

PROYECTO DE UNA APLICACIÓN
INFORMÁTICA PARA EL CÁLCULO DE LAS
PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS TEÓRICAS
DE LOS EXPLOSIVOS

Enrique Pérez Herrero

12/01/1996

Índice general

I	SÍNTESIS	1
1.	ABSTRACT	3
2.	SÍNTESIS DEL PROYECTO	5
II	MEMORIA	7
3.	OBJETIVOS Y ALCANCE DEL PROYECTO	9
3.1.	Características y limitaciones del método de cálculo descrito en la norma UNE 31-002-94	10
3.2.	Características y limitaciones de la aplicación informática comercial Explocal.	11
4.	INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE LA DETONACIÓN.	13
4.1.	Definiciones	13
4.2.	Detonación ideal	14
4.3.	Ecuaciones de Hugoniot-Rankine	15
4.4.	Curva de Hugoniot	17
4.5.	Recta de Rayleigh	17
4.6.	El estado de Chapman-Jouguet (CJ)	18
4.7.	Tipos de detonaciones y deflagraciones	19

5. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO DE CÁLCULO SIMPLIFICADO	21
5.1. Generalidades	21
5.2. Desarrollo del cálculo.	22
5.2.1. Planteamiento de la fórmula del explosivo	22
5.2.2. Cálculo de la energía de formación del explosivo	23
5.3. Balance de oxígeno y productos de reacción	24
5.3.1. Balance de oxígeno	24
5.3.2. Productos de explosión	24
5.4. Calor y temperatura de explosión	25
5.4.1. Composición de los productos	25
 III ESTUDIO ECONÓMICO	 29
 6. CONSIDERACIONES PREVIAS	 31
 7. PRESUPUESTO DE DESARROLLO	 33

Parte I

SÍNTESIS

Capítulo 1

ABSTRACT

The objective of this project is to built computer tool, called Explocal, in order to compute the main theoretical characteristics of explosives.

The calculus method used holds the UNE 31-002 Spanish standard.

This computer application has been developed in language C++ and it runs under the Windows 3.1 operative system on every PC .

Explocal includes all characteristics of a modern commercial computer application, as: executable module, data files, hypertext help and installation code

Capítulo 2

SÍNTESIS DEL PROYECTO

El objetivo del presente proyecto es desarrollar una aplicación informática comercial para poder obtener las principales características teóricas de cualquier mezcla explosiva.

El método que se va a informatizar es un método que ha sido normalizado por la Asociación Española de Normalización (AENOR) y se encuentra recogido en la norma UNE 31-002 [1].

El método se basa en un balance termoquímico a volumen constante, que permite conseguir una primera aproximación a parámetros como: el calor de explosión, la composición de los productos mayoritarios y la temperatura de explosión. El resto de parámetros de detonación se determinan mediante unas fórmulas empíricas aproximadas.

El método es un método simplificado y por lo tanto menos preciso que otros métodos más complejos. Los cálculos sólo son aplicables a detonaciones y no a deflagraciones.

La aplicación informática, denominada Explocal, se incluye al final del documento del proyecto; se trata de una primera versión, aunque incluye todas las características de las aplicaciones informáticas comerciales, como: módulo ejecutable, ayuda en hipertexto, programa de instalación, acceso desde el administrador de programas, manejo de múltiples documentos, empleo del portapapeles, etc.

La programación orientada a objetos es una de las filosofías de programación más apropiada para trabajar en Windows.

El código que forma Explocal está escrito en C++ y emplea toda la potencialidad de un lenguaje de programación orientada a objetos.

La aplicación Explocal funciona bajo entorno Windows 3.1 y es completamente compatible con versiones superiores.

Para facilitar la tarea de la codificación de una aplicación informática para Windows se emplea la biblioteca de clases ObjectWindows Library 1.0, que está incluida en la versión 3.1 del compilador de C++ de la compañía Borland International.

Con vistas a obtener un material informático del modo más racional posible se van a seguir todas las fases que marca la metodologías de la Ingeniería del software.

Entre estas fases podemos destacar la fase de mantenimiento en la que se realiza una discusión de la posibles mejoras de la aplicación y el modo de conseguirlas.

El proyecto incluye, también, un estudio de los costes de desarrollo, desgranado el conjunto en costes de personal y de material.

Parte II

MEMORIA

Capítulo 3

OBJETIVOS Y ALCANCE DEL PROYECTO

El objeto del presente proyecto es desarrollar una aplicación informática profesional de bajo coste denominada Explocal, que permita facilitar y sistematizar el cálculo de las principales características teóricas de los explosivos.

