

UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID
ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y DE FLUIDOS



Grado en Ingeniería en Tecnologías Industriales

TRABAJO FIN DE GRADO

“Desarrollo de un módulo para el análisis termoquímico de explosiones e integración en la plataforma SimEx”

Autor: Rubén Manuel Lebrón Mora

Tutores: Marcos Vera Coello

Juan Sánchez Monreal

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quisiera darles las gracias a mis tutores, Marcos Vera y Juan Sánchez, por confiar en mí desde el principio y darme la oportunidad de trabajar a su lado. También quiero agradecerles todo el tiempo que me han dedicado para que este proyecto saliese adelante. Y por supuesto, por trasmitirme esa pasión y entusiasmo que ponen en todo lo que hacen.

A mi familia, tanto los que están, como los que se han ido ya, por su apoyo y por inculcarme desde pequeño que el saber no ocupa lugar, sin vosotros jamás me hubiese encontrado donde estoy ahora mismo.

A mis amigos, que me han demostrado desde el principio que por muchas horas que pase delante del ordenador, siempre están ahí.

Por último, pero no menos importante, a Celia, por su comprensión y sus palabras de ánimo.

RESUMEN

En el presente proyecto se desarrolla un módulo para el análisis termoquímico de explosivos puros y mezclas explosivas de composición genérica CHNO. Para ello, se ha utilizado la extensa base de datos de propiedades de explosivos puros CHNO recogida por Kinney & Graham [1], a la que se han añadido los explosivos de nueva generación recopilados por Politzer [2] y los expuestos en el libro de explosivos de Meyer [3].

A partir de la fórmula química de la sustancia explosiva, la herramienta es capaz de determinar, utilizando distintas hipótesis de cálculo (Kamlet–Jacobs, Kistiakowsky-Wilson, Kistiakowsky-Wilson modificada, Springall-Roberts), la composición nominal de los productos de la explosión, el calor de explosión, el número de moles gaseosos producidos, la fuerza explosiva (expresada en % equivalente de TNT) y la constante de Gurney, que determina la velocidad inicial de los fragmentos primarios producidos en la explosión cuando la carga está recubierta por material de fragmentación.

También se implementan los métodos aproximados propuestos por Kamlet & Jacobs [4] para la determinación de la velocidad y la presión de detonación.

Una vez desarrollado, el módulo se integra en la plataforma SimEx, utilizada con fines docentes en el Grado de Ingeniería de la Seguridad impartido por la UC3M en el Centro Universitario de la Guardia Civil.

Para ilustrar la potencialidad de la herramienta, al final del documento se presentan algunos casos de aplicación práctica.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	11
1.1 Definición de sustancia explosiva	11
1.2 Clasificación de los explosivos.....	11
1.3 Aplicaciones de los explosivos	14
1.3.1 Aplicaciones militares	15
1.3.2 Aplicaciones civiles	15
1.4 Características generales de los explosivos	17
2. TERMOQUÍMICA DE LOS EXPLOSIVOS.....	22
2.1 Composición química de un explosivo	22
2.2 Balances de oxígeno en elementos puros.....	23
2.3 Mezclas explosivas	25
2.4 Balances de oxígeno en mezclas explosivas.....	27
2.5 Productos nominales de la explosión.....	28
2.6 Reglas para predecir los productos de detonación.....	30
2.7 Calor de explosión	34
2.8 Fuerza explosiva y aproximación de Berthelot	36
2.9 Constante de Gurney y velocidad inicial de los fragmentos primarios.....	40
2.10 Presión y velocidad de detonación	44
3. DESARROLLO PARA LA INTERFAZ DE SIMEX.....	49
3.1 Elementos.....	49
3.2 Programación de la interfaz	50
3.2.1 Regla.....	51
3.2.2 Número de compuestos.....	52
3.2.3 Masa de la carga	54
3.2.4 Elección de explosivos.....	54
3.2.5 Fracciones molares de los explosivos	55
3.2.6 Inicialización	56
3.2.7 Calcular.....	57
3.2.8 Resultados	64
3.2.9 Reiniciar.....	64
4. RESULTADO.....	66
5. PRESUPUESTO	69

6. CONCLUSIÓN	70
7. BIBLIOGRAFÍA	71
8. ANEXOS.....	73
8.1 Tabla de valores característicos para cada explosivo	73
8.1 Tabla de moles producidos durante la explosión	83

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Clasificación de los explosivos según su composición química	11
Figura 2: Clasificación de explosivos atendiendo a su composición y aplicación.	12
Figura 3: Clasificación de los explosivos según su aplicación.....	14
Figura 4: Variación de la presión con el tiempo producida por la onda expansiva en un punto fijo del espacio alejado del centro de la explosión.....	20
Figura 5a: Estructura NM (CH_3NO_2)	22
Figura 5b: Estructura TNT ($\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$)	22
Figura 6a: Estructura 2,4,6-trinitroanisole, ($\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_7$)	23
Figura 7: Relación entre el calor de explosión ΔE , el calor de combustión ΔE_{comb} y el calor de combustión de los productos de la explosión $\Delta E_{\text{comb}(\text{prod})}$	35
Figura 8: Formato del vector de los elementos guardados en MATLAB	49
Figura 9: Ejemplo de un vector de elementos	50
Figura 10: Interfaz de SimEx.....	50
Figura 11: Menú desplegable (Popup-menu) para la elección de la regla de formación de productos.	51
Figura 12: Programación interna del menú desplegable (popup-menu) del botón regla	52
Figura 13: Texto editable (Edit-text) para la elección del número de compuestos	52
Figura 14: Programación del texto editable (edit-text) del botón de número de compuestos	53
Figura 15: Error en la elección del número de compuestos.....	53
Figura 16: Texto editable (Edit-text) para la elección de la masa de la carga.....	54
Figura 17: Programación del texto editable (Edit-text) del botón de masa de la carga	54
Figura 18: Menú desplegable (Popup-menu) para la elección de los explosivos.....	55
Figura 19: texto editable (Edit-text) para la elección de las fracciones molares de los explosivos.....	56
Figura 20: Guardado de los valores de inicialización.....	57
Figura 21: Muestra de los valores de inicialización	57
Figura 22: Botón de pulsación (Push-button) para el cálculo de las características del explosivo	57
Figura 23: Switch del botón de calcular	58

Figura 24: Constantes establecidas para el cálculos de las características	61
Figura 25: If de dentro de las funciones.....	61
Figura 26: Programación de un if de una función.....	63
Figura 27: Textos estáticos de los resultados (Static-texts).....	64
Figura 28: Asignación de valores a los textos estáticos (static-texts) de los resultados	64
Figura 29: Botón de pulsación (Push-button) para el reinicio del programa.....	64
Figura 30: Ejemplo de reinicio del programa	65
Figura 31: Resultado 1	66
Figura 32: Resultado 2	66
Figura 33: Resultado 3	67
Figura 34: Resultado 4	67
Figura 35: Resultado 5	68

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Sobrepresión máxima p° en función de la distancia r en la explosión química de referencia (1 kg de TNT).	19
Tabla 2: Moles gaseosos producidos durante la detonación y balances de CO y CO ₂ para diferentes explosivos.....	24
Tabla 3: Productos producidos durante la detonación en función de la regla utilizada para predecir los productos de detonación.	34
Tabla 4: Fuerza explosiva en tanto por ciento de TNT, para diferentes elementos según la regla de formación de productos durante la explosión elegida.....	38
Tabla 5: Constante de Gurney para diferentes elementos según la regla de formación de productos durante la explosión elegida	41
Tabla 6: Presión y velocidad de detonación, para diferentes elementos según la regla de formación de productos durante la explosión elegida.....	47

ÍNDICE DE ECUACIONES

Ecuación 1. Cantidad de movimiento:.....	20
Ecuación 2. Impulso:	20
Ecuación 3. Masa molecular:.....	23
Ecuación 4. Balance de CO ₂ para elementos puros:	24
Ecuación 5. Balance de CO para elementos puros:.....	24
Ecuación 6. Número de moles:.....	25
Ecuación 7. Fracción molar:.....	26
Ecuación 8. Sumatorio de las fracciones molares:	26
Ecuación 9. Número de carbonos aparente:.....	26
Ecuación 10. Número de hidrógenos aparente:.....	26
Ecuación 11. Número de nitrógenos aparente:	26
Ecuación 12. Número de oxígenos aparente:	26
Ecuación 13. Balance de CO ₂ para mezclas explosivas:.....	28
Ecuación 14. Balance de CO para mezclas explosivas:	28
Ecuación 15. Calor de combustión del explosivo:	35
Ecuación 16. :Calor de explosión de TNT	36
Ecuación 17. Energía térmica:	36
Ecuación 18. Energía mecánica:	37
Ecuación 19. Fuerza explosiva:.....	37
Ecuación 20. Fuerza explosiva en tanto por ciento de TNT:	37
Ecuación 21. Constante de Gurney:	40
Ecuación 22. Δe :	40
Ecuación 23. :Velocidad inicial para un cilindro muy largo	42
Ecuación 24. Velocidad inicial para una esfera:	42
Ecuación 25. Velocidad inicial para sándwich planos:.....	42
Ecuación 26. Cantidad de movimiento lineal:	43
Ecuación 27. Energía cinética total:.....	43
Ecuación 28. Presión de detonación:	44
Ecuación 29. Velocidad de detonación:	44
Ecuación 30. Número de moles gaseosos producidos durante la explosión:	44
Ecuación 31. Peso molecular medio:.....	45
Ecuación 32. Calor liberado durante la explosión de detonación:.....	45



1. INTRODUCCIÓN

1.1 Definición de sustancia explosiva

El Real Decreto 230/1998, de 16 de febrero, por el que se aprueba el Reglamento de explosivos, fue publicado en el Boletín Oficial del Estado el 12 de marzo de 1998 e incluye en el artículo 10 la siguiente definición de las sustancias explosivas:

“Materias sólidas o líquidas (o mezcla de materias) que por reacción química pueden emitir gases a temperatura, presión y velocidad tales que puedan originar efectos físicos que afecten a su entorno”.

1.2 Clasificación de los explosivos

En el ámbito estatal, el organismo encargado de la clasificación de las materias explosivas es, en la actualidad, el Ministerio de Industria, Energía y Turismo. Para poder llevar a cabo dicha clasificación, se sigue una gran diversidad de factores, tales como su sensibilidad, su velocidad de detonación, su aplicación, su composición, etc.

En la Figura 1 se muestra una posible clasificación basada en la composición química de las sustancias explosivas,



Figura 1. Clasificación de los explosivos según su composición química [5]

Asimismo, en el Artículo 12 del Reglamento de explosivos se encuentra una clasificación en función de la aplicación de los explosivos, mostrada en la Figura 2.

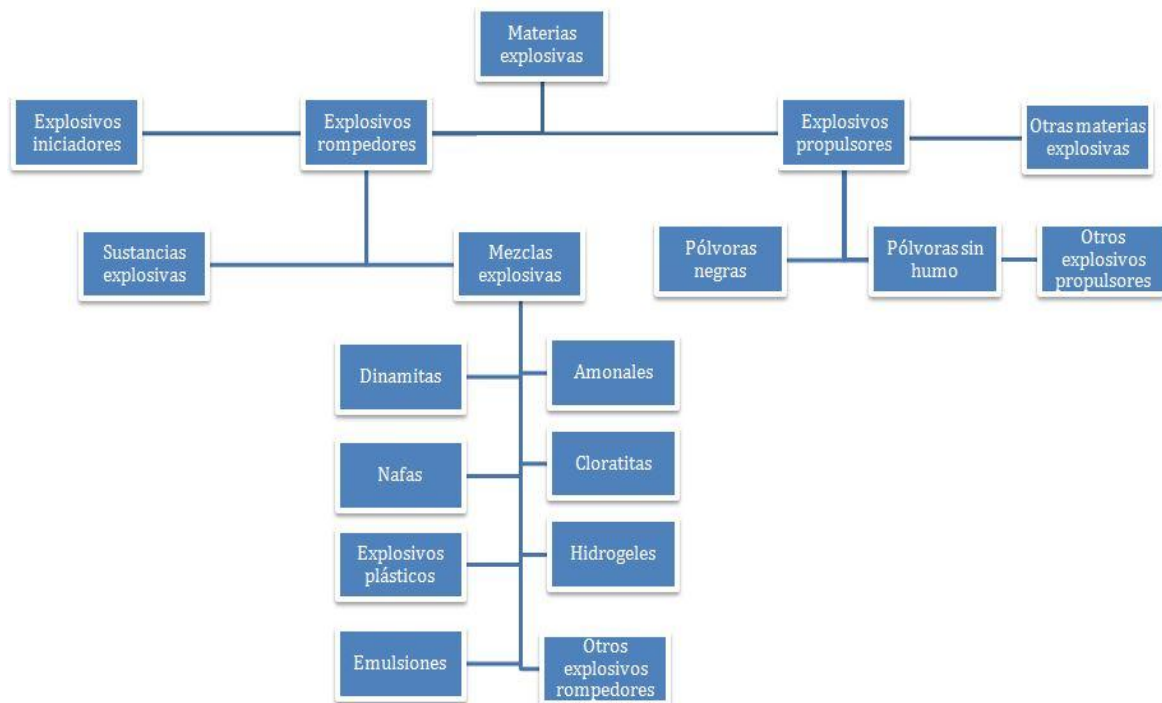


Figura 2. Clasificación de los explosivos atendiendo a su composición y aplicación.

