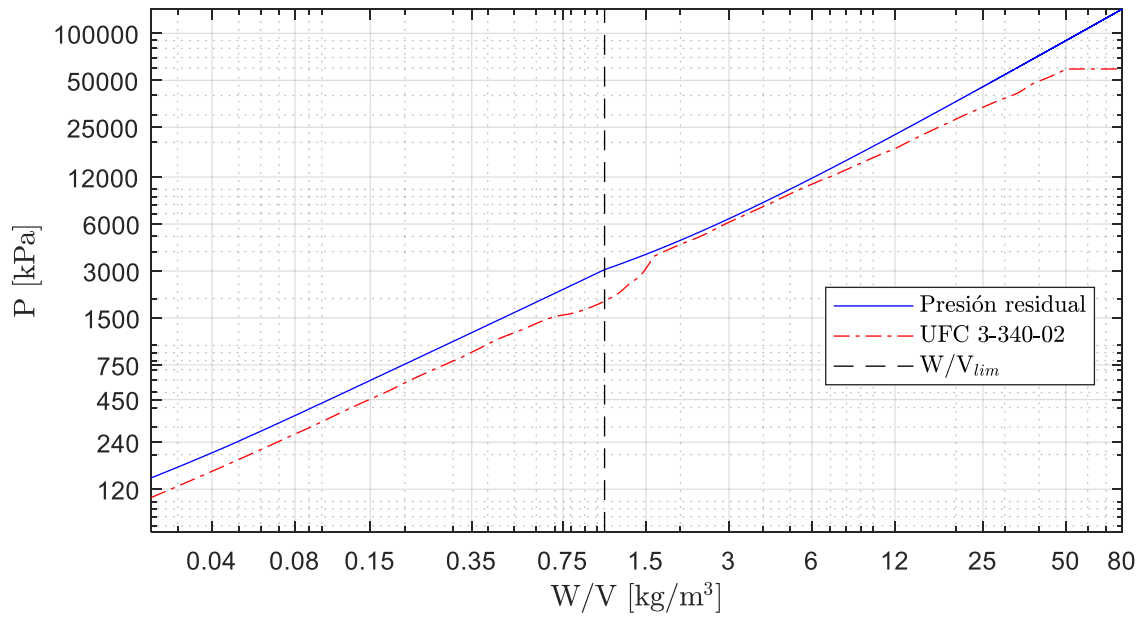


Figura 6-180: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9501.

A.2.46. PBX-9503

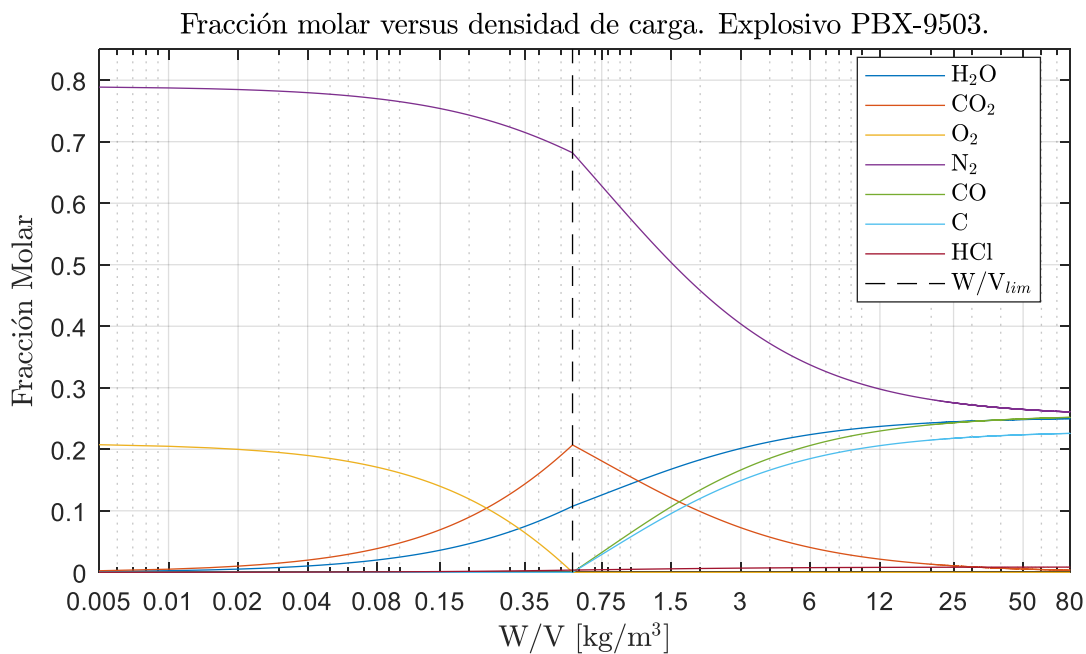


Figura 6-181: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PBX-9503.

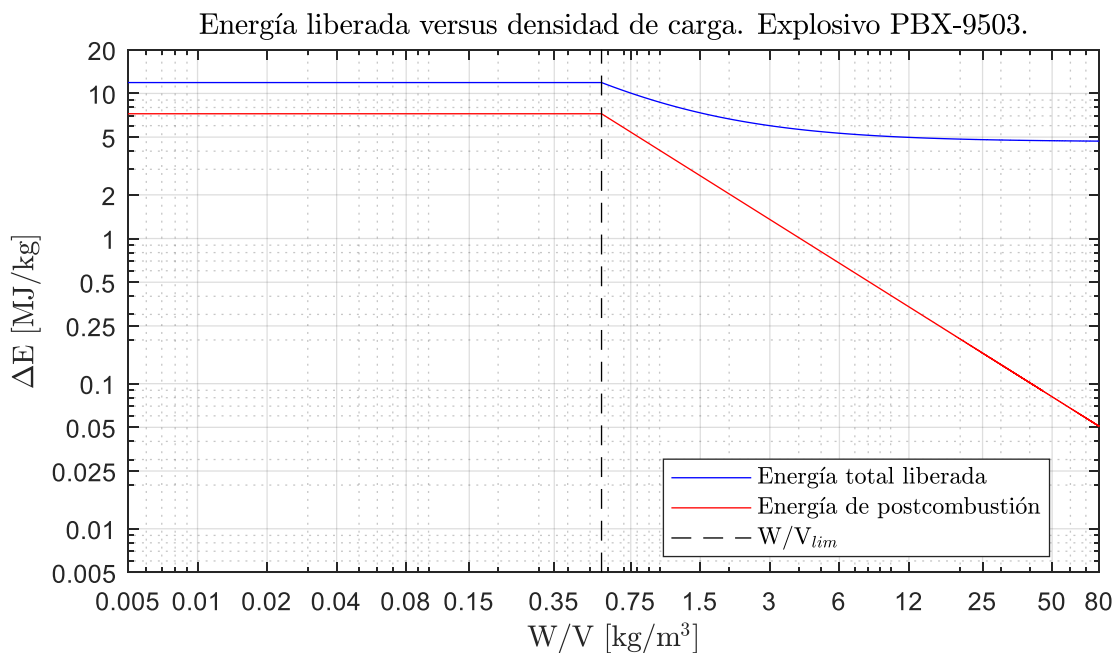


Figura 6-182: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PBX-9503.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo PBX-9503.

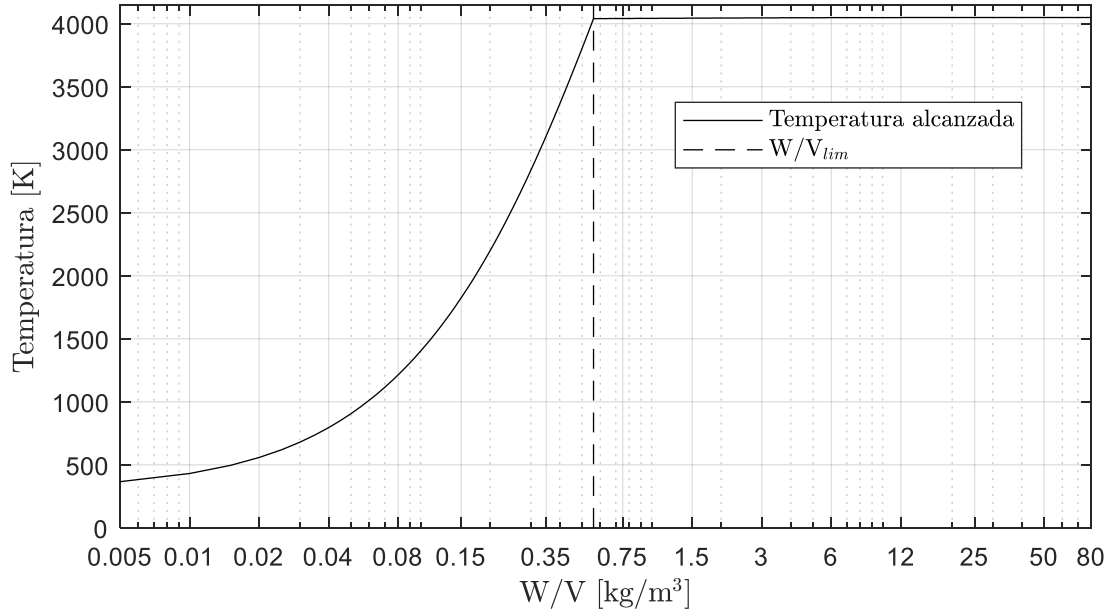


Figura 6-183: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PBX-9503.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo PBX-9503.