El método de cálculo empleado por la aplicación informática es el recogido en la norma UNE 31-002-94 [1] "Cálculo de las principales características teóricas de los explosivos"

La herramienta informática, además permitirá comparar, con una cierta comodidad, el efecto que produce en los resultados, cualquier variación en la composición de la mezcla explosiva.

Es de hacer notar aunque la aplicación informática esté destinada a cualquier persona con conocimientos técnicos en la materia e interesado en el tema, no se ha descuidado el interfaz de usuario, procurando que la aplicación informática sea de fácil manejo y que la introducción de datos sea lo más simple posible.

La informatización del método de cálculo, según la norma UNE 31-002-94 [1], permitirá desarrollar una herramienta de cálculo, con que se puedan obtener las características de cualquier mezcla explosiva, de una forma rápida, ágil y eficaz. Esto es debido a que se conseguirá reducir el tiempo necesario para efectuar el cálculo de forma manual, de aproximadamente una hora, a décimas de segundo que es lo que se tarda en llevarlo a cabo de forma automática.

3.1. Características y limitaciones del método de cálculo descrito en la norma UNE 31-002-94

En el proceso de detonación de una sustancia explosiva influyen un gran número de parámetros. Debido a la gran complejidad del fenómeno, cualquier enfoque teórico admisible, implica la necesidad de establecer un gran número de hipótesis de partida y simplificaciones.

Estas simplificaciones introducirán inevitablemente un sesgo en los resultados.

El método consiste, en esencia, en efectuar un estudio del estado de detonación ideal a volumen constante, de una mezcla explosiva a partir del estado normal, y aproximar el estado de detonación CJ mediante unas fórmulas empíricas.

El análisis del estado de detonación a volumen constante proporcionará una primera aproximación a una serie de parámetros termoquímicos como pueden ser:

- a) La temperatura de explosión.
- b) El calor de explosión.
- c) La composición de los productos de explosión.

El resto de los parámetros de detonación: (presión, velocidad y densidad de detonación), se aproximarán mediante unas fórmulas empíricas que recreen el estado de detonación CJ. El método de cálculo, aunque mucho menos exacto que otros métodos que parten de un enfoque teórico mucho más genérico, es suficiente para obtener una primera estimación de los parámetros de detonación de cualquier mezcla explosiva. Las principales limitaciones de los resultados obtenidos por el método de cálculo UNE 31-002-94 [1], son las siguientes:

- a) Las temperaturas de explosión calculadas son excesivamente altas en comparación con las obtenidas mediante códigos de detonación más complejos.
- b) En las detonaciones que se apartan del régimen ideal de detonación, el método sólo proporciona unos límites máximos de presión y velocidad.
- c) La composición de los productos de detonación obtenida no tendrá en consideración los componentes menores como pueden ser: el metano

3.2. CARACTERÍSTICAS Y LIMITACIONES DE LA APLICACIÓN INFORMÁTICA COMERCIAL EXPLOCAL

(CH₄), el amoníaco (NH₃), el cianhídrico (CNH) y los óxidos de nitrógeno entre otros. Por lo que el método no es útil para cuantificar la toxicidad de los humos producidos en la detonación, aunque sí determine el contenido en monóxido de carbono (CO).

- d) El método no es aplicable a deflagraciones, puesto que el método se fundamenta en un análisis a volumen constante y no a presión constante y tampoco se tienen en cuenta los efectos de difusión de materia y transmisión del calor.

3.2. Características y limitaciones de la aplicación informática comercial Explocal.

Una aplicación informática comercial se destaca del resto por un conjunto de características, que cuando confluyen en un mismo producto, proporcionan a este un toque de calidad profesional, siempre beneficioso, y que a menudo se convierte en condición necesaria para conseguir el éxito comercial de la aplicación, e incluso para permitir la viabilidad de su distribución.

Para garantizar una aplicación informática de alta calidad y bajo coste se debe emplear una metodología que aborde el diseño, la escritura y el mantenimiento eficiente de los programas. Esta metodología constituye la Ingeniería del software.

La Ingeniería del software implica una serie de fases generales en el desarrollo de la aplicación informática (véase figura 4-1) . Estas fases incluyen unas reglas que evitan realizar elecciones caprichosas y que constituyen lo que se denomina disciplina de programación. El proyecto sigue todas las fases de la Ingeniería del software, en las que se justifican todas decisiones que se han tomado, hasta obtener una primera versión ejecutable de la aplicación informática (conocida como **versión Beta**), cuyo código y datos se incluyen, tanto en forma de listado como en soporte electromagnético, en los anexos del proyecto.