A continuación se presenta una breve definición de los distintos tipos de sustancias explosivas que aparecen en la Figura 2.

- **Explosivos iniciadores.** También llamados primarios o detonadores. Son los sistemas de iniciación que se encargan de iniciar el proceso de detonación de cargas explosivas, es por ello que se caracterizan por una alta sensibilidad sobre todo cuando se encuentran en estado puro. Si se busca un iniciador con una sensibilidad menor, es normal mezclarlo con aceites o agua, en un proceso denominado flegmatización. Así mismo, estos explosivos se caracterizan por una pequeña liberación de energía durante su detonación, al contrario que los rompedores. El más utilizado es el nitruro de plomo, el cual se puede encontrar en diferentes tipos de iniciadores, como el cordón detonante, detonadores eléctricos o electrónicos, así como relés de microrretardo. [6]



- **Explosivos rompedores.** También llamados altos explosivos. Su detonación produce un fuerte efecto destructor. Dentro de ellos hay dos tipos:
 - **Sustancias explosivas.** Formadas por un único compuesto químico.
 - **Mezclas explosivas.** Son aquellas sustancias cuya composición está formada por más de un compuesto químico.
 - **Dinamita o explosivos tipo A.** Explosivo muy potente y de una gran estabilidad, lo que facilita su almacenamiento. Está compuesto por nitroglicerina.
 - **Amonales o explosivos tipo B-a.** Explosivo fabricado a base de nitrato amónico, trinitrotolueno (TNT) y polvo de aluminio en una proporción de 67/22/11.
 - **Nafos o explosivos tipo B-b.** Mezclas explosivas a base de nitrato de amonio y combustibles derivados del petróleo como gasolina o incluso aceite de motor en una proporción de 90-97%/10-3%.
 - **Cloratitas o explosivos tipo C.** Compuesto por clorato potásico, azufre y azúcar en una proporción de 80/10/10. Es un explosivo muy estable.
 - **Explosivos plásticos o explosivos tipo D.** Se caracterizan por su amplio rango de temperaturas de utilización y su moldeabilidad, pudiendo llegar a deformarse incluso con las manos. Destacan el C-4 y otros basados en el RDX.
 - **Hidrogeles o explosivos tipo E-a.** Están constituidos por soluciones acuosas saturadas de nitrato amónico, en las que a menudo se encuentran otras sustancias oxidantes como el nitrato de sodio y/o nitrato de calcio, en las que están dispersos los combustibles, agentes espesantes, etc.
 - **Emulsiones o explosivos tipo E-b.** También se las denomina agua en aceite, al estar la fase acuosa compuesta por sales inorgánicas disueltas en agua y la parte aceitosa por un combustible líquido del tipo hidrocarbonado [7]

- **Explosivos propulsores o bajos explosivos.** Se caracterizan por sufrir un proceso de descomposición exotérmica (deflagración) mucho más lento que los altos explosivos, generando un gran volumen de gases calientes de un modo relativamente lento y controlado, lo que permite utilizarlos para generar propulsión a lo largo del tiempo. Son los utilizados para los lanzamientos de fuegos artificiales o para propulsar cohetes y misiles.
 - **Pólvora negra u ordinaria.** Es una mezcla mecánica y no química de salitre, azufre y carbón
 - **Pólvora sin humo o blanca.** Es un propelente usado en armas de fuego. Destaca la nitroglicerina y la nitrocelulosa.

1.3 Aplicaciones de los explosivos

Como se observa en la siguiente figura, los explosivos pueden tener aplicaciones militares o civiles.

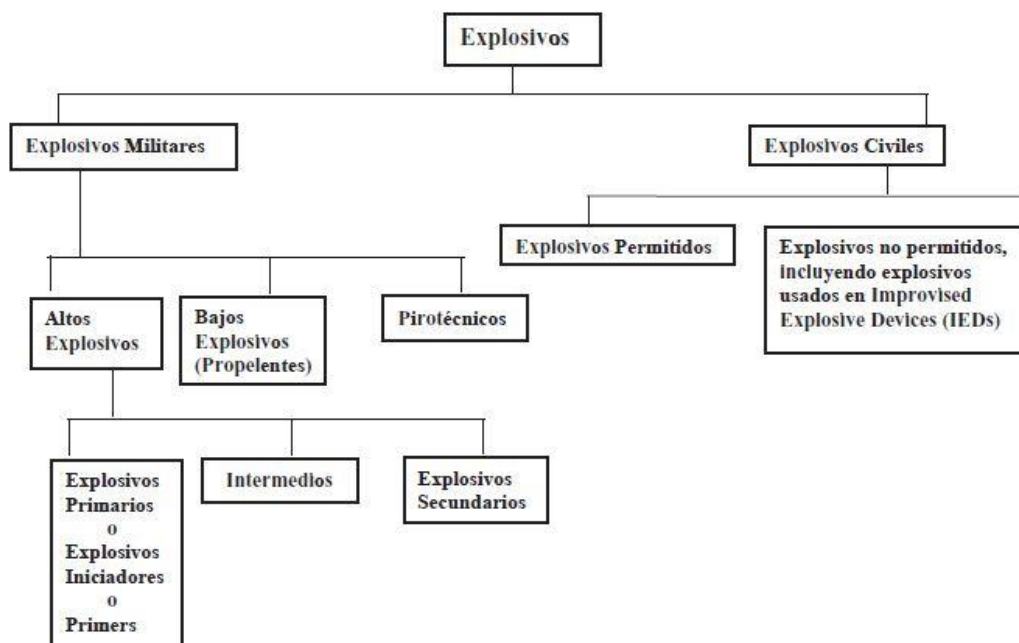


Figura 3: Clasificación de los explosivos según su aplicación [8]



1.3.1 Aplicaciones militares

Los explosivos militares son aquellos explosivos que se utilizan en las municiones del ejército. La carga principal de estas municiones debe ser muy insensible, de modo que su manipulación, almacenamiento y transporte resulten relativamente seguros. Para detonar la carga se debe recurrir por tanto a una cadena pirotécnica formada por un iniciador, seguido de un explosivo intermedio o potenciador.

Los explosivos militares deben ser física y químicamente estables en un amplio intervalo de temperaturas y humedad durante largos períodos de tiempo. Deben ser razonablemente insensibles a los impactos, como los sufridos por un proyectil de artillería cuando se dispara desde un cañón o arma de fuego, o cuando penetra en un blindaje de acero. Además, las materias primas necesarias para su fabricación deben estar fácilmente disponibles para su producción en grandes cantidades durante los periodos de guerra.

Para que una sustancia explosiva sea utilizada en ámbitos militares, tiene que poseer una alta potencia rompedora, alta velocidad de detonación, alta estabilidad térmica y baja sensibilidad, siendo de vital importancia conocer estas dos últimas características para un correcto almacenamiento.

Son utilizados como cargas explosivas y/o propulsoras de proyectiles, cargas huecas, minas antivehículos, misiles, cohetes, torpedos, bombas, ojivas, granadas, etc.

1.3.2 Aplicaciones civiles

Las aplicaciones y usos que pueden tener los explosivos en el ámbito civil son muy diversas. A continuación, se detallarán algunos de sus usos en función de algunas de sus aplicaciones [9].

- **Aplicaciones en la industria minera y extractora**
 - Industria extractiva de minerales, en procesos de voladura.
 - Extinción de incendios en pozos de petróleo.



- Prospecciones sísmicas de petróleo y gas, etc.
- **Aplicaciones en ingeniería civil**
 - Obras de ingeniería civil, tales como la construcción de túneles, carreteras, canales, etc.
 - Demolición de estructuras.
- **Aplicaciones espaciales**
 - Propulsión de cohetes, misiles, satélites con fines civiles.
 - Sistema de eyección de pilotos.
 - Etc.
- **Aplicaciones nucleares**
 - Fusión.
 - Fisión.
- **Aplicaciones en agricultura**
 - Deforestación.
 - Rotura de piedras.
 - Operaciones de zanjeo y drenaje.
 - Perforación de pozos.
 - Gestión de huertos (cohetes antigranizo, humo antihielo, etc.).
- **Aplicaciones en la industria alimentaria**
 - Fabricación de alimentos envasados auto calentados.
- **Aplicaciones en la industria del automóvil**
 - Airbags.



- **Aplicaciones en la industria médica**
 - Uso en medicamentos. Actualmente, su uso reside en comprimidos que permiten dilatar los vasos sanguíneos.

1.4 Características generales de los explosivos

Entre las características que definen a un explosivo destacan:

- **Estabilidad química.** Es la capacidad que tiene un explosivo de mantener su estructura química durante un cierto tiempo.

Para poder mantener la estabilidad química, es muy importante un almacenamiento adecuado y no muy prolongado, así como unas condiciones atmosféricas apropiadas.

Hay aspectos que muestran las pérdidas de estabilidad química, como los sudores o manchas verdes que aparecen en los explosivos con nitroglicerina.

- **Sensibilidad.** El concepto de sensibilidad hace referencia a dos propiedades inherentes de los explosivos:
 - La facilidad de iniciación
 - La capacidad de propagación de la detonación.

Una sustancia explosiva se considera sensible cuando se inicia y detona con facilidad ante la acción de un agente externo [10].

- **Potencia explosiva.** También denominada fuerza rompedora, aunque es más conocida por su término inglés “brissance”, de origen francés “briser”, cuyo significado es fracturar o romper.

La potencia rompedora se usa en gran medida para obtener la eficacia de los explosivos, ya que es una magnitud que mide la rapidez con la que se alcanza la máxima presión.

De este modo, podemos definir un explosivo rompedor como aquel que es capaz de alcanzar su máxima presión en muy poco tiempo, lo que crea una onda de choque muy intensa capaz de romper los elementos circundantes. [11]



De este modo, entendemos el porqué de su nombre “potencia rompedora”, ya que es también una medida de la capacidad de rotura del explosivo, pero hay que evitar un error común, el de relacionarlo directamente con la capacidad de trabajo del explosivo, que depende de otros parámetros.

Hay diferentes métodos experimentales para medir la fuerza explosiva como:

- **Aplastamiento de arena.** Se observa el nivel de compactación de la arena tras la detonación de un explosivo.
- **Método Trauzl.** Consiste en rellenar una cavidad cilíndrica en un bloque de plomo con 10 gramos de explosivo, y anotar la variación de volumen que ha producido la detonación.
- **Movimiento de reacción de un mortero balístico o balancín.** Consiste en comparar la propulsión de un mortero de acero montado sobre un péndulo balístico por efecto de los gases, cuando se hace detonar una carga de 10 gramos de explosivo. Es un método válido para los explosivos tipo dinamita, pero no se puede utilizar con explosivos como el ANFO debido al pequeño diámetro del recipiente, del orden de 20 mm. Sólo se puede usar para explosivos que son sensibles a detonadores y con tiempo de reacción pequeños.
- **Aplastamiento de un cilindro.** Establece la fuerza explosiva en función de la capacidad de fragmentación de la roca, producida por el aplastamiento de una carga sobre un molde cilíndrico de metal.
- **Método de la placa.** Sobre una placa de acero o aluminio se detona una carga cilíndrica del explosivo que se quiere utilizar. La deformación que se produce en la placa nos da el valor de la potencia explosiva.
- **Método de la potencia sísmica.** Consiste en hacer explotar una carga en un medio rocoso isótropo y registrar la perturbación producida a una cierta distancia. Se usa el explosivo ANFO como patrón. La variación de las vibraciones generadas, es igual a la energía de explosión elevada a $2/3$. [10]
- **Método del cráter.** Se encarga de determinar la profundidad crítica (la carga de explosivo rompe la roca superficialmente) y óptima (produce el cráter de mayor volumen). Se usan cargas esféricas, concentradas o en forma de cilindro, siempre que no sea muy espigado. El problema, es la dificultad de tener rocas homogéneas, así como la necesidad de realizar



una gran cantidad de disparos, ya que el volumen máximo se encuentra entre el caso en el que la carga es muy superficial (la mayor parte de la energía se transmite a la atmósfera) y cuando la carga está muy profunda (toda la energía se transmite a la roca, fragmentándola). [12]

Ninguno de ellos nos serviría para comparar las fuerzas rompedoras de diferentes compuestos, pero sí para calibrar la potencia rompedora relativa al TNT.