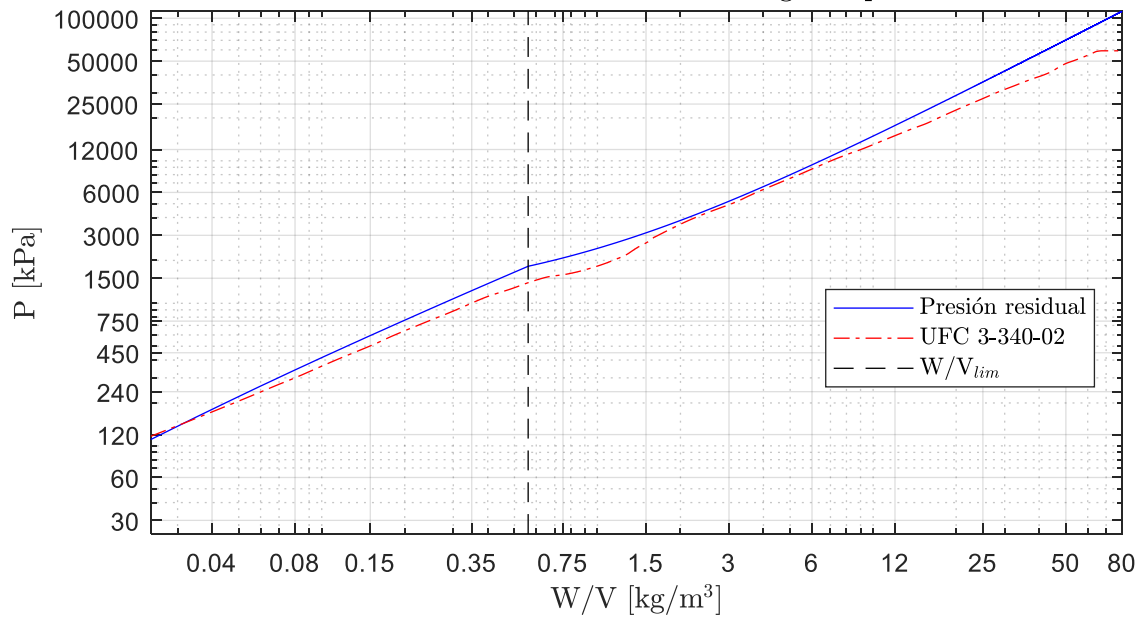


Figura 6-184: Presión residual relativa del sistema para explosivo PBX-9503.

A.2.47. PETN

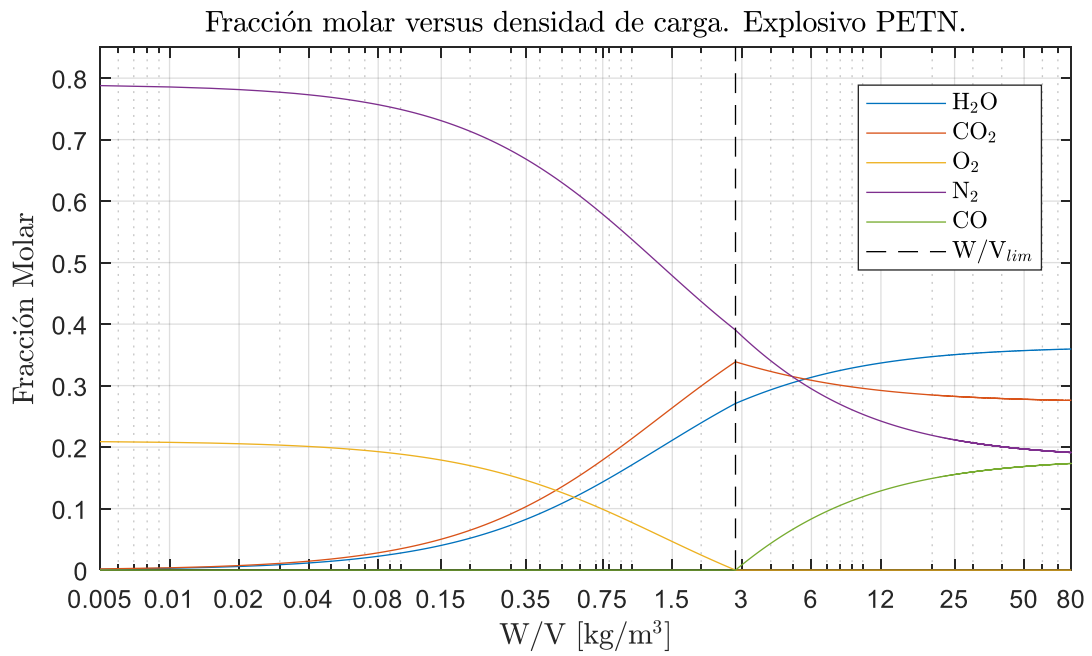


Figura 6-185: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo PETN.

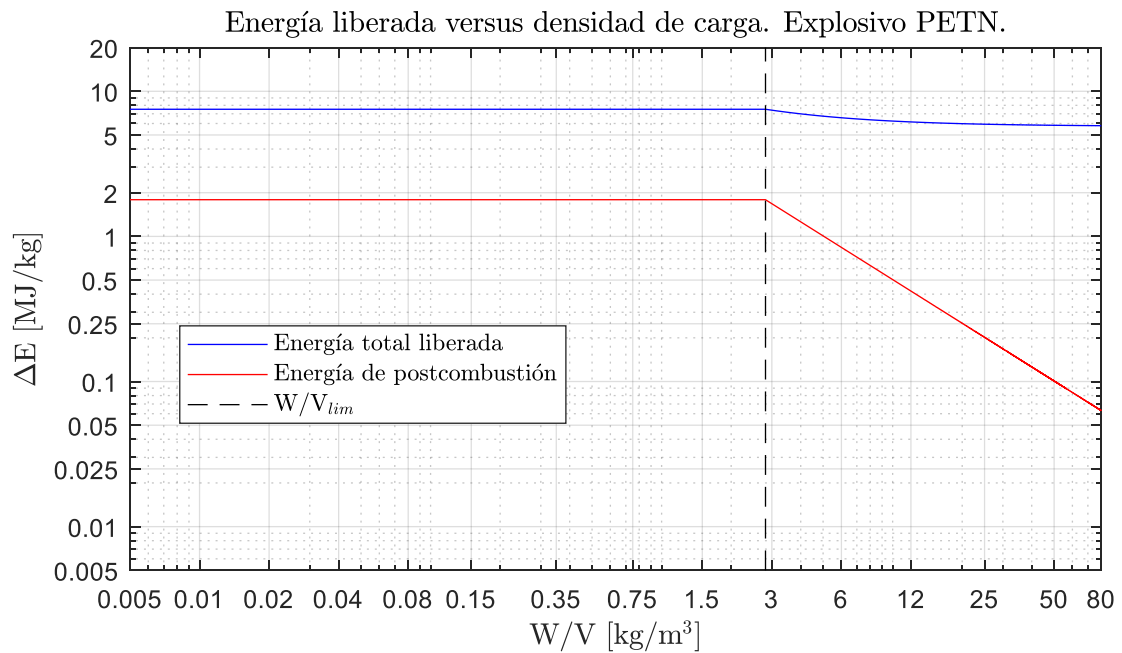


Figura 6-186: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo PETN.

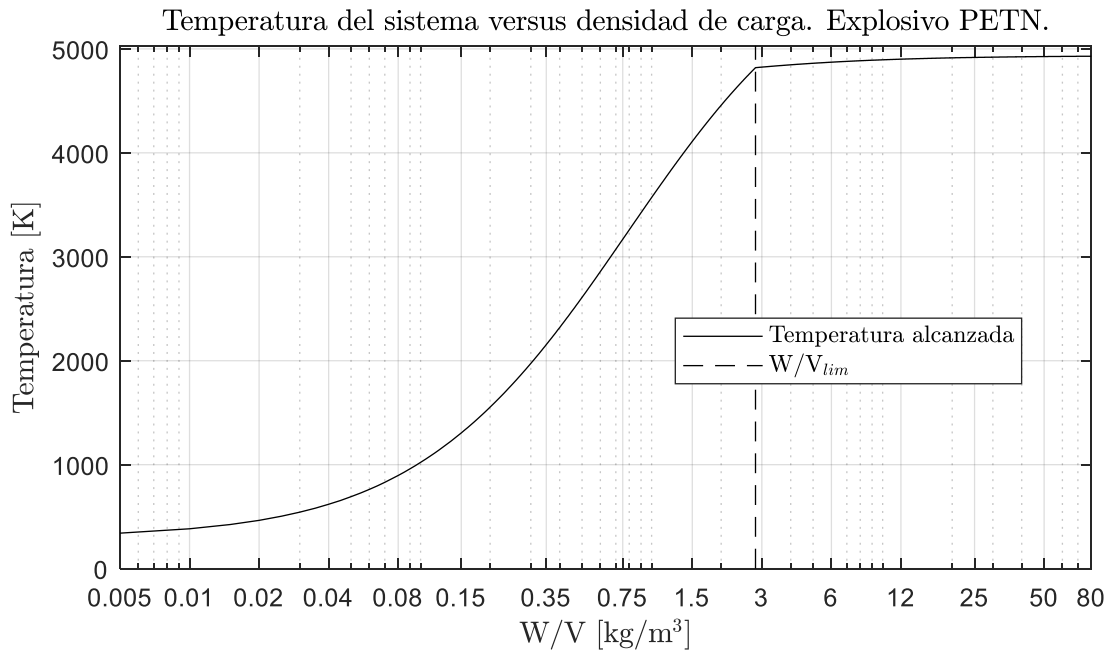


Figura 6-187: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo PETN.

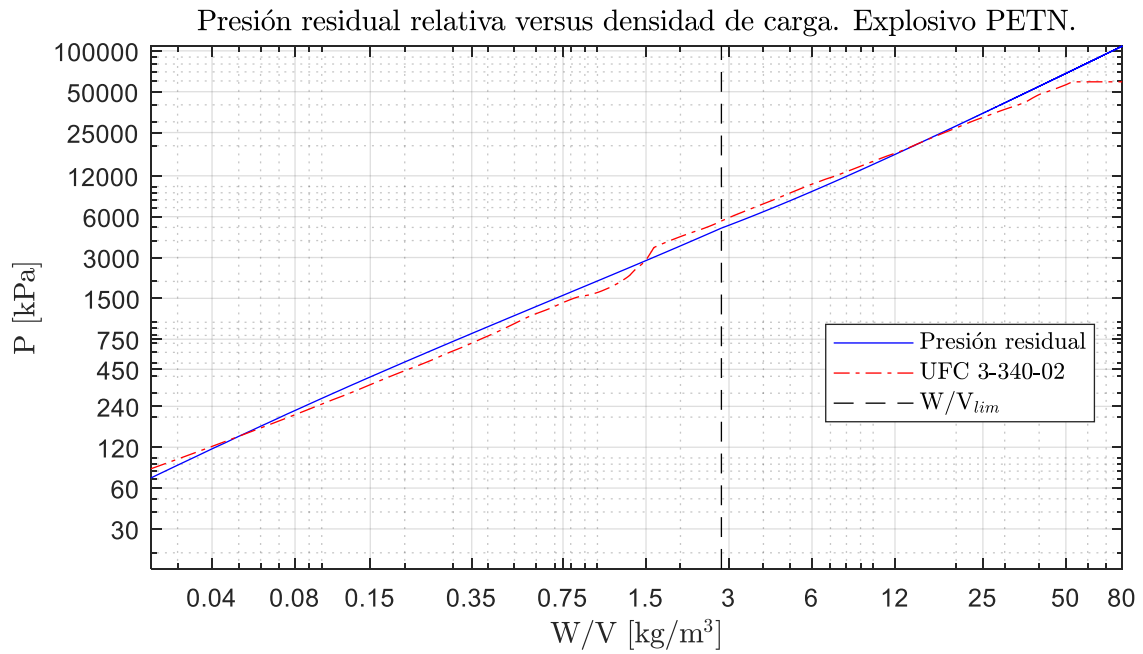


Figura 6-188: Presión residual relativa del sistema para explosivo PETN.