La versión Beta incluida se puede ejecutar (bajo el entorno *Windows*) en cualquiera de sus versiones más extendidas como son: 3.1, 3.11 para Trabajo en Grupo ó *Windows 95*, puesto que todas las aplicaciones que funcionan con la versión 3.1 de *Windows* son perfectamente compatibles con versiones más modernas.

La aplicación informática es ejecutable, por lo tanto, en máquinas tipo PC y compatibles que tengan instalada una versión de *Windows* superior a la

3.1.

La versión Beta de la aplicación informática incluye, además, todos los archivos necesarios para su funcionamiento, esto es:

- Archivos de datos: (*.DAT)
- Programa de instalación.
- Datos de la instalación.
- Archivos ejemplo: (*.XPL)
- Bibliotecas de enlace dinámico: (*.DLL)
- Archivo de ayuda, en hipertexto: (*.HLP)
- Datos de inicialización: (*.INI)

El código ejecutable de la versión Beta está realizado en lenguaje C++, y utiliza la jerarquía de clases para el interfaz de Windows de la biblioteca *Object Windows 1.0 (OWL)* incluida con la versión 3.1 del entorno integrado (IDE) del compilador de *Borland*.

La biblioteca *Object Windows* es una implementación de la **Programación Orientada a Objetos (OOP)**, combinada con los procesos de programación basada en eventos, (que constituyen la filosofía de la programación en *Windows*), y ejemplifica lo bien que estas dos metodologías pueden coexistir. *Object Windows* proporciona una alternativa a la programación directa en *Windows* y simplifica enormemente la tarea de crear una aplicación informática para *Windows*.

Capítulo 4

INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE LA DETONACIÓN.

4.1. Definiciones

- **Balance de Oxígeno:** Cantidad de oxígeno que sobra o falta a una mezcla explosiva para oxidar completamente todos los elementos químicos que la componen, salvo el nitrógeno que se supone inerte, expresada en tanto por ciento en peso. Es negativo (deficitario) si falta y positivo (excedentario) si sobra.
- **Calor de Explosión:** Máxima energía que se puede liberar en la reacción de un explosivo. Se trata de la característica más importante de un explosivo, puesto que representa la capacidad del explosivo para generar choques e impartir movimiento al medio en el que está confinado, es decir su poder energético.
- **Coeficiente Adiabático:** Disminución de la presión, respecto a un aumento de volumen manteniendo la entropía constante. En los gases ideales es igual a la relación entre calores específicos.
- **Densidad Inicial:** Densidad de la mezcla explosiva intacta, es decir, antes de sufrir el proceso de explosión. Se denomina a veces densidad del encartuchado (o del granel).
- **Detonación:** Proceso de explosión en el cual se produce flujo de productos de reacción, inducido por la propagación de la onda de reacción de velocidad supersónica respecto al material intacto.

- **Detonación Ideal:** Detonación con un frente de onda plano (diámetro infinito), en el que la reacción se produce instantáneamente en el frente de discontinuidad (entre reactivos y productos), y se mueve a velocidad constante (de forma estacionaria).
- **Deflagración:** Proceso de explosión en el cual la onda de reacción se propaga a una velocidad inferior a la del sonido en el material sin reaccionar o intacto.
- **Estado Champman-Jouguet o Estado C-J:** Estado que alcanzan los productos en una detonación en régimen estacionario, en el instante de completarse la reacción.
- **Explosivo:** Sustancia susceptible de sufrir una explosión.
- **Explosión:** Proceso por el cual una sustancia se transforma bruscamente en productos, en su mayor parte en estado gaseoso, con una velocidad de transformación suficientemente alta, de forma que los productos se encuentran a presiones y temperaturas elevadas.
- **Presión de Detonación:** Presión en el estado C-J (Champman - Jouguet). Difiere de la presión a volumen constante.
- **Temperatura de Explosión:** Temperatura que alcanzan los productos de explosión considerando que la energía liberada (calor de explosión) se invierte exclusivamente en calentar los productos de reacción.
- **Velocidad de Detonación:** Velocidad de propagación de la onda de detonación.
- **Volumen de Gases en Condiciones Normales:** Volumen que ocuparían los productos gaseosos de la explosión (de 1 kg de explosivo) a una temperatura de 273,15 K (0 °C) y a una presión de $1,013 \cdot 10^5 Pa$ (1 atm).