Si queremos comparar valores es necesario hacer experimentos de campo, como los expuestos anteriormente.

Tras estudiar todos los explosivos con distintos análisis, se demostró que la ciclotrimetilentrinitramina, más conocida como RDX, es uno de los explosivos más rompedores. [13]

Cuando un explosivo es detonado, alcanza una sobrepresión (p^0) muy alta en un tiempo muy pequeño. Dicha sobrepresión va reduciéndose hasta llegar a 0, o en algunos casos a valores negativos, cuando se producen dichos valores, se suelen despreciar debido a su bajo valor respecto a la presión máxima que alcanza al inicio.

Si se da el caso de que la sobrepresión pasa a negativo, vuelve a subir hasta que llega a un valor establecido en torno a 0, al haber perdido toda la fuerza.

La figura 4 es un ejemplo ilustrativo que muestra la sobrepresión que genera la explosión de una carga esférica de 1 kg de TNT (explosión química de referencia) a una cierta distancia del centro de la explosión.

Recuérdese que la fuerza que ejerce una sobrepresión de 1 atmósfera sobre una superficie de 1 m^2 es de unos 100.000 N, esto es, 10 toneladas-fuerza.

Para explosiones de mayor intensidad, la distancia a la que se alcanza una cierta sobrepresión crece con la raíz cúbica de la energía liberada $W^{1/3}$.

r [m]	0.5	1	2	4	8	16	32
P⁰ [atm]	39	9.8	2	0.5	0.13	0.035	0.026

Tabla 1: Sobrepresión máxima P^0 en función de la distancia r en la explosión química de referencia (1 kg de TNT).

En la tabla 1, se aprecia la sobrepresión máxima P° en función de la distancia r en la explosión química de referencia (1 kg de TNT), habiéndose obtenido los valores siguientes, para un diámetro de carga de 10.6 cm

Por ejemplo, en una explosión de 1000 kg de TNT (detonación de una furgoneta bomba), se alcanzarán sobrepresiones de 0.5 atmósferas a distancias del orden de 40 m.

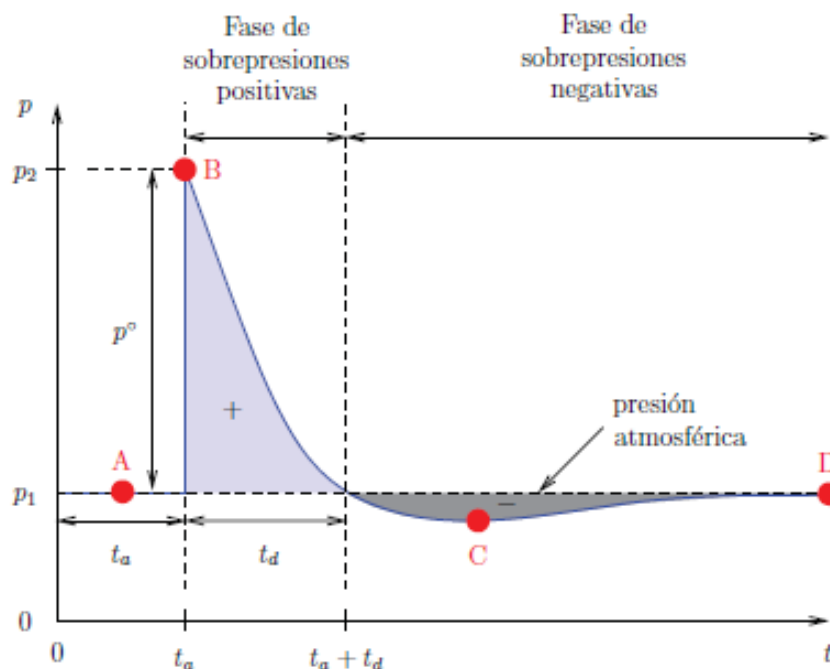


Figura 4: Variación de la presión con el tiempo producida por la onda expansiva en un punto fijo del espacio alejado del centro de la explosión.

La cantidad de movimiento es igual a la fuerza por tiempo:

$$m \cdot \Delta v = \text{Fuerza} \cdot \Delta t \quad \text{Ecuación 1}$$

Además, el impulso es igual a la cantidad de movimiento.

$$\text{Impulso} = m \cdot \Delta v \quad \text{Ecuación 2}$$

Por lo que para poder determinar la fuerza que ejerce un explosivo, es necesario conocer su impulso por unidad de área. Este valor es el área integrada bajo la curva presión-tiempo de la figura 4. Tal y como se mencionó anteriormente, los valores negativos se desprecian y por ello sólo se tiene en cuenta la sobrepresión positiva.



Como consecuencia, dos explosiones que encierran la misma área en un gráfico sobrepresión-tiempo pueden tener la misma fuerza. Un explosivo con una alta sobrepresión y bajos tiempos, engloba la misma área que un explosivo que se desarrolla en un gran tiempo y sobrepresiones muy bajas.

- **Velocidad de detonación.** Es una de las cualidades de los explosivos más importantes, ya que la potencia de un explosivo es mayor, cuanto mayor sea su velocidad de detonación, entendiendo por detonación la transformación casi inmediata de la materia sólida en gases a una altísima temperatura.

Después de distintos análisis, se ha demostrado que la potencia rompedora es proporcional a la velocidad de detonación.

- **Densidad de encartuchado.** Depende de la granulometría de los componentes sólidos, así como de los tipos de materias primas empleadas en la fabricación.

Es muy importante la densidad, ya que al estar los barrenos (perforaciones en el elemento a explotar) llenos de explosivos, si su densidad es menor a 1 kg/m^3 , los cartuchos flotarían impidiendo el llenado del barreno.

- **Resistencia al agua.** Hay 3 tipos de resistencia al agua:
 - Resistencia al contacto con el agua. Uno de los peores exponentes de esta resistencia son los ANFOS.
 - Resistencia a la humedad. Los más representativos son los ANFOS.
 - Resistencia al agua bajo presión de la misma. Está relacionada con el primer tipo de resistencia, ya que hay contacto directo con el agua al estar a bajas profundidades. Se usan explosivos con aditivos de metales pesados.
- **Humos.** Es una característica esencial para voladuras en minas subterráneas, ya que los gases producidos contienen CO y vapores nitrosos, los cuales son muy peligrosos para la salud de las personas. Por ello, se exige para este tipo de voladuras, la cantidad necesaria de O_2 para que se produzca la combustión completa.

2. TERMOQUÍMICA DE LOS EXPLOSIVOS

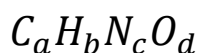
2.1 Composición química de un explosivo

En este proyecto, tal y como hemos dicho anteriormente, nos centraremos en los explosivos CHNO y en variaciones de los mismos, que se pueden obtener al añadir metales como el Al o el Mg.

Todos los explosivos tienen una composición química característica.

Para hacer referencia a la composición química se utilizan las formulas químicas, que pueden ir desde composiciones tan simples como el CH_3NO_2 hasta otras tan complejas como $\text{C}_{24}\text{H}_6\text{N}_{16}\text{O}_{24}$, pasando por el conocido $\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$ (TNT).

Los explosivos CHNO, siguen una formula química común para todos los explosivos de la familia



donde a, b, c, d son números racionales que representan respectivamente el número de átomos de carbono, hidrógeno, nitrógeno y oxígeno presentes en cada explosivo.

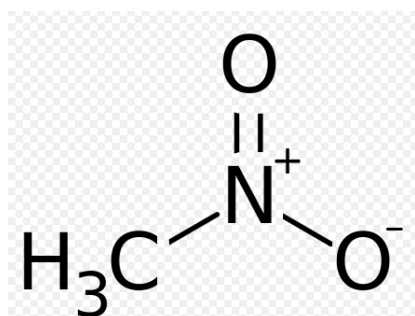


Figura 5a: Estructura del NM (CH_3NO_2)



Figura 5b: Estructura del TNT ($\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$)

Los explosivos expuestos en las figuras 5a y 5b son un ejemplo muy instructivo para entender el resto de explosivos orgánicos. Como podemos ver, están constituidos por una estructura de hidrocarburos a la que le añadimos grupos sustituyentes con un oxígeno muy débilmente enlazado.

La fórmula química aparente $C_a H_b N_c O_d$ puede coincidir para distintos explosivos si tienen la misma cantidad de cada elemento, por ello, en los casos en los que pueda existir algún tipo de confusión, se utilizan las fórmulas químicas agrupadas por subunidades estructurales, en lugar de por los átomos de cada elemento como hemos hecho en los ejemplos anteriores.



Como ejemplo, se pueden observar el 2,4,6-trinitroanisole ($C_7H_5N_3O_7$) y el 2,4,6-trinitro-m-cresol ($C_7H_5N_3O_7$), ambos explosivos tienen la misma fórmula química, por lo que para diferenciarlos, sería necesaria su fórmula agrupada por subunidades estructurales. En las figuras 6a y 6b están representadas las estructuras de ambos explosivos.

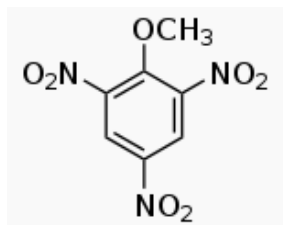


Figura 6a: Estructura del 2,4,6-trinitroanisole ($C_7H_5N_3O_7$)

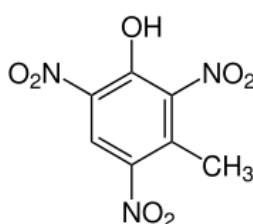


Figura 6b: Estructura del 2,4,6-trinitro-m-cresol ($C_7H_5N_3O_7$)

2.2 Balances de oxígeno para elementos puros

Uno de los aspectos más importantes de una molécula de explosivo es la cantidad de oxígeno presente. Esta se suele expresar como la diferencia entre el oxígeno disponible en la molécula y el que sería necesario para oxidar todo el carbono a CO o CO_2 y todo el hidrógeno a H_2O , expresada en tanto por ciento de la masa total M del explosivo. Esto permite saber de antemano si el explosivo es deficitario o si por el contrario tiene exceso de oxígeno.

El proceso utilizado para conocerlo es denominado balance de oxígeno para la oxidación del explosivo a CO y a CO_2 .

Como explicamos en el apartado anterior, a , b , c , d representan los átomos de carbono, hidrógeno, nitrógeno y oxígeno que componen la molécula. Por otro lado, la masa molecular de cada uno de ellos es 12, 1, 14 y 16 g/mol respectivamente.

Es por ello que el peso molecular de los explosivos CHNO es:

$$M = (12 \cdot a) + (1 \cdot b) + (14 \cdot c) + (16 \cdot d) \text{ g/mol} \quad \text{Ecuación 3}$$

Una vez calculado el peso molecular, ya se pueden calcular los balances de oxígeno a CO y a CO_2 , cuyas fórmulas son:



$$\text{Balance de Oxígeno a CO}_2 (\%) = \frac{16(d - 2a - \frac{b}{2})}{M} \cdot 100 \quad \text{Ecuación 4}$$

$$\text{Balance de Oxígeno a CO (\%)} = \frac{16(d - a - \frac{b}{2})}{M} \cdot 100 \quad \text{Ecuación 5}$$

Como se puede apreciar en las fórmulas, el número de nitrógenos presente en el explosivo no está incluido en las ecuaciones de los balances. Esto se debe a que los nitrógenos solo producen N₂, no sufriendo ninguna interacción con el oxígeno.

Por último, en el balance a CO, hay una “a” que se resta, esto se debe a que por cada oxígeno se consume un carbono, y el b/2 es debido a que por cada oxígeno se consumen 2 hidrógenos. Sin embargo, en el balance de CO₂, aparece el término “2a”, porque por cada oxígeno se consume solo 1/2 de carbono.

Elemento	Balance de CO	Balance de CO2
CH3NO2	-13,11	-39,34
CH3NO3	10,39	-10,39
CH3N3O3	7,62	-7,62
CH4N4O2	-15,38	-30,77
C2H4N2O6	21,05	0
C3H6N6O6	0	-21,62
C4H8N8O8	0	-21,62
C7H5N3O6	-24,67	-74,01

Tabla 2: Moles gaseosos producidos durante la detonación y balances de CO y CO₂ para diferentes explosivos.