A.2.48. RDX

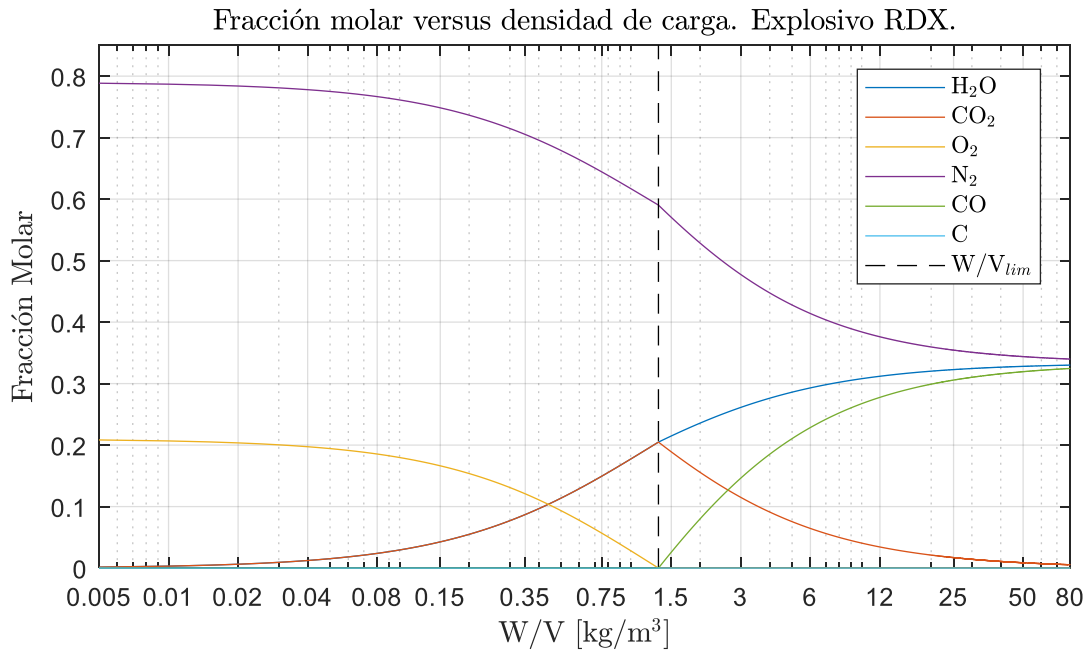


Figura 6-189: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo RDX.

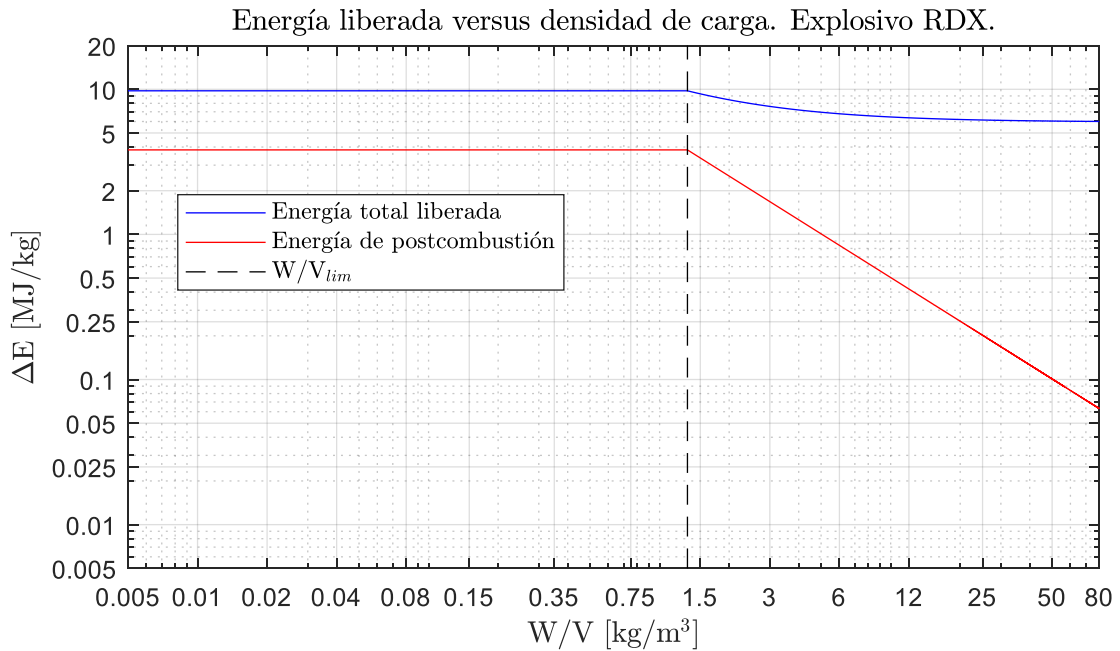


Figura 6-190: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo RDX.



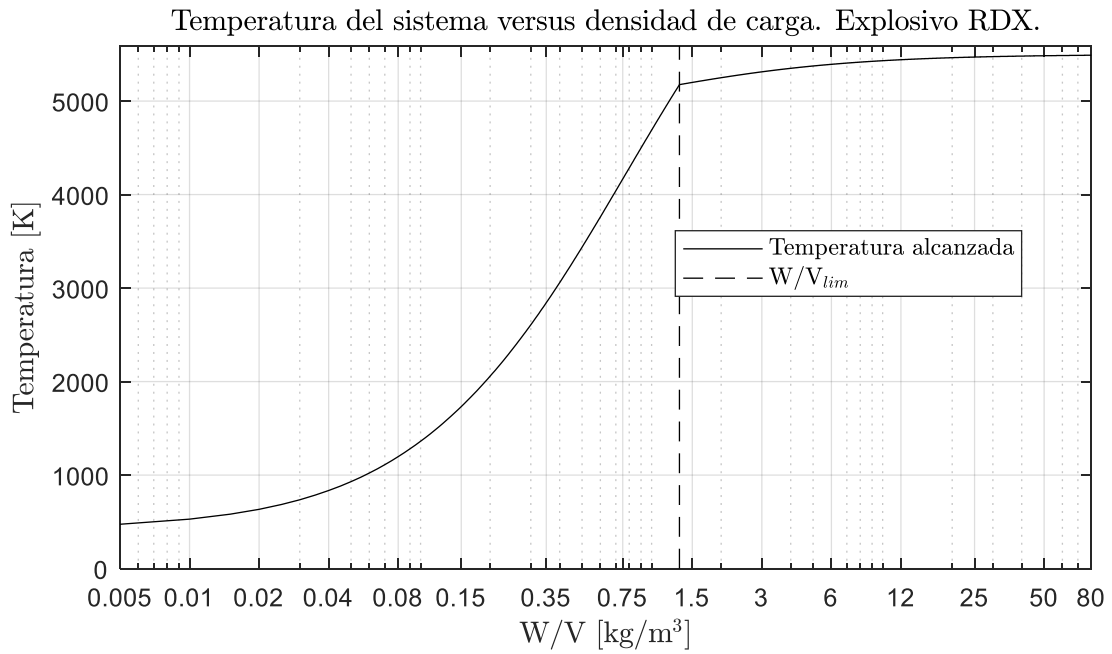


Figura 6-191: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo RDX.

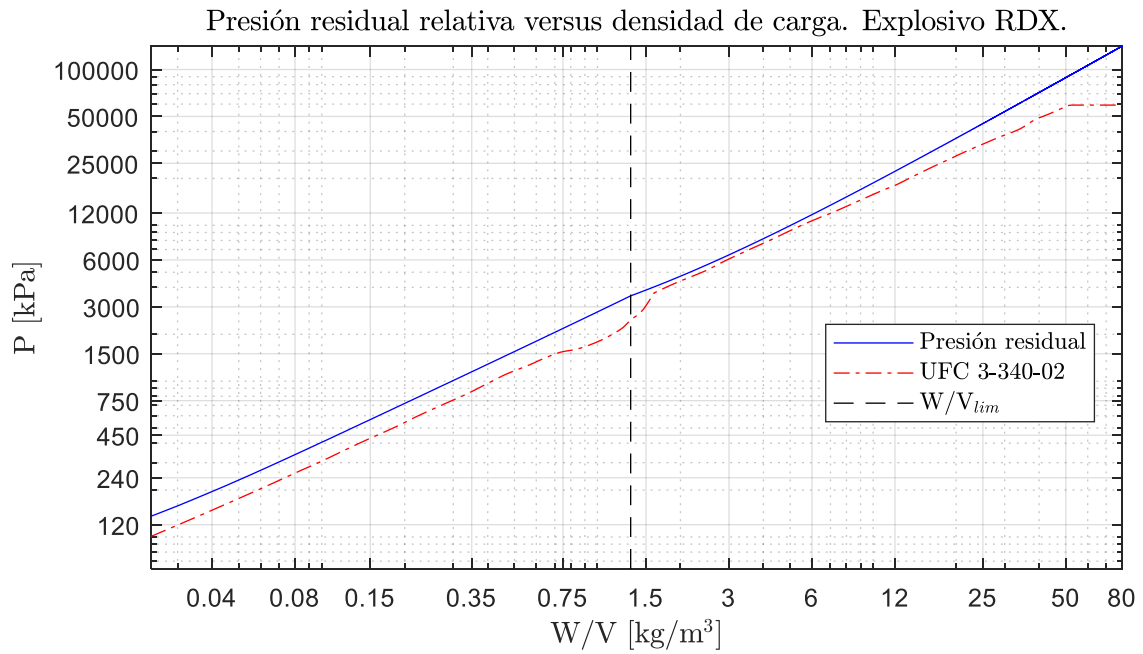


Figura 6-192: Presión residual relativa del sistema para explosivo RDX.