4.2. Detonación ideal

Para que se produzca la detonación de una sustancia deben concurrir, dos fenómenos fundamentales: una reacción exotérmica y una onda de choque. Cuando el frente de la onda de choque alcanza a la sustancia explosiva, produce una activación del explosivo (debido a una compresión) que reacciona exotérmicamente y a gran velocidad, liberándose energía suficiente para mantener la onda de choque. La detonación es por lo tanto

un proceso auto mantenido, que continua mientras no se haya agotado todo el explosivo.

Debido a que el proceso de detonación es un proceso de gran complejidad es necesario despreciar los factores que influyen en él en menor medida, aunque sin perderlos de vista. La detonación ideal, se representa en la figura 2-1 y supone que el frente de detonación (de forma plana) se mueve hacia el explosivo intacto a una velocidad constante D .

Figura 2-1: Detonación ideal.

La onda de choque activa el explosivo intacto (que posee una propiedades de volumen específico v_0 , velocidad másica u_0 , energía interna específica e_0 y presión P_0) y se transforma en los productos (con propiedades v , u , e , P).

4.3. Ecuaciones de Hugoniot-Rankine

Aunque originalmente fueron deducidas para choques no reactivos (es decir: onda de choque pero sin reacción exotérmica) son perfectamente aplicables a choques reactivos (y por lo tanto a detonaciones).

Las ecuaciones de *Hugoniot-Rankine* se basan en aplicar las condiciones de conservación: de la masa (4-1), de la cantidad de movimiento (4-2) y un balance de energía (4-3) a un dominio que englobe al frente de detonación.

$$\frac{(D - u)}{v} = \frac{(D - u_0)}{v_0} \quad (4-1)$$

$$\frac{(D - u_0) \cdot (u - u_0)}{v_0} = P - P_0 \quad (4-2)$$

$$E(P, v) - E_0(P_0, v_0) = -\frac{1}{2} \cdot (P + P_0) \cdot (v - v_0) \quad (4-3)$$

Donde:

- D : Velocidad de detonación, en (m/s).
- u_0 : Velocidad inicial del explosivo, en (m/s), el caso típico es el de un explosivo inicialmente en reposo: $u_0 = 0$.
- u : Velocidad de los productos de explosión.

- v_0 : Volumen específico inicial (o de encartuchado), en (m^3/kg).
- v : Volumen específico¹ de los productos de explosión, en (m^3/kg).
- P_0 Presión inicial, en (Pa) (como por ejemplo 1 atm)
- P : Presión de los productos de detonación, en (Pa).
- E_0 : Energía interna del explosivo intacto, en (J/kg), es una función de estado que, en general, depende de la presión y del volumen específico: $e_0 = e_0(P_0, v_0)$
- E : Energía interna de los productos de explosión, en (J/kg), es una función de estado que depende de la presión y del volumen específico y en la mayoría de los casos difiere de e_0 , puesto que la naturaleza de los productos difiere de los reactivos: $e = e(P, v)$
- Q : Calor de reacción (de explosión), en (J/kg) es la diferencia de energía de formación entre reactivos (explosivo) y producto. Si tomamos el estado (P_0, v_0) , como estado de referencia es la diferencia de energía interna entre reactivos y productos en dicho estado:
 $Q = e(P_0, v_0) - e_0(P_0, v_0)$

Para que el calor de reacción aparezca explícitamente en (4-3), sólo hay que sumar y restar $e(P_0, v_0)$ al primer término de (4-3), de este modo sustituyendo el valor de Q , en función de la diferencia de energías de formación entre explosivo y productos de detonación (suponiendo, que el explosivo está inicialmente en el estado normal de referencia y en reposo), se tiene:

$$\frac{(D - u)}{v} = \frac{(D)}{v_0} \quad (4-4)$$

$$\frac{D \cdot u}{v_0} = P - P_0 \quad (4-5)$$

$$E(P, v) - E_0(P_0, v_0) = \frac{1}{2} \cdot (P + P_0) \cdot (v_0 - v) + Q \quad (4-6)$$

En (4-6), se puede observar, como a volumen constante ($v = v_0$): El calor de la reacción se invierte en aumentar la energía interna de los productos.

¹Como $v = 1/\rho(\text{kg}/\text{m}^3)$, la ecuaciones H-R se pueden expresar en función de la densidad, en vez del volumen específico

Las ecuaciones de *Hugoniot-Rankine*, constituyen un sistema de tres ecuaciones con cuatro incógnitas (si no tenemos en cuenta la composición de los productos de explosión). El sistema tiene por lo tanto un grado de libertad.