2.3. Mezclas explosivas

Aunque haya una amplia gama de sustancias explosivas del tipo CHNO, no siempre se consiguen las características necesarias, por ello que se comenzó a trabajar con mezclas de estas sustancias explosivas e incluso en algunos casos con otros tipos de elementos como puede ser el BINDER o metales como el Al.

Estas mezclas nos proporcionan una alta variedad de propiedades que no podríamos obtener con explosivos puros.

El CYCLOTOL es un ejemplo de mezcla explosiva. Está compuesta por un 77% de RDX ($C_3H_6N_6O_6$) y un 23% de TNT ($C_7H_5N_3O_6$). Para obtener la fórmula química de cualquier mezcla, es necesario conocer la masa final que se espera conseguir del explosivo. Así, por ejemplo:

Para disponer de 1000g de CYCLOTOL, serían necesarios 770g de RDX y 230g de TNT.

Una vez queda definida la masa a detonar, se calcula la composición molar, la cual se especifica mediante las fracciones molares de los distintos explosivos que componen la mezcla. Para ello, en primer lugar, debemos calcular el número de moles totales de la mezcla.

$$N^{\circ} \text{ moles} = \frac{\text{masa}_{\text{explosivo 1}}}{M_{\text{explosivo 1}}} + \frac{\text{masa}_{\text{explosivo 2}}}{M_{\text{explosivo 2}}} \dots \frac{\text{masa}_{\text{explosivo n}}}{M_{\text{explosivo n}}} \quad \text{Ecuación 6}$$

Siguiendo con el ejemplo de los 1000g de CYCLOTOL, el número total de moles de explosivo sería:

$$N^{\circ} \text{ moles} = \frac{\text{masa}_{RDX}}{M_{RDX}} + \frac{\text{masa}_{TNT}}{M_{TNT}}$$

$$N^{\circ} \text{ moles} = \frac{770}{(12 \cdot 3) + (6) + (14 \cdot 6) + (16 \cdot 6)} + \frac{230}{(12 \cdot 7) + (5) + (14 \cdot 3) + (16 \cdot 6)}$$

$$N^{\circ} \text{ moles} = 3.47 + 1.01 = 4.48 \text{ moles}$$

Una vez calculado los moles totales, ya se puede proceder al cálculo de la fracción molar.

La fracción molar es el número de moles de un compuesto entre el número de moles totales. La suma de las fracciones molares es 1.



$$\text{Fracción molar}_1 = \frac{N^{\circ} \text{ moles}_{\text{expl } 1}}{N^{\circ} \text{ moles}_{\text{total}}} \quad \text{Ecuación 7}$$

$$\text{Fracción molar}_{RDX} = \frac{N^{\circ} \text{ moles}_{RDX}}{N^{\circ} \text{ moles}_{RDX} + N^{\circ} \text{ moles}_{TNT}} = \frac{3.47}{4.48} = 0.775$$

$$\text{Fracción molar}_{TNT} = \frac{N^{\circ} \text{ moles}_{TNT}}{N^{\circ} \text{ moles}_{RDX} + N^{\circ} \text{ moles}_{TNT}} = \frac{1.01}{4.48} = 0.225$$

$$\sum_{i=1}^M \text{Fracción molar} = 1 \quad \text{Ecuación 8}$$

$$0.775 + 0.225 = 1$$

Ahora, podemos calcular la cantidad de C, H, N y O aparente que tiene el CYCLOTOL. Para ello, se utiliza la composición molar y la fórmula química de cada explosivo.

$$C_{ap} = (\text{Fr molar}_{\text{expl } 1} \cdot C_{\text{expl } 1}) + (\text{Fr molar}_{\text{expl } 2} \cdot C_{\text{expl } 2}) \cdots (\text{Fr molar}_{\text{expl } n} \cdot C_{\text{expl } n})$$

Ecuación 9

$$H_{ap} = (\text{Fr molar}_{\text{expl } 1} \cdot H_{\text{expl } 1}) + (\text{Fr molar}_{\text{expl } 2} \cdot H_{\text{expl } 2}) \cdots (\text{Fr molar}_{\text{expl } n} \cdot H_{\text{expl } n})$$

Ecuación 10

$$N_{ap} = (\text{Fr molar}_{\text{expl } 1} \cdot N_{\text{expl } 1}) + (\text{Fr molar}_{\text{expl } 2} \cdot N_{\text{expl } 2}) \cdots (\text{Fr molar}_{\text{expl } n} \cdot N_{\text{expl } n})$$

Ecuación 11

$$O_{ap} = (\text{Fr molar}_{\text{expl } 1} \cdot O_{\text{expl } 1}) + (\text{Fr molar}_{\text{expl } 2} \cdot O_{\text{expl } 2}) \cdots (\text{Fr molar}_{\text{expl } n} \cdot O_{\text{expl } n})$$

Ecuación 12

$$C_{ap} = (0.775 \cdot 3) + (0.225 \cdot 7) = 3.9$$

$$H_{ap} = (0.775 \cdot 6) + (0.225 \cdot 5) = 5.77$$

$$N_{ap} = (0.775 \cdot 6) + (0.225 \cdot 3) = 5.32$$

$$O_{ap} = (0.775 \cdot 6) + (0.225 \cdot 6) = 6$$



Una vez se dispone de la fórmula química del compuesto ($C_{3.9}H_{5.77}N_{5.32}O_6$) ya se puede proceder a realizar los cálculos necesarios para obtener el resto de características del explosivo.

Si comparamos la fórmula química obtenida ($C_{3.9}H_{5.77}N_{5.32}O_6$) con la que proporciona Kinney Graham ($C_{5.045}H_{7.461}N_{6.876}O_{7.753}$), se observa una gran diferencia, aunque es posible igualarlas, multiplicando por un escalar.

Para poder conocer dicho escalar, solo hace falta dividir los pesos moleculares de ambas fórmulas químicas. El peso molecular es 288 para Kinney Graham, mientras que para nuestro caso es 223.

$$\frac{288}{223} = 1.292$$

Si multiplicamos cada uno de los términos de nuestra fórmula química por dicho escalar, llegaremos a la fórmula química de Kinney Graham.

$$3.9 \cdot 1.292 = 5.04$$

$$5.77 \cdot 1.292 = 7.45$$

$$5.32 \cdot 1.292 = 6.87$$

$$6 \cdot 1.292 = 7.7$$

2.4. Balance de oxígeno para mezclas explosivas

Para el caso de las mezclas hay 2 métodos de cálculo.

- Método 1: consiste en obtener la fórmula química de la mezcla. Una vez obtenida, se trata la mezcla como un explosivo puro, siguiendo las fórmulas expuestas anteriormente.

El CYCLOTOL, es un ejemplo de mezcla explosiva en proporción de (77% RDX Y 23% TNT) y cuya fórmula química es $C_{3.9}H_{5.77}N_{5.32}O_6$. Aplicando las fórmulas obtenemos:

$$\text{Balance de } CO_2 (\%) = \frac{16(6 - 2 \cdot 3.9 - \frac{5.77}{2})}{223} \cdot 100 = -33.61 \%$$

$$\text{Balance de } CO (\%) = \frac{16(6 - 3.9 - \frac{5.77}{2})}{M} \cdot 100 = -5.63 \%$$



- Método 2: Consiste en calcular las fracciones másicas. Una vez obtenidas, se realiza la suma ponderada de los balances de oxígeno de las sustancias explosivas que componen la mezcla tal y como se observa en las siguientes fórmulas:

$$\begin{aligned} \text{Balance } CO_2 &= (\text{Frac molar}_{expl 1} \cdot \text{Balance } CO_{2,expl 1}) + (\text{Frac molar}_{expl 2} \cdot \\ &\text{Balance } CO_{2,expl 2}) \cdots (\text{Frac molar}_{expl n} \cdot \text{Balance } CO_{2,expl n}) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 13}$$

$$\begin{aligned} \text{Balance } CO &= (\text{Frac molar}_{expl 1} \cdot \text{Balance } CO_{expl 1}) + (\text{Frac molar}_{expl 2} \cdot \\ &\text{Balance } CO_{expl 2}) \cdots (\text{Frac molar}_{expl n} \cdot \text{Balance } CO_{expl n}) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 14}$$

Para el desarrollo del segundo método, es necesario saber los balances de oxígeno de los explosivos puros que forman la mezcla. Sabemos que los balances de CO_2 del TNT y del RDX, que forman al CYCLOTOL, son -74.01 y -21.62 respectivamente y el balance del CO es -24.67 y 0.

Por lo que utilizando los datos relativos a las fracciones molares obtenidos en el apartado de mezclas de explosivos obtenemos:

$$\text{Balance } CO_2 = (0.775 \cdot (-21.62)) + (0.225 \cdot (-74.01)) = -33.41 \%$$

$$\text{Balance } CO = (0.775 \cdot (0)) + (0.225 \cdot (-24.67)) = -5.55 \%$$

Como se puede observar, la diferencia entre ambos métodos, es prácticamente despreciable, por lo que se deja a gusto del lector el método a utilizar.

2.5. Productos nominales de la explosión

Cuando se produce la detonación de un explosivo, se generan una gran variedad de productos, tanto sólidos como gaseosos.

El estudio de la composición de los productos de la explosión es muy complejo y difícil de determinar, ya que los productos no solo se forman durante la detonación, sino también en las reacciones de oxidación que tienen lugar posteriormente en el ambiente en el que se ha producido la detonación.



Los productos directos que se producen en mayor cantidad son C(s), CO, CO₂, H₂, H₂O, O₂ Y N₂, pero no son los únicos, ya que se pueden apreciar trazas de óxidos de nitrógeno como el NO, NO₂ Y N₂O₃. Además de los productos que se acaban de mencionar, se pueden producir otros compuestos que no son estables a temperatura ambiente.

Todos estos productos hacen que el cálculo sea totalmente inabarcable y haya que establecer una serie de condiciones que hagan posible el cálculo.

En general, si se conocen la temperatura y la presión de la mezcla de productos de la explosión, podría calcularse su composición de equilibrio haciendo uso de consideraciones termodinámicas, pero estas consideraciones implicarían desarrollar una serie de cálculos al alcance únicamente de programas de códigos termoquímicos como RUBY, CHEETAH o EXPLO 5. Sin embargo, también se pueden realizar cálculos comparativos entre explosivos, asignando una composición nominal a los productos directos mayoritarios que hemos definido anteriormente.

Una vez definidas las características con las que se desarrollarán los cálculos, explicaremos el método llevado a cabo, sin olvidar que no es más que una aproximación a los valores reales.

El CO, CO₂, H₂O y H₂, se formarán unos u otros en función de la cantidad de oxígeno que disponga el explosivo. Por el contrario, el N₂, se forma para todos los CHNO, ya que no reacciona con ningún otro elemento.

El C(s) y el H₂, son productos que sólo se forman en explosivos muy deficitarios en oxígeno, ya que no hay oxígeno suficiente para conseguir oxidar el C(s) a CO o CO₂ o bien formar H₂O a partir del H₂.

Por último, el O₂, solo se forma en aquellos casos en los que la cantidad de oxígeno es mayor de la necesaria para oxidar completamente todo el C(s) a CO₂ y todo el H a H₂O.

Tal y como definió Kinney Graham en la década de los 60, la composición nominal queda determinada por el instante de la detonación que queramos estudiar:

- Detonación. Momento exacto en el que se produce la explosión. En este instante se producen presiones muy altas, al mismo tiempo que el oxígeno pasa a vapor de agua y comienza a oxidar el C(s) a CO₂. El oxígeno sobrante forma O₂.
- Bola de fuego. Es el tiempo intermedio entre la detonación y el momento de la congelación (se explica más adelante). Hay unas temperaturas y presiones menores que las producidas durante la detonación. Por su parte, el oxígeno oxida el C(s) a CO en primer lugar, posteriormente forma H₂O y por último CO₂. El oxígeno restante forma O₂.



- Productos gaseosos expandidos. La detonación está a punto de llegar a su fin. La presión y la temperatura son muy bajas en comparación con las iniciales. El oxígeno inicial oxida el C(s) a CO, posteriormente oxida el C(s) restante a CO₂ y por último forma H₂O. El oxígeno sobrante se queda en el ambiente en forma de O₂.

Para la mayoría de los cálculos que vamos a desarrollar, se utilizan las condiciones de la bola de fuego, utilizándose las condiciones de detonación para los explosivos a los que añadamos Al.

Los productos definidos se encuentran en equilibrio químico a la presión y temperatura de la explosión, es por ello, que según el tiempo pasa, la temperatura y la presión bajan y el equilibrio se va desplazando también hacia especies más estables. El proceso continúa hasta que se llega a la llamada congelación, punto en el cual, ya no hay más cambios en la composición.