A.2.49. TACOT

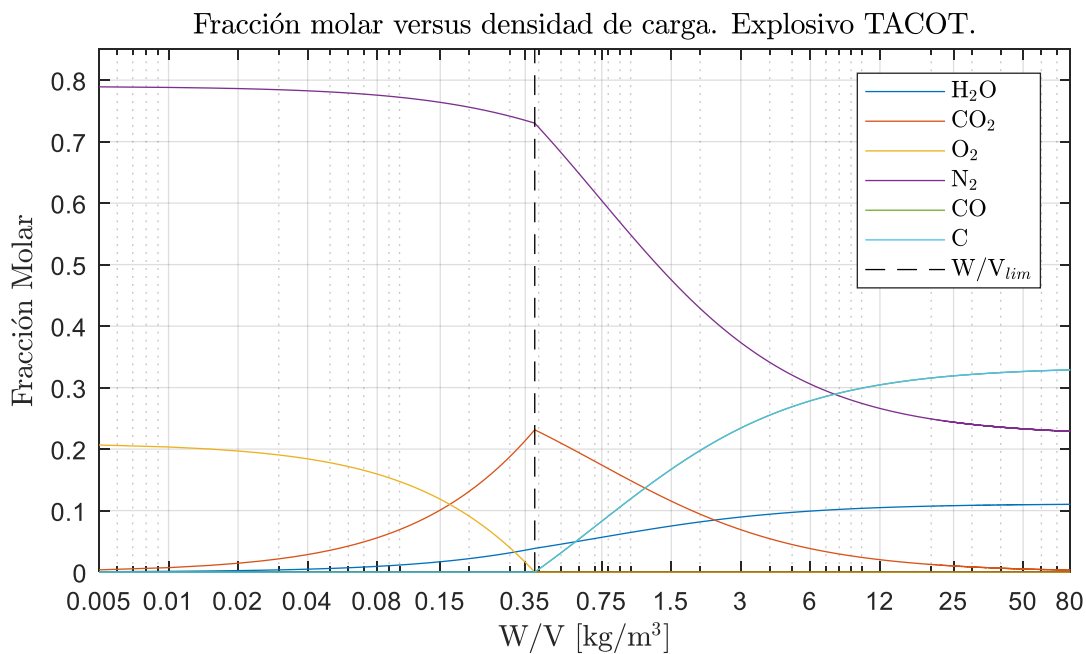


Figura 6-193: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TACOT

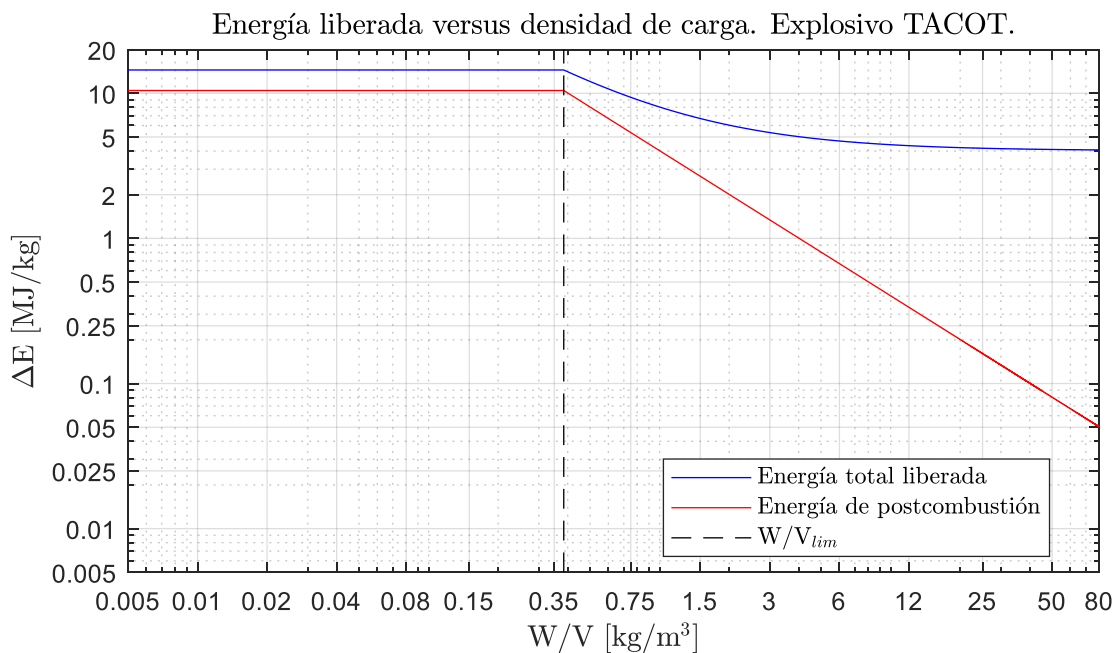


Figura 6-194: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TACOT.

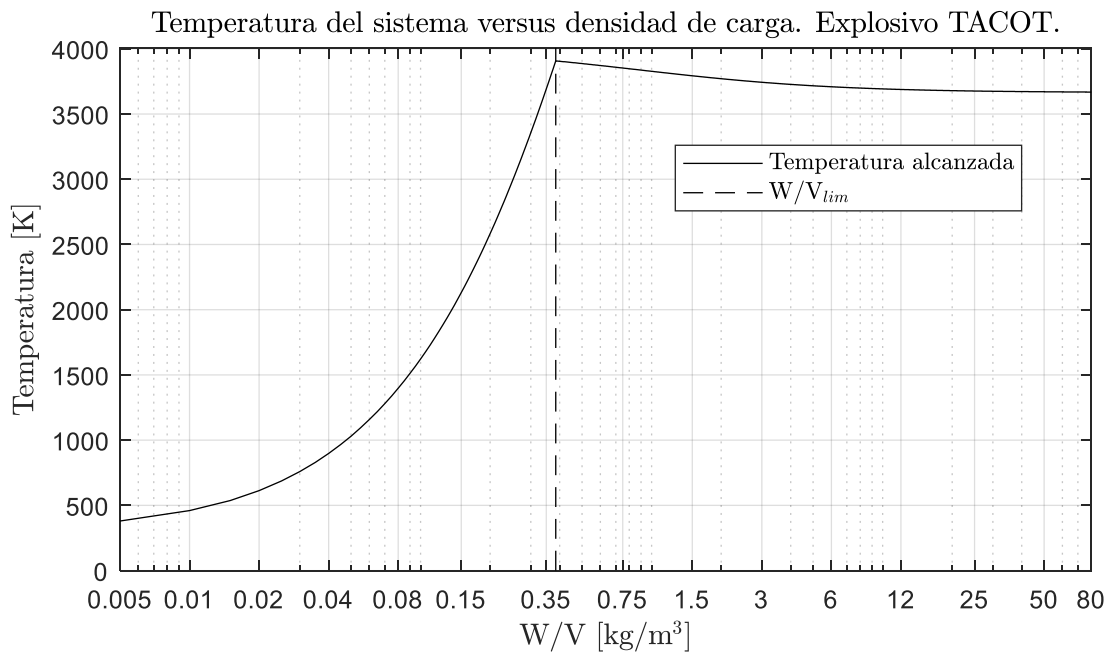


Figura 6-195: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TACOT.

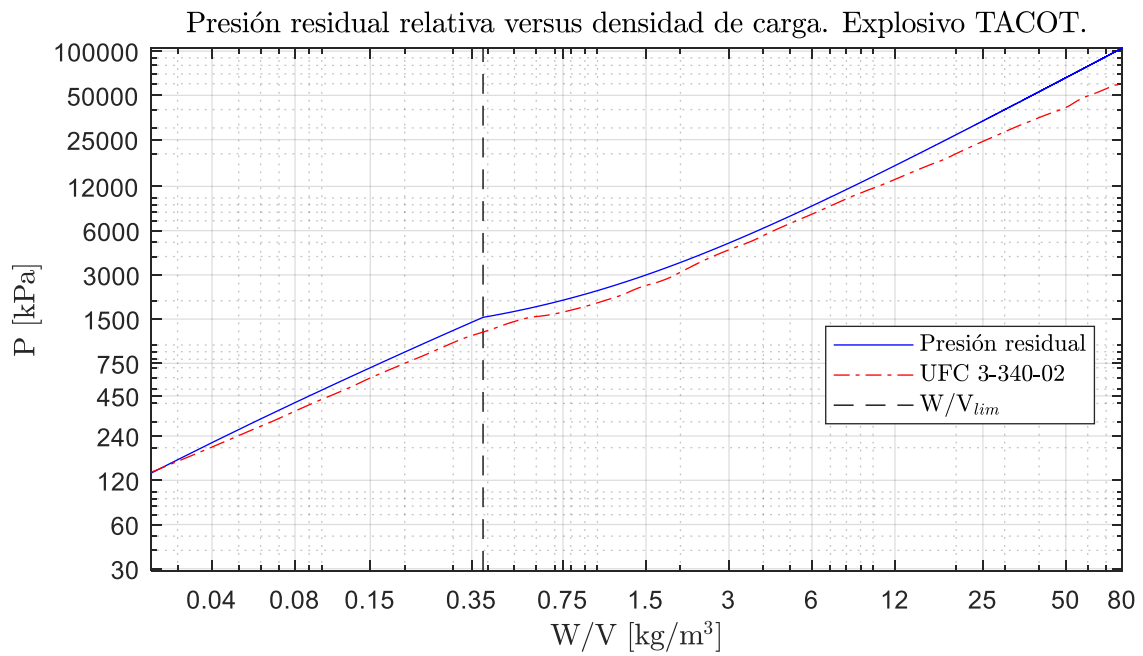


Figura 6-196: Presión residual relativa del sistema para explosivo TACOT.