4.4. Curva de Hugoniot

Se denomina curva de *Hugoniot-Rankine* (o hugoniot), a cualquier representación de una variable de detonación en función de otra. En lo que sigue se va a emplear hugoniots $P - v$ (presión - volumen específico). Si se observa la expresión (4-6), la hugoniot $P-v$ debe tener forma similar a una hipérbola (no es idéntica, porque el primer miembro no es constante)

En un choque no reactivo: $Q = 0$, en el estado a volumen constante: $v_0 = v$, (4-6) se reduce a:

$$E(P, v) - E_0(P_0, v_0) = 0 \Leftrightarrow P = P_0 \quad (4-7)$$

Lo significa que la curva pasa por el punto: (P_0, v_0) , es decir el estado inicial es compatible con los posibles estados de choque.

En cambio en un choque reactivo exotérmico (como una detonación): $Q > 0$, y como la energía interna es una función creciente de P , se tiene que:

$$E(P, v) - E_0(P_0, v_0) = Q > 0 \Leftrightarrow P > P_0 \quad (4-8)$$

Estas conclusiones se representan gráficamente en la figura 2-2

4.5. Recta de Rayleigh

Si se elimina la velocidad másica u de (4-4) y de (4-5), se obtiene:

$$\frac{P - P_0}{v - v_0} = - \left(\frac{D}{v_0} \right)^2 \quad (4-9)$$

que se puede considerar como una haz de rectas, que pasa por el punto (P_0, v_0) , y con una pendiente variable función del parámetro D (velocidad de reacción).

Estas rectas se denominan *rectas de Rayleigh*.

Como el segundo miembro de la expresión (4-9) es siempre negativo, se deduce que es imposible los estados en los que $v > v_0$ y además $P > P_0$. Sólo son admisibles dos opciones (véase la figura 2-3):

a) $v \leq v_0$ y $P > P_0$ (que corresponde a las detonaciones)

b) $v > v_0$ y $P \geq P_0$ (que son las deflagraciones)

En las figuras 2-2, 2-3 y 2-4, se puede ver como la presencia del calor de explosión exotérmico: aleja la hugoniot del estado inicial del explosivo, y además: divide la curva en dos ramas diferentes, separadas por un tramo de estados incompatibles que está limitado por los estados a volumen y presión constante. Como se puede apreciar en la figura 2-3, en general cada recta de Rayleigh corta a la hugoniot en dos puntos. Excepto cuando la recta es tangente a la hugoniot.

El estado de detonación a volumen constante implica una pendiente de 90° , o lo que es lo mismo una velocidad de detonación infinita ($D = \infty$). Esta razón obliga a pensar que el estado a volumen constante es un estado sin existencia real, aunque de gran interés teórico.

El estado de reacción a presión constante, por el contrario, es la intersección de una recta de Rayleigh horizontal que implica una velocidad de reacción nula: $D = 0$.

En la rama de las deflagraciones las ondas de reacción poseen propiedades cualitativas similares a las ondas de combustión ordinaria. De hecho, las temperaturas de llama se calculan mediante un análisis a presión constante.

Aunque para estudiar las ondas de deflagración, se debe tener en cuenta, que: los fenómenos de transmisión del calor y de difusión de materia no son despreciables, por lo que la rama de las deflagraciones de la hugoniot, no constituye una buena aproximación de lo que acontece en cualquier deflagración.

4.6. El estado de Chapman-Jouguet (CJ)

En la figura 2-3 se comprueba como de todos los estados de detonación posibles, existe uno en el que la velocidad de detonación es mínima, denominado estado C-J. Precisamente corresponde al punto donde una de las rectas de Rayleigh es tangente a la hugoniot.

Se puede comprobar de forma experimental como los explosivos, en régimen próximo al ideal, poseen una velocidad de detonación única que corresponde con la calculada por la condición de tangencia (denominada condición de Chapman-Jouguet.)

Sin aportar una demostración teórica, debido a la brevedad de este trabajo, se debe recalcar que: las detonaciones CJ son las únicas que tienen posibilidad de propagarse de forma estacionaria.

El estado CJ de las detonaciones presenta las siguientes propiedades:

- a) La recta de Rayleigh y la hugoniot son tangentes: (y la velocidad de detonación es mínima):

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{Hug.} = \frac{P - P_0}{v - v_0} = -\left(\frac{D}{v_0}\right)^2 \quad (4-10)$$

- b) La hugoniot es tangente a la isentrópica de los productos.
- c) El frente de detonación se aleja de los productos a una velocidad c que coincide con la del sonido propagándose en los productos de detonación; siendo:

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S = -v^2 \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_S \quad (4-11)$$

4.7. Tipos de detonaciones y deflagraciones

En la rama de las deflagraciones, de la condición de tangencia entre la hugoniot y la recta de Rayleigh se deduce una velocidad de reacción máxima.