Es importante matizar que la congelación depende de factores como la velocidad de enfriamiento o la relación entre volumen y superficie del contenedor. Es por ello que la composición de los productos puede ser diferente en función de las condiciones del medio.

2.6 Reglas para predecir los productos de detonación

La predicción de los productos de detonación ha seguido desde la década de los 60 la teoría desarrollada por Kinney Graham, según la cual los explosivos seguían la regla de Kistiakowsky-Wilson, que explicaremos más adelante. Pero a finales de 2010, la científica Jacqueline Akhavan, empezó a recopilar información, como la expuesta por Harries Muthurajan [14], sobre las diferentes reglas que se habían desarrollado, exponiéndolas en su libro "Química de los explosivos". Este libro diferencia entre 4 reglas, encontrándose entre ellas la expuesta por Graham. [15]

La teoría de Akhavan está mucho más actualizada, por lo que los cálculos de predicción de los productos de detonación se calculan con las 4 reglas que expone Akhavan en su libro:

1. Kistiakowsky-Wilson, a la que nos referiremos como KW y que era la defendida por Graham en los años 60. Es la regla más utilizada en el ámbito de los explosivos CHNO, debido a su simplicidad y exactitud. Esta regla sigue las condiciones de la bola de fuego desarrollada en el punto 2.4. La regla KW asigna el oxígeno en el siguiente orden:
 - a. El oxígeno oxida el carbono en monóxido de carbono, $C \rightarrow CO$, en caso de no haber oxígeno, el carbono mantiene su forma sólida.

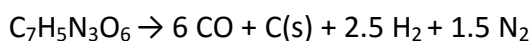


- b. El oxígeno sobrante del paso “a” reacciona con el hidrógeno presente para formar H_2O , $H_2 \rightarrow H_2O$. Si no queda más oxígeno, el hidrógeno mantiene su forma de H_2 .
- c. El oxígeno sobrante del paso “b” oxida el monóxido de carbono formado en el paso “a”, $CO \rightarrow CO_2$
- d. El oxígeno restante forma O_2 .

Ejemplo: TNT ($C_7H_5N_3O_6$)

$6 C + 6 O \rightarrow 6 CO$ En el paso “a” se ha utilizado todo el oxígeno presente, por lo que el C restante se queda en $C(s)$.

Cuando vamos a realizar el segundo y tercer paso, vemos que no queda oxígeno, por lo que no se forma H_2O ni podemos oxidar el monóxido de carbono a dióxido de carbono, formándose:



2. Modified Kistiakowsky-Wilson, a la que nos referiremos como Mod-KW. Fue desarrollada años más tarde, al apreciarse una mayor precisión en las características de los explosivos, para balances de CO_2 menor del 40%. La asignación de oxígenos es la siguiente:
 - a. El oxígeno reacciona con el hidrógeno presente para formar H_2O , $H_2 \rightarrow H_2O$. Si no queda más oxígeno, el hidrógeno mantiene su forma de H_2 .
 - b. El oxígeno restante del paso “a” oxida el carbono a monóxido de carbono $C(s) \rightarrow CO$, en caso de no haber oxígeno, el carbono mantiene su forma sólida $C(s)$.
 - c. El oxígeno restante oxida el monóxido de carbono en dióxido de carbono $CO \rightarrow CO_2$, en caso de no sobrar oxígeno, el CO no oxida a CO_2 .
 - d. El oxígeno sobrante forma O_2 .

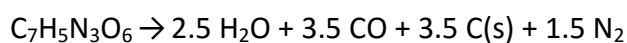
Ejemplo: TNT ($C_7H_5N_3O_6$)

$2.5 H_2 + 2.5 O \rightarrow 2.5 H_2O$ Hay más oxígeno que hidrógeno, por lo que aún queda O_2 para los siguientes pasos.

$3.5 C + 3.5 O \rightarrow 3.5 CO$. El oxígeno se agota en este paso, por lo que ha sido imposible oxidar todos los carbonos a CO . Quedando 3.5 C en estado sólido.



El tercer paso, no se puede realizar por el mismo motivo que no hemos podido oxidar todos los carbonos, la falta de oxígeno. Por lo que finalmente se ha formado:



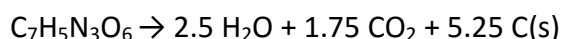
3. Kamlet-Jacobs, a la que nos referiremos como KJ. Esta regla no considera en ningún momento la oxidación del carbono en estado sólido a monóxido de carbono. Es por ello que todo el carbono se encuentra únicamente en estado sólido o en forma de dióxido de carbono. La asignación de oxígenos es la siguiente:

- El oxígeno transforma el hidrógeno en H_2O . $\text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$, en caso de no haber oxígeno, el hidrógeno se queda en forma de H_2 .
- El oxígeno restante oxida el carbono a dióxido de carbono $\text{C(s)} \rightarrow \text{CO}_2$, Si no hay oxígeno sobrante, el carbono mantiene su forma sólida.
- Todo el oxígeno sobrante se queda en forma de O_2 .

Ejemplo: TNT ($\text{C}_7\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_6$)

$2.5 \text{H}_2 + 2.5 \text{O} \rightarrow 2.5 \text{H}_2\text{O}$ Hay más oxígeno que hidrógeno, por lo que aún nos queda O_2 para los siguientes pasos.

$1.75 \text{C} + 3.5 \text{O} \rightarrow 1.75 \text{CO}_2$. El oxígeno se agota en este paso, por lo que ha sido imposible oxidar todos los carbonos a CO_2 . Quedando 5.25C en estado sólido. Por lo que se ha formado:



4. Springall-Roberts, a la que nos referiremos como SR. Es el método más sofisticado y complejo de los cuatro. Sigue la misma asignación de oxígenos que KW durante los tres primeros pasos, produciéndose un cambio en la asignación de oxígenos a partir del cuarto paso.

- El oxígeno oxida el carbono en monóxido de carbono, $\text{C} \rightarrow \text{CO}$, en caso de no haber oxígeno, el carbono mantiene su forma sólida.
- El oxígeno restante forma H_2O , $\text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$.
- El oxígeno restante comienza a oxidar el monóxido de carbono formado en el paso "a" $\text{CO} \rightarrow \text{CO}_2$, en caso de no haber sobrado oxígeno, el carbono continua en forma de CO .
- Un tercio del CO presente en el paso "c" es transformado en CO_2 y C(s) .
- Un sexto del CO presente en el paso "c" es transformado en H_2O y C(s) . Para el desarrollo de este paso, se utilizan tantos H_2 (producido durante los primeros pasos), como resultado del producto de CO por $1/6$. En el caso de no haberse formado H_2 en los pasos anteriores, no se realizaría este paso.



Ejemplo: TNT ($C_7H_5N_3O_6$)

$6 C + 6 O \rightarrow 6 CO$ Se utiliza todo el oxígeno presente, por lo que el C restante se queda en C(s).

A la hora de realizar el segundo y tercer paso, se observa que no queda oxígeno, por lo que no se forma H_2O ni podemos oxidar el monóxido de carbono a dióxido de carbono.

$1/3(6 CO) = 2CO \rightarrow CO_2 + C(s)$. En este paso eliminamos 2CO de los productos que teníamos, pero a cambio se consigue CO_2 y C(s).

$1/6(6CO) = CO + H_2 \rightarrow H_2O + C(s)$. En este paso se elimina un CO y un H_2 de los productos que teníamos, pero a cambio se obtiene un C(s) y una molécula de H_2O . Se ha formado:



A continuación se presenta una tabla con diferentes explosivos y los productos que generan según la regla que se utilice.

Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2
CH3NO2	KJ		0	1,50	0	0,75	0	0,25
	KW		0,50	1,00	0	0	1,00	0
	Mod-KW	0,50	0	1,50	0	0,50	0,50	0
	SR		0,33	1,17	0	0,33	0,50	0,17
CH3NO3	KJ		0	1,50	0	0,25	0	0,75
	KW		0	1,50	0	0	0,50	0,50
	Mod-KW	0,50	0	1,50	0	0	0,50	0,50
	SR		0	1,50	0	0,08	0,33	0,58
CH3N3O3	KJ		0	1,50	0	0,25	0	0,75
	KW		0	1,50	0	0	0,50	0,50
	Mod-KW	1,50	0	1,50	0	0	0,50	0,50
	SR		0	1,50	0	0,08	0,33	0,58
CH4N4O2	KJ		0	2,00	0	1,00	0	0
	KW		1,00	1,00	0	0	1,00	0
	Mod-KW	2,00	0	2,00	0	1,00	0	0
	SR		0,83	1,17	0	0,33	0,5	0,17
C2H4N2O6	KJ		0	2,00	0	0	0	2,00
	KW		0	2,00	0	0	0	2,00
	Mod-KW	1,00	0	2,00	0	0	0	2,00
	SR		0	2,00	0	0	0	2,00



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2
C3H6N6O6	KJ		0	3,00	0	1,50	0	1,50
	KW		0	3,00	0	0	3,00	0
	Mod-KW	3,00	0	3,00	0	0	3,00	0
	SR		0	3,00	0	0,50	2,00	0,50
C4H8N8O8	KJ		0	4,00	0	2,00	0	2,00
	KW		0	4,00	0	0	4,00	0
	Mod-KW	4,00	0	4,00	0	0	0	0
	SR		0	4,00	0	0,67	2,67	0,67
C7H5N3O6	KJ		0	2,50	0	5,25	0	1,75
	KW		2,50	0	0	1,00	6,00	0
	Mod-KW	1,50	0	2,50	0	3,50	3,50	0
	SR		1,50	1,00	0	3,00	3,00	1,00

Tabla 3: Productos producidos durante la detonación en función de la regla utilizada para predecir los productos de detonación

Conviene mencionar que cuando el balance de CO₂ es positivo, todas las reglas actúan de la misma forma. Otro aspecto de interés es que las reglas KW y Mod-KW, realizan los cálculos del mismo modo cuando el balance de CO es mayor de -40%.

2.7 Calor de explosión

Durante el proceso de detonación de un explosivo, se producen dos tipos de energía:

- Energía térmica, producida por un aumento súbito de las temperaturas.
- Energía mecánica, consecuencia de un gran aumento de las presiones.

A la energía térmica se la denomina calor de explosión y es de gran importancia para obtener otras propiedades.

El calor de explosión se puede determinar de:

- Forma directa, pero la medición de las propiedades no es nada fácil
- Forma indirecta, en la cual pasa a llamarse calor de combustión del explosivo, debido a su facilidad en la medición de las propiedades.

A continuación nos centraremos en la forma indirecta.

Consiste en sustituir el gas inerte con el que se hace la forma directa por oxígeno, de forma que haya oxígeno en exceso. Con ello se consigue que se conozcan los productos de la combustión (H₂O, CO₂, N₂ y O₂).



Gracias al conocimiento de los productos de explosión, podemos conocer el calor de combustión del explosivo, el cual sigue la siguiente fórmula:

$$-\Delta E = (E_1 - E_3) - (E_2 - E_3) \quad \text{Ecuación 15}$$

Donde (E1-E3) es el calor de combustión del explosivo y (E2-E3) es el calor de combustión de los productos de la combustión.

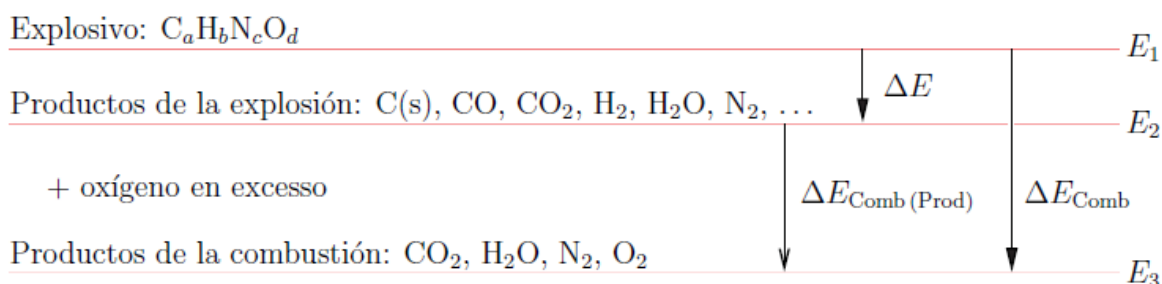


Figura 7: Relación entre el calor de explosión ΔE , el calor de combustión ΔE_{comb} y el calor de combustión de los productos de la explosión $\Delta E_{\text{comb(prod)}}$.

Durante la combustión de los explosivos se obtienen unos datos calorimétricos que se suelen asociar a los valores de las energías internas de formación.

La energía interna de formación (ΔE_f°) es la suma de las energías en estado estable (presión (1atm) y temperatura ambiente (298K)) de los elementos que constituyen a un compuesto.