A.2.50. TATB

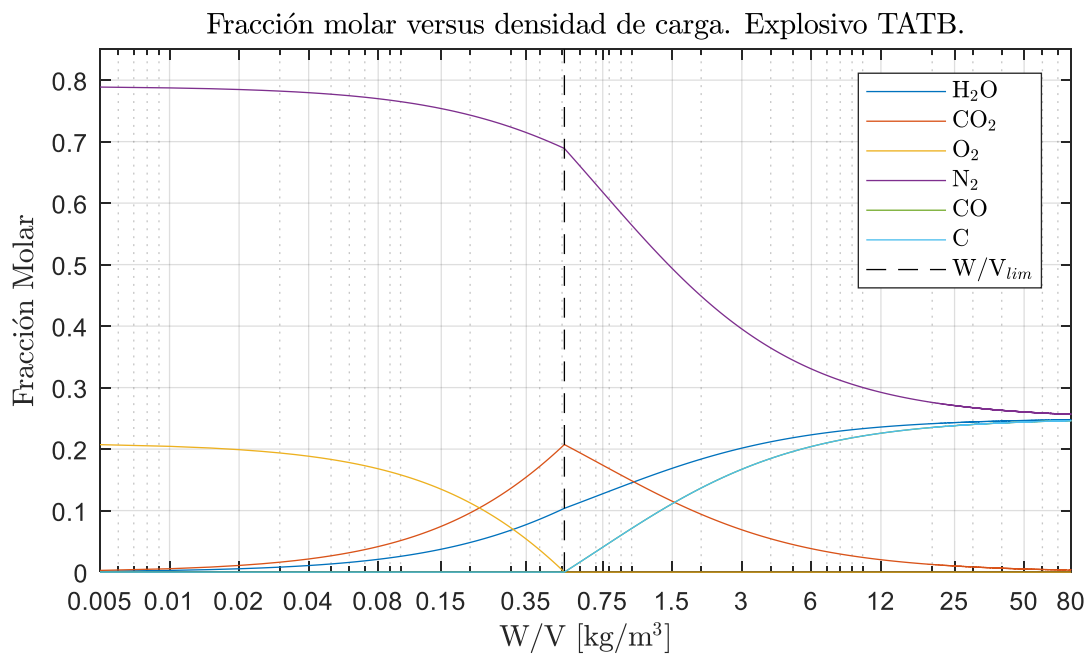


Figura 6-197: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TATB.

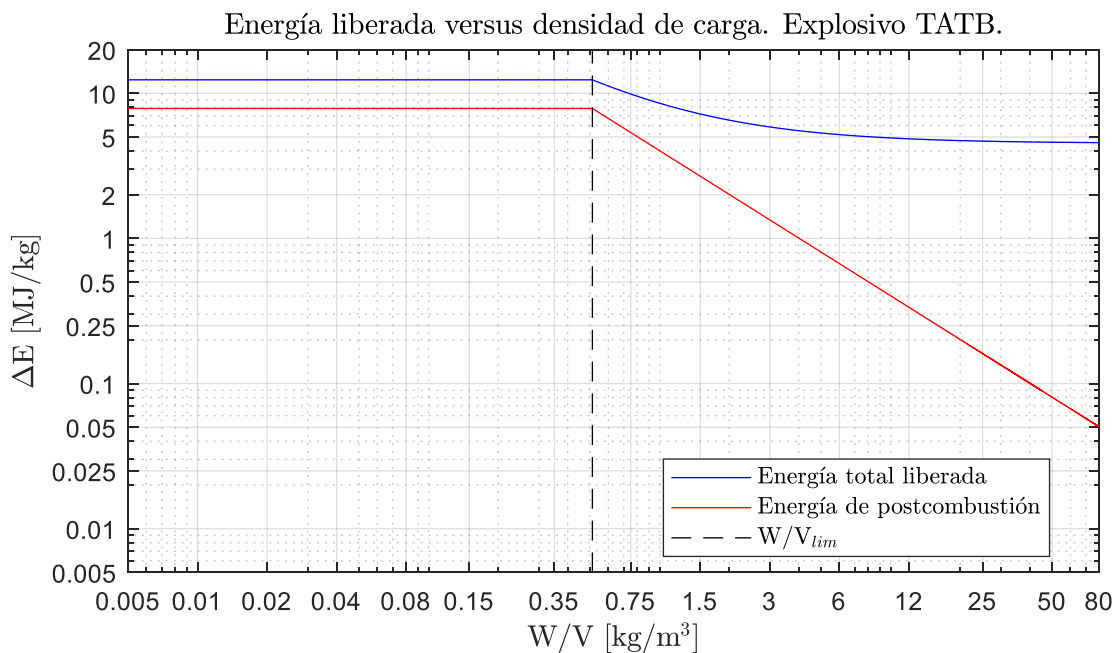


Figura 6-198: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TATB.

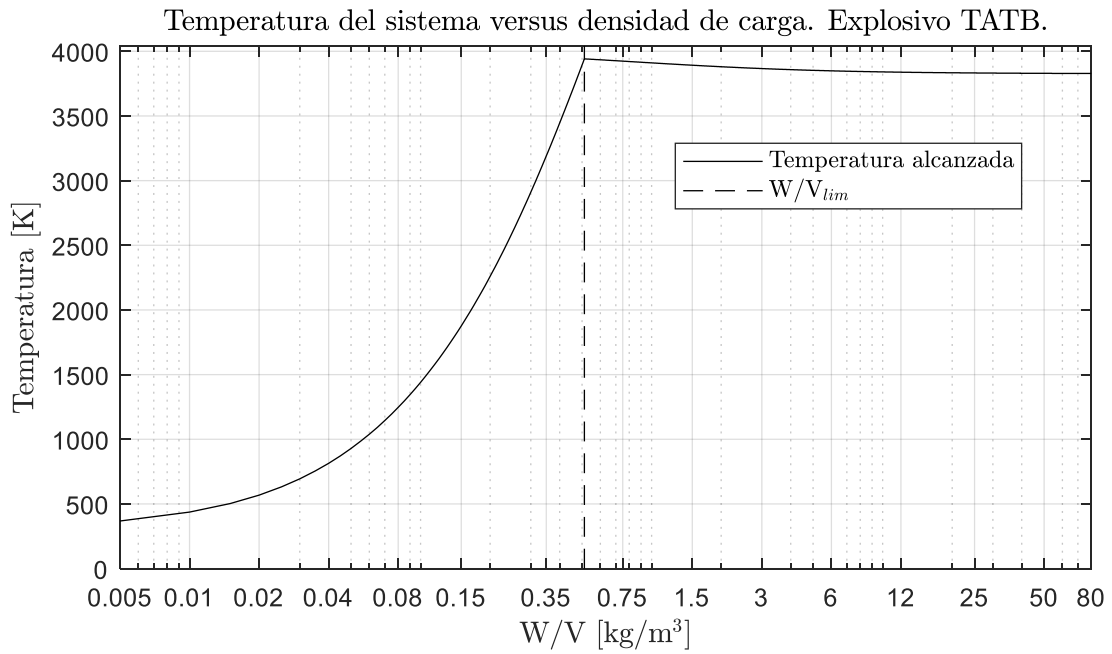


Figura 6-199: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TATB.

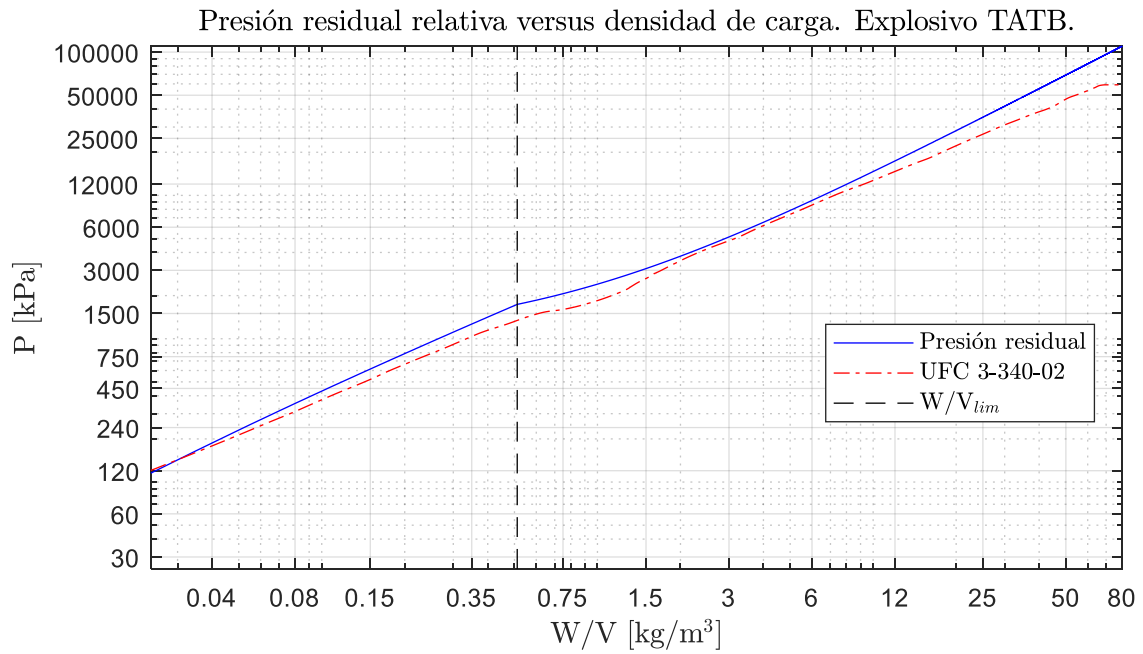


Figura 6-200: Presión residual relativa del sistema para explosivo TATB.