Cada estado CJ divide a cada una de las ramas de la hugoniot en dos tramos, por lo que en la hugoniot aparecerán: detonaciones fuertes, detonación CJ, detonación débiles, estado a volumen constante, estados incompatibles, deflagración a presión constante, deflagraciones débiles, deflagración CJ y deflagraciones fuertes, como se puede apreciar en la figura 2-4. En la tabla 2-1, aparecen algunas de sus características.

Capítulo 5

DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO DE CÁLCULO SIMPLIFICADO

5.1. Generalidades

El método de cálculo empleado que incorpora Explocal es el que ha sido recogido por AENOR en la norma UNE 31-002-94 [1] y coincide con el descrito por Sanchidrián Blanco [2]. La norma UNE 31-002-94 [1] establece un método simplificado de cálculo de las principales características de los explosivos, como son:

- Balance de oxígeno.
- Calor de explosión.
- Temperatura de explosión.
- Presión de detonación.
- Velocidad de detonación.
- Composición de los productos de explosión mayoritarios.
- Volumen de gases en condiciones normales.

Como datos de partida de problema se considerarán: la composición de la mezcla explosiva (expresada como porcentaje en peso de cada

componente), y la densidad inicial. Debido a que se trata de un método simplificado, se asumen ciertas hipótesis de partida que alejan los resultados del comportamiento real de los explosivos. Por este motivo los resultados obtenidos por aplicación de la norma UNE 31-002-94 [1] deben considerarse como una aproximación a las características reales de funcionamiento de los explosivos.

El método de cálculo presupone un régimen de detonación ideal por lo que se desprecian los fenómenos cinéticos y los de difusión térmica.

Para calcular la composición de los productos de explosión y la temperatura de explosión, el método considera el estado de detonación a volumen constante como una aproximación al estado de detonación CJ.

A volumen constante: el volumen específico de explosión es igual al inicial ($v = v_0$) y la ecuación de la energía (4-2) de la detonación queda:

$$E - E_0 = 0 \quad (5-1)$$

La expresión (5-1) es una ecuación en temperatura que se resolverá suponiendo que la energía interna depende en exclusiva de la temperatura, es decir, los productos de explosión se comportan como gases ideales.

La energía interna total depende de la composición de los productos de explosión. Con el objetivo de reducir el número de incógnitas se considera que: cada elemento de la mezcla explosiva forma un único producto de explosión, con las excepciones del carbono, el hidrógeno y el oxígeno que forman: C (grafito), CO, CO₂, H₂ y H₂O.

El resto de los parámetros de detonación se determinan mediante las fórmulas empíricas de Kamlet, M.J y Jacobs, S.J. [3]. Los parámetros numéricos que incluyen las fórmulas, fueron ajustados para mezclas explosivas de densidades comprendidas entre 1 g/cm³ y 2 g/cm³ formadas únicamente por C, H, O y N. Cuanto mayor sea la proporción de otros elementos distintos de los cuatro anteriores, menor será la precisión obtenida. El método de cálculo se esquematiza, en la figura 3-1.

5.2. Desarrollo del cálculo.

5.2.1. Planteamiento de la fórmula del explosivo

A partir de la composición porcentual de las especies químicas (o reactivos), que componen el explosivo, y que constituyen los datos del

problema planteado, se calcula la fórmula para un kilogramo de explosivo del siguiente modo:

$$b_j = 10 \cdot \sum_{i=1}^{N_c} a_{ij} \cdot \frac{p_i}{Pm_i}, j = 1, 2, \dots, N_e \quad (5-2)$$

Donde:

- b_j : Átomos del elemento j en la fórmula de 1 kg de explosivo.
- N_c : Número de componentes de la mezcla explosiva.
- a_{ij} : Átomos del elemento j en la fórmula del componente i .
- p_i : Porcentaje en peso del componente i (%)
- Pm_i : Peso molecular del componente i en (g/mol), (se calcula a partir de las masas atómicas de la tabla 3-1)
- N_e : Número de elementos químicos que forman la composición del explosivo.

5.2.2. Cálculo de la energía de formación del explosivo

Se tomará como temperatura de referencia: $T_0 = 298K$.

La energía de formación del explosivo se determina a partir de las energías de formación a 298 K de cada componente (véase UNE 31-002-94).