A continuación se desarrolla un ejemplo de los procedimientos necesarios para la obtención del calor de combustión del explosivo que se llevará a cabo con el RDX.

Para poder calcular el calor de combustión, es necesario saber la energía interna de formación del RDX y la energía de formación de los productos del explosivo.

Comenzamos por la energía de formación de los productos del explosivo. En la tabla 1, se encuentran los productos generados durante la explosión. Cogemos los relativos al método KW:



La energía de formación del CO es -118.8 KJ/mol, la de H₂O es -240.6 KJ/mol y la del N₂ es 0, por lo que la energía interna de formación de los productos de los explosivos es:



$$(3 \cdot (-118.8)) + (3 \cdot (-240.6)) + (3 \cdot 0) = -1078.2 \text{ KJ/mol},$$

Por otro lado, la energía de formación es un dato conocido propio de cada explosivo, para el caso de RDX es -83.82 KJ/mol.

Haciendo uso de los valores obtenidos anteriormente, el calor de combustión es:

$$-\Delta E = (E1 - E3) - (E2 - E3) = 83.82 - (-1078.2) = 1162.02 \text{ KJ/mol},$$

Este valor, en realidad, es de poca utilidad, ya que se busca una comparación entre explosivos. Para poder conseguir dicha comparación, se ha establecido el calor de explosión de TNT. Este valor, se obtiene al dividir el calor de combustión entre la masa molecular.

$$-\Delta e_{TNT} = \frac{(E1 - E3) - (E2 - E3)}{M/1000} = \frac{1162.02}{0.222} = 5234.32 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg}} \quad \text{Ecuación 16}$$

En la ecuación del calor de combustión equivalente de TNT, la masa molecular se expresa en kg.

2.8 Fuerza explosiva y aproximación de Berthelot

La aproximación de Berthelot relaciona tanto la energía mecánica como la energía térmica liberadas durante la explosión, de modo que podamos calcular la fuerza explosiva como la multiplicación de ambas.

La energía térmica viene definida por la siguiente ecuación:

$$\text{Energía térmica} = \frac{\Delta E}{M} \quad \text{Ecuación 17}$$

Por su parte, la energía mecánica es una relación entre los moles gaseosos producidos y el volumen:



$$\text{Energía mecánica} = \frac{\Delta n}{M} \quad \text{Ecuación 18}$$

Una vez quedan definidas ambos tipos de energías, podemos definir la fuerza explosiva según la aproximación de Berthelot:

$$\text{Fuerza explosiva} = \left(\frac{\Delta n}{M}\right) \cdot \left(\frac{\Delta E}{M}\right) \quad \text{Ecuación 19}$$

Al igual que con el calor de combustión de los explosivos, la fuerza explosiva es un valor que se necesita comparar con los demás explosivos. Para ello tomamos el TNT como explosivo a partir del cual comparar. Además, se expresa en forma de porcentaje. La ecuación es la siguiente:

$$\text{Fuerza explosiva}_{\%TNT} = \frac{840 \cdot \Delta n \cdot (-\Delta E)}{M^2} \quad \text{Ecuación 20}$$

El 840 que aparece en la ecuación de la fuerza explosiva en tanto por ciento de TNT, es debido a que el valor de la fuerza explosiva del TNT es 1/8.4. Para que el TNT sea el explosivo a partir del que comparar, su valor debe establecerse en 100. Para conseguirlo, se le multiplica por 8.4 y luego por 100 para expresarlo en tanto por ciento.

Siguiendo el ejemplo del RDX:

$$\text{Fuerza explosiva} = \left(\frac{9}{222}\right) \cdot \left(\frac{1162.02}{222}\right) = 0.21$$

$$\text{Fuerza explosiva}_{\%TNT} = \frac{840 \cdot 9 \cdot (1162.02)}{222^2} = 178.25$$

A continuación se expone una tabla con valores de la fuerza de explosión en tanto por ciento de TNT de los elementos expuestos en las tablas anteriores.



Elemento	Regla	Fuerza explosiva
CH ₃ NO ₂	KJ	191,75
	KW	183,29
	Mod-KW	189,08
	SR	192,89
CH ₃ NO ₃	KJ	190,55
	KW	189,92
	Mod-KW	189,92
	SR	190,40
CH ₃ N ₃ O ₃	KJ	112,48
	KW	107,04
	Mod-KW	107,04
	SR	109,03
CH ₄ N ₄ O ₂	KJ	126,09
	KW	107,60
	Mod-KW	126,09
	SR	118,47
C ₂ H ₄ N ₂ O ₆	KJ	187,95
	KW	187,95
	Mod-KW	187,95
	SR	187,95
C ₃ H ₆ N ₆ O ₆	KJ	178,43
	KW	175,03
	Mod-KW	175,03
	SR	177,61
C ₄ H ₈ N ₈ O ₈	KJ	177,76
	KW	174,22
	Mod-KW	174,22
	SR	176,85
C ₇ H ₅ N ₃ O ₆	KJ	115,83
	KW	100,48
	Mod-KW	114,73
	SR	119,34

Tabla 4: Fuerza explosiva en tanto por ciento de TNT, para diferentes elementos según la regla de formación de productos durante la explosión elegida.

La fuerza explosiva es uno de las características más importante de un explosivo.

Gracias a la tabla 3, podemos darnos cuenta que entre CH₃NO₃ y CH₃N₃O₃, solamente hay una variación de nitrógeno, que hace que el valor de la fuerza explosiva descienda, debido a que no se relaciona con ningún elemento, no produciendo energía y por tanto, no aumenta el calor de combustión. Por el contrario, hace más estable el explosivo.

Por otro lado, el aumento de oxígeno que se ve al pasar de CH₃NO₂ a CH₃NO₃, hace que se aumente la cantidad de elementos que se pueden relacionar, y por tanto, sea



mayor es el calor de explosión. Este aumento, provoca que la fuerza explosiva también aumente.

Un último punto a tratar, es la diferencia de fuerza explosiva entre las distintas reglas. Como se puede observar en la tabla 3, los valores varían para todos los casos en los que el balance de CO es negativo, esto es debido a que los moles gaseosos formados no se contrarrestan con el calor de combustión.

El TNT es el elemento sobre el que se compara, por lo que independientemente de la regla que se elija, su valor debe ser 100. Si observamos en la tabla 3 los valores de la fuerza explosiva en tanto por ciento de TNT, podemos llegar a la conclusión de que la aproximación de Berthelot solo se cumple para la regla KW.

La forma de hacer que se obtuviese 100 para las demás reglas, sería sustituir el 840 de la ecuación de la fuerza explosiva en tanto por ciento de TNT por otro dígito que consiguiese que la fuerza explosiva del TNT valga 100.

A continuación se desarrolla ésta teoría:

$$100 = \frac{KJ \cdot 5.75 \cdot (1235.74)}{227^2}$$

$$100 = \frac{Mod - Kw \cdot 7.5 \cdot (938.41)}{227^2}$$

$$100 = \frac{SR \cdot 8 \cdot (915.11)}{227^2}$$

Después de despejar las 3 ecuaciones, observamos que los números que hacen valer la fuerza explosiva del TNT 100 para las diferentes reglas, serían 728 para KJ, 735.66 para el método Mod-KW y 707.24 para SR.

A priori, estos números deberían hacer que los demás elementos tuviesen una fuerza explosiva idéntica a la obtenida según KW. La realidad no es así, para cada explosivo, haría falta un número diferente que le hiciese valer lo mismo que en la regla KW. por lo que la única forma de conseguir llegar a un número en el que todos se acerquen lo máximo posible es haciendo una media entre cada número obtenido por cada elemento.



2.9 Constante de Gurney y velocidad inicial de los fragmentos primarios

La constante de Gurney es un valor que nos permite comparar para los distintos tipos de explosivos, la velocidad de los fragmentos primarios en el momento de la detonación.

La ecuación de la constante de Gurney es la siguiente:

$$\text{Constante de Gurney} = \sqrt{-2 \cdot \Delta e} \quad \text{Ecuación 21}$$

Es importante matizar que la constante de Gurney está expresada en unidades de velocidad del sistema internacional, a la que nos referiremos como SI, por lo que el valor de ΔE , debe expresarse en estas unidades, para ello, debemos coger el valor de ΔE y aplicarle las siguientes operaciones:

$$\Delta e = \frac{\Delta E}{\frac{M}{1000} / \text{masa}_{\text{carga}}} \cdot 1000 \quad \text{Ecuación 22}$$

El valor de la constante de Gurney para el RDX, asumiendo una masa de carga de 1kg es:

$$\Delta e = \frac{1162.02}{\frac{222}{1000} / 1} \cdot 1000 = 10468468 \frac{m^2}{s^2}$$

$$\text{Constante de Gurney} = \sqrt{2 \cdot 10468468} = 3235.50m/s$$



Elemento	Regla	Constante Gurney (m/s)
CH3NO2	KJ	3518,17
	KW	2978,83
	Mod-KW	3314,35
	SR	3241,25
CH3NO3	KJ	3564,20
	KW	3405,92
	Mod-KW	3405,92
	SR	3459,48
CH3N3O3	KJ	2738,39
	KW	2586,45
	Mod-KW	2586,45
	SR	2638,07
CH4N4O2	KJ	2793,85
	KW	2308,39
	Mod-KW	2793,85
	SR	2507,19
C2H4N2O6	KJ	3688,35
	KW	3688,35
	Mod-KW	3688,35
	SR	3688,35
C3H6N6O6	KJ	3546,18
	KW	3206,16
	Mod-KW	3206,16
	SR	3323,39
C4H8N8O8	KJ	3539,52
	KW	3198,79
	Mod-KW	3198,79
	SR	3316,25
	SR	2879,73
C7H5N3O6	KJ	3299,63
	KW	2330,43
	Mod-KW	2875,40
	SR	2839,48

Tabla 5: Constante de Gurney para diferentes elementos según la regla de formación de productos durante la explosión elegida

La constante de Gurney sigue un razonamiento idéntico al de la fuerza explosiva, ya que únicamente depende del valor del calor de combustión del explosivo.

Como se puede imaginar, la constante de Gurney es una propiedad intrínseca del explosivo, cuyo valor se puede determinar tanto experimentalmente, como con la fórmula que acabamos de exponer. Al contrario de lo que pasa para el cálculo del calor de explosión, la diferencia de valores obtenidos entre ambos procedimientos es prácticamente nula.



Además, la experiencia nos ha demostrado que el valor de la constante de Gurney para explosivos convencionales es muy cercano a un tercio del valor de la velocidad de detonación del explosivo.

Observando los valores de la tabla 4, podemos darnos cuenta que al igual que pasaba con la fuerza explosiva, los valores son muy diferentes segúnelijamos una regla de obtención de los productos durante la detonación u otra y estemos por debajo de un balance de CO negativo.

Esto se debe a que la constante de Gurney solo depende, como se mencionó anteriormente, de ΔE , y cada regla produce unos productos durante la detonación diferentes, que producen a su vez unos ΔE distintos. Al introducir en la ecuación de la constante de Gurney dichos valores de ΔE , no hay otro valor que sea capaz de contrarrestarlos, que produjese una constante de Gurney idéntica para todos.

Una vez definida la constante de Gurney, pasamos a explicar la velocidad inicial de los fragmentos primarios. Dicha velocidad relaciona la energía cinética de los fragmentos proyectados con la energía de expansión de los productos de la explosión, para obtener la energía interna del explosivo.

Así mismo, para un cálculo más sencillo, se asume que todos los fragmentos parten con la misma velocidad inicial y que la velocidad de los productos gaseosos pasa de un valor cero cuando se encuentra en el centro del explosivo, hasta un valor máximo que coincide con la velocidad de los fragmentos del revestimiento en el momento de la fractura.

Una vez definidas las hipótesis, ya podemos expresar las ecuaciones de la velocidad inicial, las cuales varían según sea la forma del contenedor del explosivo.