A.2.51. Tetryl

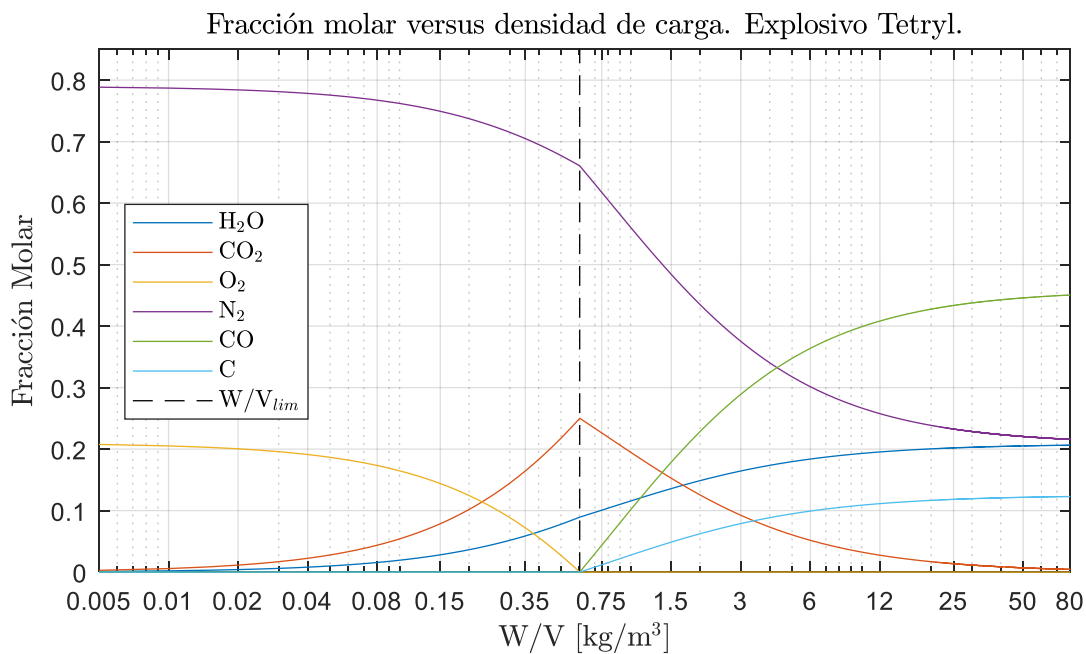


Figura 6-201: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo Tetryl.

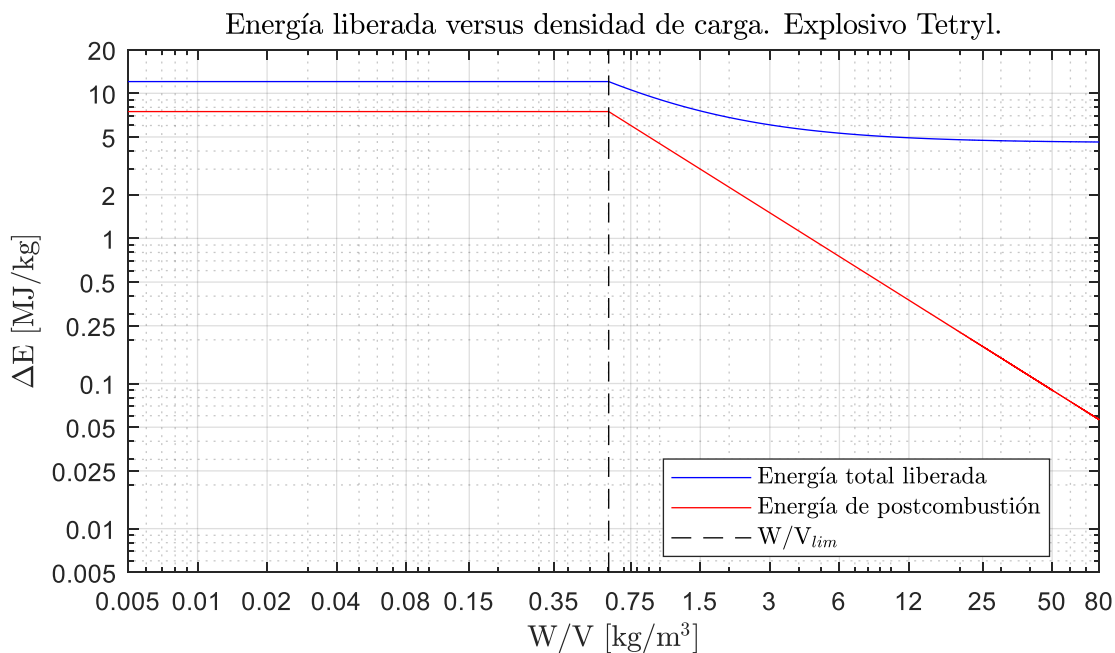


Figura 6-202: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo Tetryl.

Temperatura del sistema versus densidad de carga. Explosivo Tetryl.

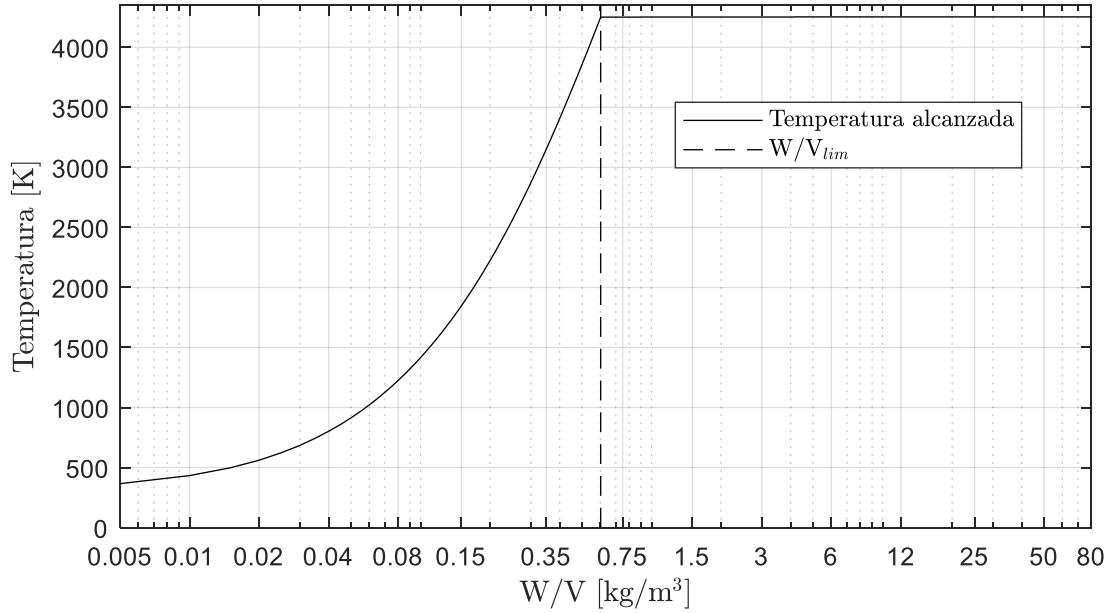


Figura 6-203: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo Tetryl.

Presión residual relativa versus densidad de carga. Explosivo Tetryl.

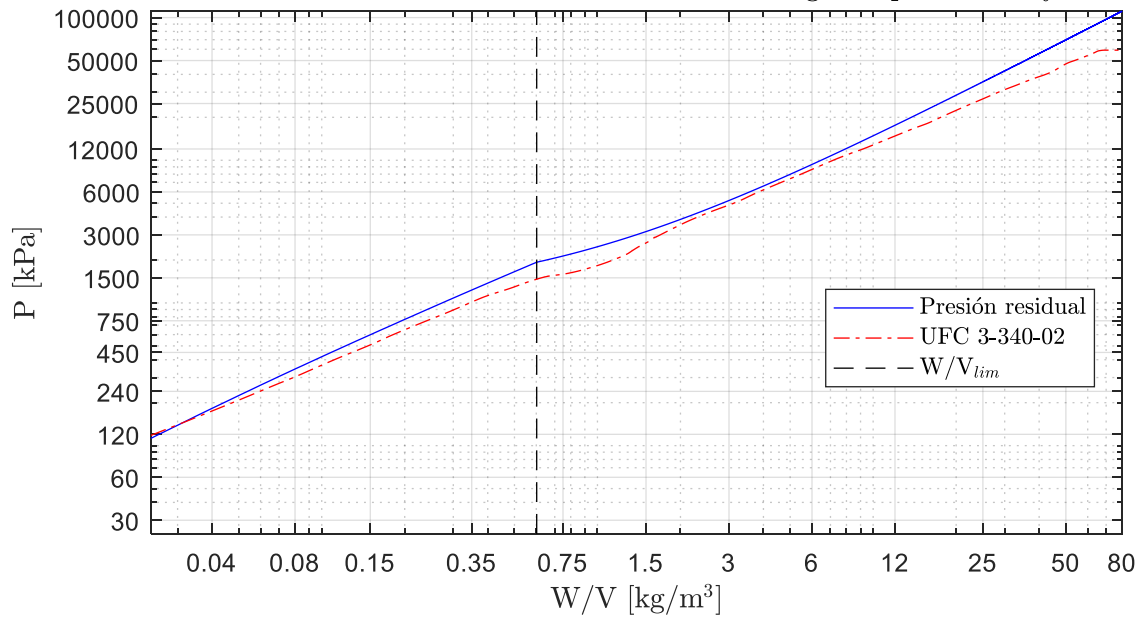


Figura 6-204: Presión residual relativa del sistema para explosivo Tetryl.

A.2.52. TNM

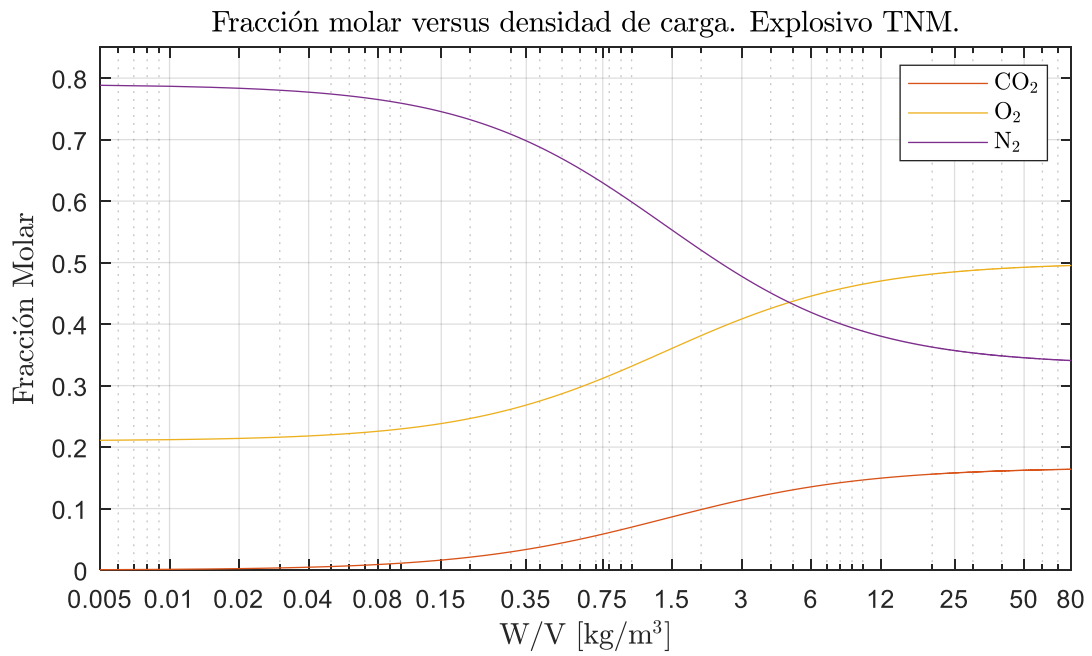


Figura 6-205: Fracción molar versus densidad de carga para el explosivo TNM.