A diferencia de la norma UNE 31-002-94 [1], se considera que todas las variables energéticas están expresadas en calorías, puesto que todas las tablas termoquímicas están expresadas, generalmente, en calorías (o en kilocalorías): 1 cal = 4,184 J.

La energía de formación del explosivo se calcula mediante la fórmula:

$$E_0 = \Delta E f = \sum_{i=1}^{N_c} \Delta E f_i \cdot \frac{p_i}{100} \quad (5-3)$$

5.3. Balance de oxígeno y productos de reacción

5.3.1. Balance de oxígeno

Se calcula, expresado en porcentaje, mediante la expresión:

$$BO = 100 \cdot Pm[O] \cdot \frac{(OE - ON)}{Pm} \quad (5-4)$$

Donde:

- *BO*: Balance de oxígeno en (%) = (g/100g).
- *Pm*[O]: Peso molecular del oxígeno atómico: ¹ 15,9994 g/mol (véase tabla 3-1).
- *Pm*: Peso molecular del explosivo, si el explosivo está expresado por su fórmula para 1 kg, en (g/mol). *Pm* = 1 kg/mol = 1000 g/mol.
- *OE*: Oxígeno existente (o el oxígeno que contiene el explosivo). o los átomos de oxígeno que figuran en la fórmula de 1 kg de explosivo.
- *ON*: (Oxígeno necesario para oxidar los elementos del explosivo.

Para calcular el oxígeno necesario, se considera que los elementos se oxidan para formar los productos que se indican en la tabla 5.1. El oxígeno necesario es igual a la suma de los átomos de cada elemento, multiplicado por el peso para el cálculo de balance de oxígeno. Como se puede apreciar en la tabla 5.1, existen diferencias entre los productos para el balance de oxígeno y los productos de explosión. Los datos de las masas atómicas que incluye la norma UNE 31-002-94 [1], en su anexo A, son menos precisos que los del Fórum Atómico Español [4], por lo que se ha preferido emplear estos últimos.

5.3.2. Productos de explosión

Con el único objetivo de simplificar el cálculo de la composición de los productos de detonación, se limita el número total de estos. Sólo se toman en consideración los productos de detonación mayoritarios (véase tabla 5.1 o tabla 3-2). Se tienen en cuenta los siguientes productos, según el caso:

¹*OE* y *ON*, se consideran en la norma UNE 31-002 en g/mol, es decir ya incluyen el factor: 15,9994.

- a) **Balance de oxígeno positivo (o nulo):** El explosivo es excedentario en oxígeno: se forma un producto por cada elemento en la composición de la mezcla. Como: CO_2 , CO , H_2O , O_2 y N_2 entre otros. (Nótese la presencia de oxígeno libre O_2).
- b) **Balance de oxígeno negativo:** se forma un producto por cada elemento y además se pueden formar C , CO , y H_2 . (No hay oxígeno libre, pero sí hidrógeno gas.)

Como se puede observar, los productos de explosión difieren, en general, de los productos que se emplean para el cálculo del balance de oxígeno. Esta circunstancia provoca una inconsistencia en la elección de los productos de detonación, puesto que es posible que existan mezclas explosivas con balance de oxígeno positivo en las que no se produzca oxígeno libre (y sean en realidad deficitarias)

Para solucionar este problema se podría cambiar la definición de balance de oxígeno por otra en la que se considere que el balance de oxígeno sea la cantidad de oxígeno que sobra o falta para oxidar los elementos de su composición hasta formar los productos de detonación que se forman en mezclas excedentarias.

El programa Explocal considera dos definiciones distintas, puesto que así se sigue la norma y además se soluciona la inconsistencia.

2 3 4

5.4. Calor y temperatura de explosión

5.4.1. Composición de los productos

Coincidiendo con la clasificación por el balance de oxígeno se suponen dos casos: (Siendo: Np , el número de productos formados en la explosión y Ne , el número de elementos distintos de la mezcla)

²Los tres últimos productos de explosión, sólo se pueden producir en explosivos deficitarios en oxígeno, y no se consideran asociado a ningún elemento. Esta circunstancia implica que, en realidad esta tabla se pueda considerar como dos tablas unidas: una de productos de explosión y otra de elementos.

³El programa Explocal necesita acceder a ciertas posiciones de la tabla, esto obliga a conservar el orden de las entradas de la tabla.

⁴Los productos con $T_{\text{Vaporiz}} > 6000\text{K}$, se consideran sólidos o líquidos en el intervalo 298 K - 6000 K atendiendo al criterio de la norma UNE 31-002-94, aunque existan casos como el grafito que sublima 3925 K, o los carbonatos que se descomponen al alcanzar cierta temperatura.