Los tres tipos de contenedores más utilizados son:

- Cilindros muy largos:

$$U_f = (\sqrt{-2 \cdot \Delta e}) \cdot \left(\frac{1}{2} + \frac{M_f}{M}\right)^{-1/2} \quad \text{Ecuación 23}$$

- Esferas:

$$U_f = (\sqrt{-2 \cdot \Delta e}) \cdot \left(\frac{3}{5} + \frac{M_f}{M}\right)^{-1/2} \quad \text{Ecuación 24}$$

- Sándwiches planos:

$$U_f = (\sqrt{-2 \cdot \Delta e}) \cdot \left(\frac{1}{3} + \frac{M_f}{M}\right)^{-1/2} \quad \text{Ecuación 25}$$



Para poder valorar la diferencia de velocidad inicial de los fragmentos, según el tipo de contenedor, vamos a introducir los datos del RDX, así como un valor de la masa de la carga (M) y de la masa de la cáscara (M_f) de 1kg cada una:

$$U_f = (\sqrt{2 \cdot 10468468}) \cdot \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{1}\right)^{-1/2} = 2640.17 \text{ m/s}$$

$$U_f = (\sqrt{2 \cdot 10468468}) \cdot \left(\frac{3}{5} + \frac{1}{1}\right)^{-1/2} = 2557.89 \text{ m/s}$$

$$U_f = (\sqrt{2 \cdot 10468468}) \cdot \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{1}\right)^{-1/2} = 2805.53 \text{ m/s}$$

Como se puede observar, la velocidad inicial mayor se produce en los paneles sándwich, mientras que el valor más bajo se produce en las cargas esféricas. Esto es debido a la distancia entre el núcleo y la superficie. A mayor distancia entre ambos, menor es la velocidad inicial, pues mayor es la distancia a recorrer hasta llegar a la superficie y consumiendo, aunque sea ínfima, algo de energía.

Otro aspecto a tener en cuenta, es la relación $\text{masa}_{\text{carga}} - \text{masa}_{\text{cáscara}}$. Como se puede observar en la ecuación, está elevado a $-1/2$, por lo que cuanto mayor sea la masa del explosivo respecto a la masa de la cáscara, mayor es la velocidad de los fragmentos.

Por último, hay que especificar que todos los cálculos realizados en relación a la velocidad inicial de los fragmentos, es asumiendo que la cáscara no se rompe durante la detonación, si por el contrario, el material no soportase la detonación, el valor real de la velocidad inicial de los fragmentos, sería del orden de un 80% del valor calculado.

Por último, vamos a dar las ecuaciones de la cantidad de movimiento lineal y de la energía cinética total, las cuales son de un interés añadido, al estar íntimamente relacionadas con el daño producido por el explosivo.

$$\text{Cantidad de movimiento lineal} = M_f \cdot U_f \quad \text{Ecuación 26}$$

$$\text{Energía cinética total} = \frac{1}{2} \cdot M_f \cdot U_f^2 \quad \text{Ecuación 27}$$

Vamos a terminar el apartado, desarrollando ambas fórmulas para un contenedor cilíndrico con RDX en el interior.

$$\text{Cantidad de movimiento lineal} = 1 \cdot 2640.17 = 2640.17 \frac{\text{kg} \cdot \text{m}}{\text{s}}$$



$$\text{Energía cinética total} = \frac{1}{2} \cdot 1 \cdot 2640.17^2 = 13940995.26 \text{ J} \approx 13941 \text{ KJ}$$

El contenedor en forma de sándwich plano es el que mayor daño produce, al tener la energía cinética total y la cantidad de movimiento lineal superiores a los demás.

2.10 Presión y velocidad de detonación

La presión de detonación es la presión estable que se desarrolla detrás del frente de detonación, se denomina P y su unidad es kBar. Por su parte, la velocidad de detonación es la velocidad estable que alcanza el frente de detonación, se representa por la letra D y se mide en mm/ μ s (o, lo que es lo mismo, km/s).

Cuanto mayor son la presión de detonación y la velocidad de detonación, mayor es el daño infringido por el explosivo, pero a cambio, suele disminuir la sensibilidad del explosivo.

Para poder calcular ambas características, es necesario definir todos los parámetros que aparecen en las siguientes ecuaciones propuestas por Kamlet y Jacob [3]:

$$P = 15.58 \cdot (N \cdot M_{ave}^{0.5} \cdot Q^{0.5} \cdot \rho^2) \quad \text{Ecuación 28}$$

$$D = 1.01 \cdot (N^{0.5} \cdot M_{ave}^{0.25} \cdot Q^{0.25} \cdot (1 + 1.30\rho)) \quad \text{Ecuación 29}$$

- N: Número de moles gaseosos por gramo de explosivo que se produce en los productos de la detonación
- M_{ave} : Peso molecular medio, en gramos/mol. Hay que eliminar de este término a los productos de la explosión que no son gaseosos como el C(s) o el Al_2O_3 para el caso de los explosivos aluminizados (no considerados en el presente trabajo).
- Q: Calor liberado durante la reacción de detonación, medido en calorías por gramo de explosivo
- P: Densidad de carga, medida en g/cm^3 .

Para poder desarrollar ambas fórmulas, primero hay que conseguir los datos necesarios, para ello, se utilizan las siguientes fórmulas:

$$N = \frac{\Delta n}{M} \quad \text{Ecuación 30}$$



$$M_{ave} = \frac{M - (12 \cdot C)}{\Delta n} \quad \text{Ecuación 31}$$

$$Q = \frac{\text{calor combustión} \cdot 238.8}{M} \quad \text{Ecuación 32}$$

En el apartado de reglas para la obtención de los productos de las explosiones, observamos que los productos podían variar dependiendo de la regla que optásemos por usar.

Eso hace que N varíe según elijas una regla u otra, así como Q. Pero en contra de lo que cabe esperar, la N y la Q se contrarrestan y elijas la regla que elijas, el valor de la presión y velocidad de detonación sean prácticamente iguales.

A continuación, se exponen los cálculos para la obtención de la presión y la velocidad de detonación para ver con números la diferencia que se producen entre las diferentes reglas. Para ello utilizaremos el TNT:

- KW

$$N = \frac{10}{227} = 0.044 \text{ moles}$$

$$M_{ave} = \frac{227 - (12 \cdot 1)}{10} = 21.5 \text{ gr/mol}$$

$$Q = \frac{616.41 \cdot 238.8}{227} = 648.45 \text{ calorías}$$

$$P = 15.58 \cdot (0.044 \cdot 21.5^{0.5} \cdot 648.45^{0.5} \cdot 1.65^2) = 220.36 \text{ kBar}$$

$$D = 1.01 \cdot (0.044^{0.5} \cdot 21.5^{0.25} \cdot 648.45^{0.25} \cdot (1 + 1.30 \cdot 1.65)) = 7.24 \text{ mm}/\mu\text{m}$$

- Mod-KW

$$N = \frac{7.5}{227} = 0.033 \text{ moles}$$

$$M_{ave} = \frac{227 - (12 \cdot 3.5)}{7.5} = 24.67 \text{ gr/mool}$$

$$Q = \frac{938.41 \cdot 238.8}{227} = 987.19 \text{ calorías}$$



$$P = 15.58 \cdot (0.033 \cdot 24.67^{0.5} \cdot 987.19^{0.5} \cdot 1.65^2) = 218.44 \text{ kBar}$$

$$D = 1.01 \cdot (0.033^{0.5} \cdot 24.67^{0.25} \cdot 987.19^{0.25} (1 + 1.30 \cdot 1.65)) = 7.21 \text{ mm}/\mu\text{s}$$

- KJ

$$N = \frac{5.75}{227} = 0.025 \text{ moles}$$

$$M_{ave} = \frac{227 - (12 \cdot 5.25)}{5.75} = 28.52 \text{ gr/mol}$$

$$Q = \frac{1235.74 \cdot 238.8}{227} = 1299.98 \text{ calorías}$$

$$P = 15.58 \cdot (0.025 \cdot 28.52^{0.5} \cdot 1299.98^{0.5} \cdot 1.65^2) = 204.18 \text{ kBar}$$

$$D = 1.01 \cdot (0.025^{0.5} \cdot 28.52^{0.25} \cdot 1299.98^{0.25} (1 + 1.30 \cdot 1.65)) = 6.97 \text{ mm}/\mu\text{s}$$

- SR

$$N = \frac{8}{227} = 0.035 \text{ moles}$$

$$M_{ave} = \frac{227 - (12 \cdot 3)}{8} = 23.875 \text{ gr/mol}$$

$$Q = \frac{915.11 \cdot 238.8}{227} = 962.68 \text{ calorías}$$

$$P = 15.58 \cdot (0.035 \cdot 23.875^{0.5} \cdot 962.68^{0.5} \cdot 1.65^2) = 225.07 \text{ kBar}$$

$$D = 1.01 \cdot (0.035^{0.5} \cdot 23.875^{0.25} \cdot 962.68^{0.25} (1 + 1.30 \cdot 1.65)) = 7.32 \text{ mm}/\mu\text{s}$$

Como se puede apreciar en los resultados, tanto la presión como la velocidad de detonación, son mayores para la regla SR, mientras que los valores más pequeños se obtienen para KJ.

Esto se debe a que la regla KJ produce una gran cantidad de CO_2 , pero por el contrario la energía que produce es mucho menor, por lo que a la hora de contrarrestar es mayor el efecto de la de energía.



Elemento	Regla	P (kBar)	D (mm/ μ s)
CH3NO2	KJ	135,14	6,50
	KW	143,09	6,69
	Mod-KW	138,00	6,57
	SR	141,90	6,66
CH3NO3	KJ	167,32	7,02
	KW	170,35	7,08
	Mod-KW	170,35	7,08
	SR	169,50	7,06
CH3N3O3	KJ	86,83	5,48
	KW	85,94	5,46
	Mod-KW	85,94	5,46
	SR	86,33	5,47
CH4N4O2	KJ	259,55	7,76
	KW	254,92	7,68
	Mod-KW	259,55	7,76
	SR	262,29	7,80
C2H4N2O6	KJ	249,45	7,98
	KW	249,45	7,98
	Mod-KW	249,45	7,98
	SR	249,45	7,98
C3H6N6O6	KJ	352,34	8,88
	KW	364,03	9,03
	Mod-KW	364,03	9,03
	SR	361,72	9,00
C4H8N8O8	KJ	383,28	9,15
	KW	395,83	9,30
	Mod-KW	395,83	9,30
	SR	393,38	9,27
	SR	237,52	7,45
	SR	206,89	7,02
C7H5N3O6	KJ	206,89	7,02
	KW	220,63	7,24
	Mod-KW	218,69	7,21
	SR	226,63	7,34

Tabla 6: Presión y velocidad de detonación, para diferentes elementos según la regla de formación de productos durante la explosión elegida

Como ya sabemos que sucede en el SR, se transforman los CO en CO₂, esto provoca un equilibrio entre ambas moléculas, lo que consigue optimizar el valor de la presión y velocidad de detonación.

El valor medio de la presión y velocidad de detonación es 217.01 y 7.185 respectivamente.



Tal y como mencionamos anteriormente, el error que se produce entre los dos extremos de la presión y detonación es de tan solo un 2.99% para la presión y de un 5.91% para la velocidad de detonación.

Analizando los resultados a la luz de los balances de CO y CO₂, podemos observar una característica muy interesante, los resultados son más exactos para balances de CO superiores al -31%, ya que la diferencia es mucho menor y además, los valores llegan a ser iguales para balances de CO mayores de 0, ya que los productos obtenidos durante la detonación por todas las reglas son los mismos, es decir, la N, M_{ave} y Q, son las mismas para cualquiera de las reglas.



3. DESARROLLO DE LA INTERFAZ DE SIMEX

SimEx es una aplicación informática basada en Matlab y desarrollada en el contexto del Grado en Ingeniería de la Seguridad de la Universidad Carlos III de Madrid, impartido en el Centro Universitario de la Guardia Civil (CUGC) de Aranjuez.

El propósito inicial de SimEx era calcular el efecto de explosiones sobre elementos estructurales simples, mediante modelos de un grado de libertad (SDOF, Single Degree of Freedom). La herramienta se ha utilizado satisfactoriamente tanto en tareas docentes dentro de la asignatura Dinámica de Explosiones (DE), como en el desarrollo de una docena de Trabajos Fin de Grado (TFG).

Este doble uso ha permitido desarrollar la aplicación más allá de los objetivos inicialmente previstos, poniendo a prueba por un lado todas las capacidades implementadas por parte de alumnos con perfil de “usuario final” (DE), así como explorando nuevas funcionalidades y utilidades, entre las que se encuentra este proyecto.

A continuación procederemos a explicar el método de programación utilizado en Matlab para poder llevar a cabo el desarrollo de la interfaz del proyecto, una de las muchas que contiene SimEx.

3.1 Elementos

La programación de la interfaz no se pudo iniciar hasta que los explosivos CHNO, la mayoría de ellos cogidos del libro de Kinney & Graham, unidos a los explosivos modernos con los que trabaja Peter Politzer y compuestos no explosivos como el WAX, fueron guardados en un fichero de Matlab, llamado all_materials_1. La manera de guardar los elementos fue en forma de vectores, de modo que se acceda a ellos cada vez que se desee calcular alguna característica de los explosivos.