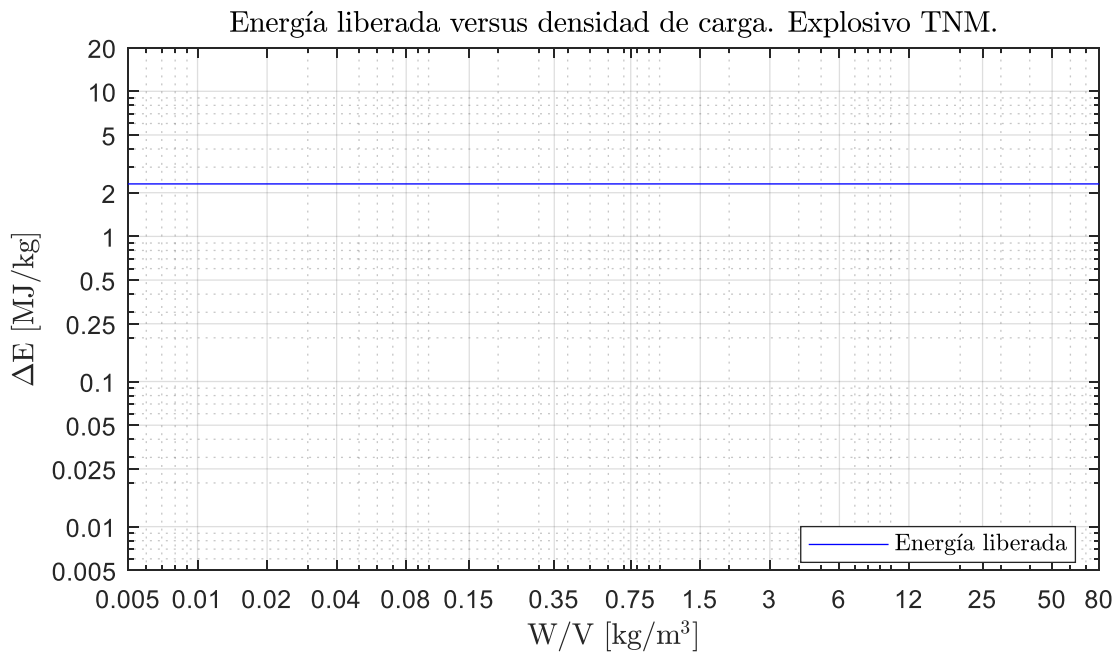


Figura 6-206: Energía liberada según densidad de carga para el explosivo TNM.



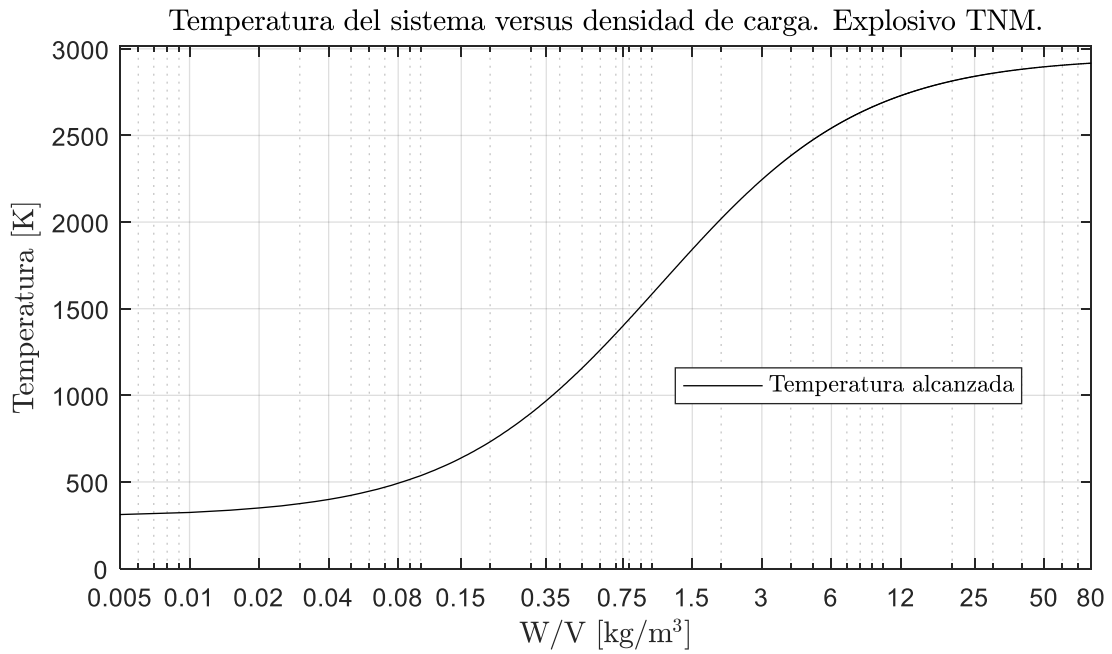


Figura 6-207: Temperatura del sistema cuasi-estático. Explosivo TNM.

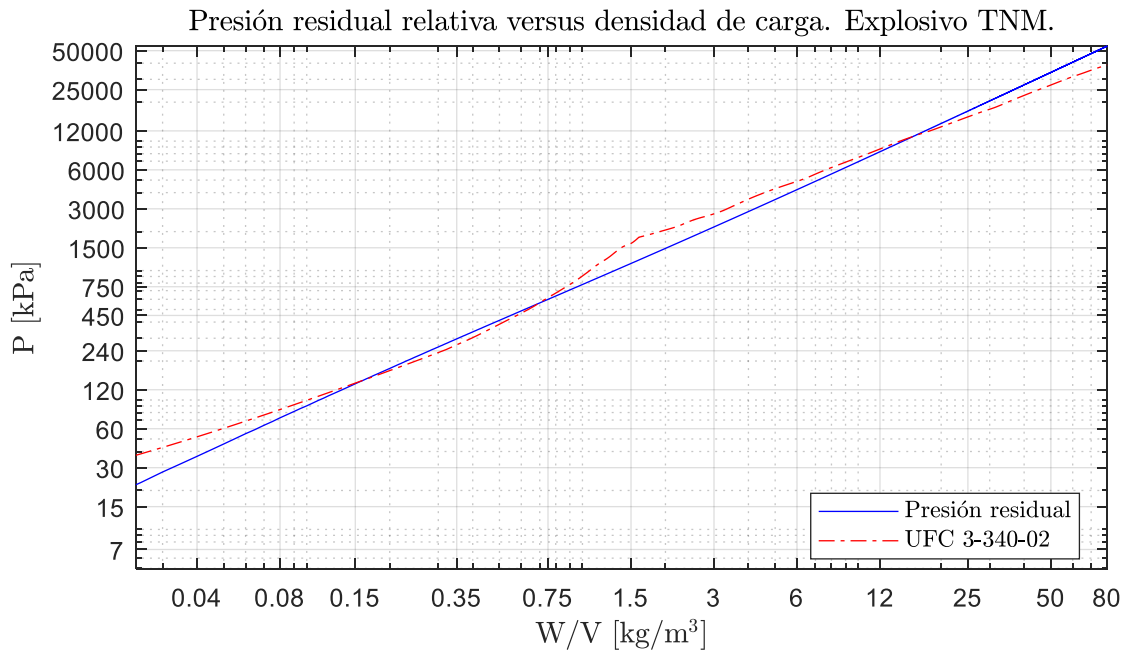


Figura 6-208: Presión residual relativa del sistema para explosivo TNM.

# Anexo B. Ajuste de Energía de Postcombustión en Autodyn

## B.1. Planilla de cálculo en Mathcad

Planilla de cálculo para obtener las presiones cuasi-estáticas y la energía de postcombustión necesarias para utilizar en el software Autodyn y obtener las presiones acordes para lograr una correcta modelación.

$kJ := 10^3 \cdot J$ $MJ := 10^6 \cdot J$	(Definición de unidades de kJ y MJ)
---	-------------------------------------

$$\rho_{0\_tnt} := 1630 \cdot \frac{kg}{m^3} \quad (\text{densidad inicial del TNT})$$

$$E_{0\_tnt} := 3.680982 \cdot 10^6 \cdot \frac{J}{kg} \quad (\text{energía interna inicial del TNT})$$

$$\nu(\rho) := \frac{\rho_{0\_tnt}}{\rho} \quad (\text{variable adimensional para el uso de la ecuación de la JWL})$$

$$\rho_{0\_air} := 1.225 \cdot \frac{kg}{m^3} \quad (\text{densidad inicial del aire})$$

$$E_{0\_air} := 2.068 \cdot 10^5 \cdot \frac{J}{kg} \quad (\text{energía interna inicial del aire})$$

$$\gamma_{air} := 1.4 \quad (\text{razón de capacidades caloríficas del aire})$$

### Parámetros de la ec. de estado de Jones–Wilkins–Lee (JWL) para TNT

$$A := 3.7377 \cdot 10^8 \cdot kPa \quad B := 3.7471 \cdot 10^6 \cdot kPa \quad R_1 := 4.15 \quad R_2 := 0.9 \quad \omega := 0.35$$

### Ecuación de estado de JWL

$$P_{JWL\_tnt}(\nu, E_{tnt}) := A \cdot e^{-R_1 \cdot \nu} \cdot \left(1 - \frac{\omega}{\nu \cdot R_1}\right) + B \cdot e^{-R_2 \cdot \nu} \cdot \left(1 - \frac{\omega}{\nu \cdot R_2}\right) + \frac{\omega \cdot \rho_{0\_tnt} \cdot E_{tnt}}{\nu}$$