- a) **Balance de oxígeno positivo (o nulo):** ($Np = Ne$) El número de productos de explosión coincide con el número de elementos. Estableciendo los balances estequiométricos de cada elemento se obtiene un sistema de ecuaciones lineales, cuya resolución (inmediata en muchos casos) proporciona la composición de los productos.
- b) **Balance de oxígeno negativo:** ($Np = Ne + 2$) Se tienen dos productos más que elementos ya que se producen C, CO, H₂ pero no O₂. El sistema de ecuaciones se forma con los balances estequiométricos de cada elemento junto con las dos ecuaciones de equilibrio siguientes:

Elemento asociado	Masa atómica (g/mol)	Producto de explosión	$\Delta E f^{298}$ (kcal/mol)	Temperatura vaporización (K)
Al	26,98154	Al ₂ O ₃	-396	>6000
B	10,811	B ₂ O ₃	-302,8	2316
Ba	137,327	BaO	-134,3	>6000
Be	9,01218	BeO	-142,8	4060
Br	79,904	BrH	-9,01	206,15
C	12,011	CO ₂	-94,05	194,65
Ca	40,078	CaO	-115,49	>6000
Cl	35,4527	ClH	-22,06	188,25
Co	58,9332	CoO	-56,57	>6000
Cu	63,546	CuO	-37,3	> 6000
F	18,9984	FH	-65,44	292,69
Fe	55,847	FeO	-64,72	3687
H	1,00794	H ₂ O	-57,5	373,15
Hg	200,59	Hg	0	629,73
K	39,0983	K ₂ CO ₃	-273,93	>6000
Li	6,941	Li ₂ CO ₃	-289,75	>6000
Mg	24,305	MgO	-143,4	3533
Mn	54,93805	MnO	-91,77	>6000
Mo	95,94	MoO ₃	-177,2	1600
N	14,00674	N ₂	0	77,35
Na	22,98977	Na ₂ CO ₃	-270,3	> 6000
Ni	58,69	NiO	-57	>6000
O	15,9994	O ₂	0	90,19
P	30,97376	PO	-1,16	298,15
Pb	207,2	PbO	-44,86	>6000
S	32,066	SO ₂	-70,95	263,15
Sb	121,75	Sb ₂ O ₃	-168,56	>6000
Si	28,0855	SiO ₂ (Cuarzo)	-217,1	2230
Ti	47,88	TiO ₂	-225,2	3023,15
W	185,85	WO ₃	-200,57	2110
Zn	65,39	ZnO	-82,94	>6000
Zr	91,224	ZrO ₂	-261,7	4548
—	—	C (Grafito)	0	>6000
—	—	CO	-26,76	81,65
—	—	H ₂	0	20,35

Tabla 5.1: Datos de los productos de explosión

Parte III

ESTUDIO ECONÓMICO

Capítulo 6

CONSIDERACIONES PREVIAS

Cuando se pretende sustituir por otra, o crear una aplicación informática, con el fin de satisfacer una necesidad de cálculo, se incurre en dos tipos de costes diferentes: Los costes de desarrollo y los costes de utilización.

Aunque ambas partidas influyen en el coste total de la aplicación, el equipo de desarrollo incurre en los costes de desarrollo, mientras que los costes de utilización son cuestión del usuario.

El presente estudio económico se va a considerar desde el punto de vista del equipo de desarrollo.

El trabajo del equipo de desarrollo influye en el usuario mediante el precio de venta de la aplicación informática. El precio de venta debe incluir el coste de desarrollo, los impuestos (IVA), y el beneficio de la empresa de desarrollo.

El estudio económico que se va a realizar, es un estudio a posteriori, es decir, se va a tener en cuenta cuánto cuesta la versión Beta de Explocal , ya terminada.

Para llevar a cabo un estudio a priori, que estime el coste de una aplicación a partir de una breve descripción de esta, se debe con datos económicos del desarrollo de aplicaciones similares. De este modo es posible estimar con fiabilidad el tiempo que puede llevar finalizar, por ejemplo, el diseño y la codificación.

Capítulo 7

PRESUPUESTO DE DESARROLLO

Bibliografía

- [1] A. E. de Normalización y Certificación. *UNE 31-002-94: Cálculo de las principales características teóricas de los explosivos*. AENOR, 1994.
- [2] C. Mader. *Numerical Modeling of Explosives and Propellants, Second Edition*. Numerical Modeling of Explosives and Propellants. Taylor & Francis, 1997.
- [3] R. Meyer, J. Köhler, and A. Homburg. *Explosives*. Wiley, 2008.