### Ecuación de estado de gas ideal para el aire

$$P_{air\_ideal}(\rho_{air}, E_{air}) := \rho_{air} \cdot (\gamma_{air} - 1) \cdot E_{air}$$

## 1. Cálculo de la presión cuasiestática

### Variables de entrada (Obtenidas del Modelo Autodyn)

$$V_{sist} := (1600 \text{ mm})^3 \cdot 8 = 32.768 \text{ m}^3 \quad (\text{volumen del sistema})$$

$$V_{shell} := \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot ((1550 \text{ mm})^3 - (1500 \text{ mm})^3) = 1.461 \text{ m}^3 \quad (\text{espacio ocupado por la cámara de acero})$$

$$V_{cam} := \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (1500 \cdot \text{mm})^3 = 14.137 \text{ m}^3 \quad (\text{volumen ocupado por el interior de la cámara})$$

$$V_{Euler} := V_{sist} - V_{shell} = 31.307 \text{ m}^3 \quad (\text{volumen ocupado por el espacio Euleriano})$$

$$V_{ext} := V_{Euler} - V_{cam} = 17.169 \text{ m}^3 \quad (\text{espacio exterior euleriano que no está confinado})$$

$$m_{tnt} := 8.568 \cdot 10^5 \cdot 8 \cdot \text{mg} = 6.854 \text{ kg} \quad (\text{masa del explosivo, extraído de Autodyn x8})$$

$$m_{air} := \left( V_{cam} - \frac{m_{tnt}}{\rho_{0\_tnt}} \right) \cdot \rho_{0\_air} = 17.313 \text{ kg} \quad (\text{masa de aire})$$

$$V_{tnt\_AD} := 5.638 \cdot 10^8 \cdot 8 \cdot \text{mm}^3 = 4.51 \text{ m}^3 \quad (\text{volumen ocupado por el TNT, extraído de Autodyn x8})$$

$$V_{air\_AD} := V_{cam} - V_{tnt\_AD} = 9.627 \text{ m}^3 \quad (\text{volumen ocupado por el aire})$$

$$E_{tot\_tnt\_AD} := 1.268 \cdot 10^{12} \cdot 8 \cdot \left( \frac{\text{mg} \cdot \text{mm}^2}{\text{ms}^2} \right) = 10.144 \text{ MJ} \quad (\text{energía total interna del explosivo, extraído de Autodyn x8})$$

$$E_{tot\_air\_AD} := 3.193 \cdot 10^{12} \cdot 8 \cdot \left( \frac{\text{mg} \cdot \text{mm}^2}{\text{ms}^2} \right) = 25.544 \text{ MJ} \quad (\text{energía total interna del aire confinado y no confinado, extraído de Autodyn x8})$$

$$E_{tot\_air\_cam\_AD} := E_{tot\_air\_AD} - \rho_{0\_air} \cdot V_{ext} \cdot E_{0\_air} = 21.194 \text{ MJ} \quad (\text{energía total interna del aire confinado})$$

$$E_{air\_AD} := \frac{E_{tot\_air\_cam\_AD}}{m_{air}} = 1.224 \frac{MJ}{kg} \quad (\text{Energía interna del aire por unidad de masa})$$

$$E_{tnt\_AD} := \frac{E_{tot\_tnt\_AD}}{m_{tnt}} = 1.48 \frac{MJ}{kg} \quad (\text{Energía interna del tnt por unidad de masa})$$

$$\rho_{air\_AD} := \frac{m_{air}}{V_{air\_AD}} = 1.798 \frac{kg}{m^3} \quad (\text{densidad del aire del modelo Autodyn})$$

$$\rho_{tnt\_AD} := \frac{m_{tnt}}{V_{tnt\_AD}} = 1.52 \frac{kg}{m^3} \quad (\text{densidad del tnt del modelo Autodyn})$$

$$P_{air\_AD} := P_{air\_ideal}(\rho_{air\_AD}, E_{air\_AD}) = 880.647 \text{ kPa} \quad (\text{Presión del aire obtenido del modelo Autodyn})$$

$$P_{tnt\_AD} := P_{JWL\_tnt}(\nu(\rho_{tnt\_AD}), E_{tnt\_AD}) = 787.159 \text{ kPa} \quad (\text{Presión del tnt obtenido del modelo Autodyn})$$

### **Procedimiento iterativo**

#### **Paso 1**

$$\frac{m_{tnt}}{V_{cam}} = 0.485 \frac{kg}{m^3}$$

$$P_{QS} := 785.8522388451748 \cdot \text{kPa} \quad (\text{presión cuasiestática seleccionada. Valor que se debe iterar})$$

#### **Paso 2**

$$V_{air\_QS} := V_{air\_AD} \cdot \left( \frac{P_{air\_AD}}{P_{QS}} \right)^{\frac{1}{\gamma_{air}}} = 10.443 \text{ m}^3 \quad (\text{Volumen de aire ocupado en el equilibrio cuasiestático})$$

#### **Paso 3**

$$V_{tnt\_QS} := V_{cam} - V_{air\_QS} = 3.695 \text{ m}^3 \quad (\text{Volumen de tnt ocupado en el equilibrio cuasiestático})$$

#### **Paso 4**

$$\rho_{air\_QS} := \frac{m_{air}}{V_{air\_QS}} = 1.658 \frac{kg}{m^3} \quad (\text{densidad del aire en condición QS})$$

$$\rho_{tnt\_QS} := \frac{m_{tnt}}{V_{tnt\_QS}} = 1.855 \frac{kg}{m^3} \quad (\text{densidad del tnt en condición QS})$$

**Paso 5** (Obtención de las energías internas de los gases en el estado cuasiestático)

$$E_{air\_QS\_it} := 2.068 \cdot 10^5 \cdot \frac{J}{kg} \quad (\text{Para el aire})$$

$$P_{air\_ideal}(\rho_{air\_QS}, E_{air\_QS\_it}) = P_{QS}$$

$$E_{air\_QS} := \text{find}(E_{air\_QS\_it}) = (1.185 \cdot 10^6) \frac{J}{kg}$$

$$E_{tnt\_QS\_it} := 3.680992 \cdot 10^6 \cdot \frac{J}{kg} \quad (\text{Para el TNT})$$

$$P_{JWL\_tnt}(\nu(\rho_{tnt\_QS}), E_{tnt\_QS\_it}) = P_{QS}$$

$$E_{tnt\_QS} := \text{find}(E_{tnt\_QS\_it}) = (1.21 \cdot 10^6) \frac{J}{kg}$$

**Paso 6**

$$\Delta W_{tnt} := (E_{tnt\_QS} - E_{0\_tnt}) \cdot m_{tnt} = -1.694 \cdot 10^4 \text{ kJ} \quad (\text{Trabajo realizado por los gases})$$

$$\Delta W_{air} := (E_{air\_QS} - E_{0\_air}) \cdot m_{air} = (1.694 \cdot 10^4) \text{ kJ}$$

**Paso 7**

$$\Delta W_{air} + \Delta W_{tnt} = 0 \text{ J}$$

Si la suma es mayor a 0 disminuir  $P_{QS}$

Si la suma es menor a 0 aumentar  $P_{QS}$

$$E_{tnt\_QS} - E_{0\_tnt} = -2470.763 \frac{kJ}{kg}$$

(Variación de la Energía interna del tnt)

## 2. Cálculo de la Energía Adicional de Post-combustión

### Paso 1

$P_f := 1782.883 \cdot \text{kPa}$  (Presión que debería alcanzar el modelo Autodyn considerando la Post-combustión)

### Paso 2

$$V_{air\_AB} := V_{air\_QS} \cdot \left( \frac{P_{QS}}{P_f} \right)^{\frac{1}{\gamma_{air}}} = 5.817 \text{ m}^3 \quad (\text{Volumen de aire ocupado en el equilibrio considerando AB})$$

### Paso 3

$$V_{tnt\_AB} := V_{cam} - V_{air\_AB} = 8.32 \text{ m}^3 \quad (\text{Volumen de tnt ocupado en el equilibrio considerando Postcombustión})$$

### Paso 4

$$\rho_{air\_AB} := \frac{m_{air}}{V_{air\_AB}} = 2.976 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (\text{densidad del aire en equilibrio con AB})$$

$$\rho_{tnt\_AB} := \frac{m_{tnt}}{V_{tnt\_AB}} = 0.824 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (\text{densidad del tnt en equilibrio con AB})$$

### Paso 5 (Obtención de las energías internas de los gases en el equilibrio con AB)

$$E_{air\_AB\_it} := 2.068 \cdot 10^5 \cdot \frac{\text{J}}{\text{kg}} \quad (\text{Para el aire})$$

$$P_{air\_ideal}(\rho_{air\_AB}, E_{air\_AB\_it}) = P_f$$

$$E_{air\_AB} := \text{find}(E_{air\_AB\_it}) = (1.498 \cdot 10^6) \frac{\text{J}}{\text{kg}}$$

$$E_{tnt\_AB\_it} := 3.680992 \cdot 10^6 \cdot \frac{J}{kg}$$

(Para el TNT)

$$P_{JWL\_tnt}(\nu(\rho_{tnt\_AB}), E_{tnt\_AB\_it}) = P_f$$

$$E_{tnt\_AB} := \text{find}(E_{tnt\_AB\_it}) = (6.183 \cdot 10^6) \frac{J}{kg}$$

### Paso 6

$$\Delta E_{ab} := (E_{tnt\_AB} - E_{0\_tnt}) + (E_{air\_AB} - E_{0\_air}) \cdot \frac{m_{air}}{m_{tnt}} = 5762.582 \frac{kJ}{kg}$$

Sistema mm, ms, mg

Velocidad

$$1 \cdot \frac{mm}{ms} = 1 \frac{m}{s}$$

Aceleración

$$1 \cdot \frac{mm}{ms^2} = (1 \cdot 10^3) \frac{m}{s^2}$$

Fuerza

$$1 \cdot mg \cdot \frac{mm}{ms^2} = 0.001 N$$

Energía

$$1 \cdot mg \cdot \frac{mm^2}{ms^2} = (1 \cdot 10^{-6}) J$$

Presión

$$1 \cdot mg \cdot \frac{mm}{ms^2 \cdot mm^2} = 1 kPa$$

Energía por unidad de masa

$$1 \cdot \frac{mm^2}{ms^2} = 1 \frac{J}{kg}$$