La forma elegida para los vectores es la siguiente:

$$\text{elemento} = \left\{ \begin{array}{l} \text{nombre del explosivo} \\ \text{número de C} \\ \text{número de H} \\ \text{número de N} \\ \text{número de O} \\ \text{número de Al} \\ \text{energía de formación} \\ \text{densidad} \end{array} \right\}$$

Figura 8: Formato del vector de los elementos guardados en MATLAB



```
all_materials{1}{1}='CH3NO2';
all_materials{1}{2}=1; %% number of carbons
all_materials{1}{3}=3; %% number of hydrogens
all_materials{1}{4}=1; %% number of nytrogens
all_materials{1}{5}=2; %% number of oxygens
all_materials{1}{6}=0; %% number of aluminums
all_materials{1}{7}=-81.76; %% energy
all_materials{1}{8}=1.128; %% density
```

Figura 9: Ejemplo de un vector de elementos

El formato de corchetes permite recorrer cada elemento hasta llegar al dato que interesa.

Como se aprecia en la figura 9, hay un componente del vector correspondiente al número de aluminios. Aunque en la actualidad no se utilice debido a la ausencia de explosivos CHNO aluminizados, se ha dejado el espacio para poder desarrollar en el futuro una nueva interfaz que calcule las características específicas de este tipo de explosivo.

Una vez guardados y definidos los elementos, el siguiente paso fue programar las funciones que harían trabajar internamente a la interfaz.

3.2 Programación de la interfaz

The interface includes the following sections:

- Regla:** A dropdown menu with 'KW' selected.
- Número compuestos:** An input field with the value '1'.
- Masa carga (Kg):** An input field with the value '1'.
- Mezcla explosiva:** Four component selection boxes labeled 'Componente 1' through 'Componente 4'. Componente 1 is set to '1,2,4-Trinitrobenzene'.
- Fraciones molares:** Four molar fraction input fields labeled 'Fracion molar 1' through 'Fracion molar 4'. The values are 1, 0, 0, and 0 respectively.
- Botones:** 'Calcular' (green) and 'Reiniciar' (red) buttons.
- Productos nominales de la explosión:** A table with 9 columns: Fórmula química, Moles totales, Moles de C(s), Moles de CO, Moles de CO2, Moles de H2, Moles de H2O, Moles de N2, Moles de O2. All cells contain the word 'Resultado'.
- Resultados:** A table with 7 columns: Balance de CO, Balance de CO2, Fuerza explosiva TNT, Gurney (m/s), Presión detonación (kBar), Velocidad detonación (m/s), Carga en TNT. All cells contain the word 'Resultado'.

Figura 10: Interfaz de SimEx



En la figura 10 vemos la interfaz generada para SimEx. En ella se permite al usuario elegir entre todos los explosivos CHNO de los que se tienen datos fiables, así como componentes no explosivos como BINDER y asignar a cada uno de ellos la fracción molar deseada. El usuario podrá decidir también, la regla con la que obtener los productos de la detonación.

Por último, el usuario debe elegir la masa de la carga en kilogramos que tendrá el explosivo diseñado.

A continuación se explican los controles elegidos para cada botón y la programación interna con la que ha sido desarrollado.

3.2.1 Regla

Este botón nos permite elegir entre las 4 opciones posibles de calcular los productos desarrollados durante la detonación:

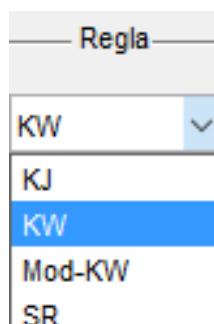


Figura 11: Menú desplegable (Popup-menu) para la elección de la regla de formación de productos.

Para ello se ha utilizado un menú desplegable (popup-menu) dentro de las opciones que te ofrece MATLAB cuando se abre "GUIDE".

El popup-menu te permite elegir de entre una lista de opciones, de forma que devuelve un número en función de la opción elegida.

Si por ejemplo el usuario eligiese KW, tal y como podemos observar en la figura 11, el número devuelto es el 2 debido a que se encuentra en la segunda posición de la lista.

Este número 2, se le asigna a la variable "regla", la cual utilizaremos más adelante.

Su programación interna, figura 12, está dividida en dos partes, denominadas callback y createFcn, generadas automáticamente por MATLAB.

```

% --- Executes on selection change in regla.
function regla_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to regla (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Hints: contents = cellstr(get(hObject,'String')) returns regla contents as cell array
%         contents{get(hObject,'Value')} returns selected item from regla

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function regla_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to regla (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    empty - handles not created until after all CreateFcns called

% Hint: popupmenu controls usually have a white background on Windows.
%       See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

```

Figura 12: Programación interna del menú desplegable (popup-menu) del botón regla

3.2.2 Número de compuestos

A continuación, el usuario deberá elegir el número de compuestos con el que quiere realizar el explosivo.

Si desea trabajar con elementos puros, deberá escribir un 1. Si por el contrario, desea trabajar con mezclas explosivas, deberá poner el número de elementos con el que quiere trabajar, siendo el mínimo 2 y el máximo 4.

Para que el usuario introduzca la cantidad de elementos con los que quiere trabajar, se ha recurrido a un texto editable (edit-text), el cual deja al usuario escribir un texto que luego SimEx guarda en la variable “numero_compuestos”.

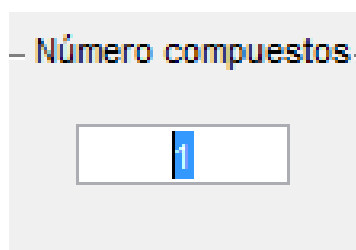


Figura 13: Texto editable (Edit-text) para la elección del número de compuestos

```

function numero_compuestos_Callback(hObject, eventdata, handles)
numero_compuestos = str2double(get(hObject, 'String'));
if ~isscalar(numero_compuestos) || numero_compuestos<1 || numero_compuestos>4
    set(hObject, 'String', 1);
    numero_compuestos = 1;
    errordlg('El número de compuestos debe ser 1, 2, 3 ó 4','Error');
end
% hObject    handle to numero_compuestos (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
handles.data.numero_compuestos = numero_compuestos;
guidata(hObject,handles)
% Hints: get(hObject,'String') returns contents of numero_compuestos as text
%        str2double(get(hObject,'String')) returns contents of numero_compuestos as a double

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function numero_compuestos_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to numero_compuestos (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    empty - handles not created until after all CreateFcns called

% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
%        See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject,'BackgroundColor'), get(0,'defaultUicontrolBackgroundColor'))
    set(hObject,'BackgroundColor','white');
end

```

Figura 14: Programación del texto editable (edit-text) del botón de número de compuestos

Para evitar que el usuario introduzca un valor erróneo de elementos, se ha restringido como ya hemos dicho a 1,2,3,4, de modo que si el usuario escribe cualquier dígito distinto de los ya citados, aparece un error.

Dentro del callback hemos metido un if, de modo que gracias a isscalar, el cual permite distinguir números enteros, haga que entre en el if o no según cumple los requisitos o no.

En el caso de entrar en el if, el errordlg mostraría el siguiente warning.

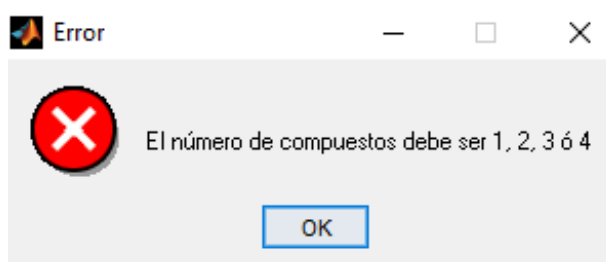


Figura 15: Error en la elección del número de compuestos

3.2.3 Masa de la carga

La masa de la carga, es un valor necesario para el cálculo de las propiedades, por ello se le deja mediante un texto editable (edit-text) al usuario que asigne el valor que desee, siempre y cuando no sea un valor negativo ni igual a 0. De lo contrario, gracias a `isnan` y `errorDlg`, aparecerá un warning como el de la figura 17, pero indicando que el valor deseado para la masa de la carga es erróneo.

El valor que introduzca el usuario, se guardará en la variable `masa_carga`.

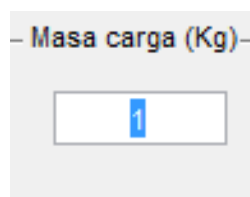


Figura 16: Texto editable (edit-text) para la elección de la masa de la carga

La programación interna de la masa de la carga es la siguiente:

```
function Masa_carga_Callback(hObject, eventdata, handles)
Masa_carga = str2double(get(hObject, 'String'));
if isnan(Masa_carga) || Masa_carga<=0
    set(hObject, 'String', 1);
    errorDlg('La masa de la carga tiene que ser un valor mayor que 0', 'Error');
end
% hObject    handle to Masa_carga (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
handles.data.Masa_carga = Masa_carga;
guidata(hObject, handles)
% Hints: get(hObject, 'String') returns contents of Masa_carga as text
%        str2double(get(hObject, 'String')) returns contents of Masa_carga as a double

% --- Executes during object creation, after setting all properties.
function Masa_carga_CreateFcn(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Masa_carga (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    empty - handles not created until after all CreateFcns called

% Hint: edit controls usually have a white background on Windows.
%       See ISPC and COMPUTER.
if ispc && isequal(get(hObject, 'BackgroundColor'), get(0, 'defaultUiControlBackgroundColor'))
    set(hObject, 'BackgroundColor', 'white');
end
```

Figura 17: Programación del texto editable (edit-text) del botón de masa de la carga

3.2.4 Elección de explosivos

Debido a la gran variedad de explosivos CHNO de los que se dispone, se ha utilizado un menú desplegable (popup-menu), de modo que el usuario pueda acceder rápidamente mediante un listado alfabético al explosivo deseado.



En la lista de explosivos que guardamos al inicio del programa, vemos que el primer explosivo correspondería al número 1. En la lista del menú desplegable, sin embargo, la primera posición corresponde a un grupo de guiones, que ha de ser seleccionado por el usuario en caso de no querer elegir ningún explosivo en ese espacio.

Para evitar que todos los explosivos queden situados una posición detrás de la que se debe, se guardan los valores obtenidos siguiendo la siguiente fórmula, en la que “i” corresponde al primer explosivo, “j” al segundo explosivo y así sucesivamente hasta llegar a la variable “l”:

$$i = (\text{explosivo}_1) - 1$$

Explosivo_1 es la variable en la que se guarda la posición que ocupa en la lista el explosivo seleccionado.

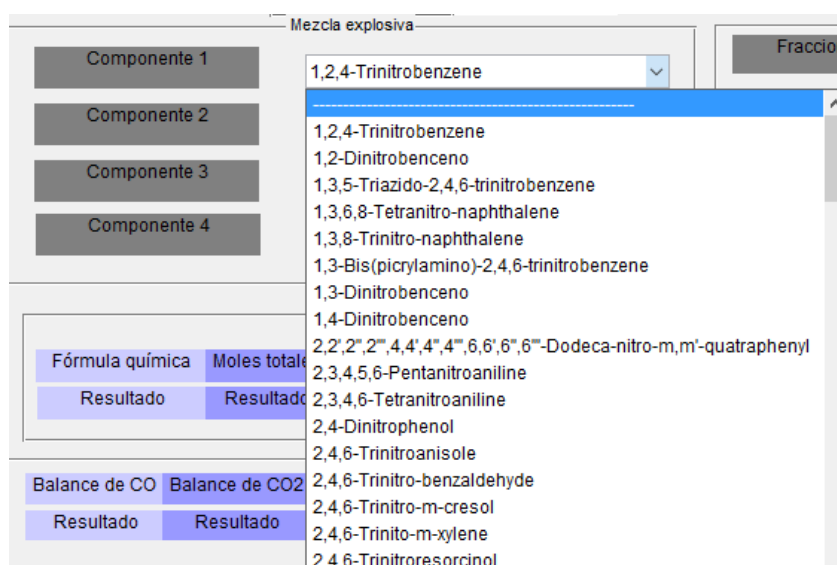


Figura 18: Menú desplegable (popup-menu) para la elección de los explosivos

La programación interna de este botón es prácticamente igual a la desarrollada en el botón de regla, por lo que omitiremos la imagen correspondiente a la programación.

3.2.5 Fracciones molares de los explosivos

La última acción que debe realizar el usuario antes de pulsar el botón de calcular, es introducir las fracciones molares relativas a los explosivos elegidos.

Para poder realizar esta función, se ha recurrido a un texto editable, de modo que el usuario introduzca el número que desee, siempre y cuando sea entre 0 y 1. En caso contrario aparecerá un error, que pedirá al usuario que introduzca un valor adecuado.

Fracciones molares	
Fraccion molar 1	1
Fraccion molar 2	0
Fraccion molar 3	0
Fraccion molar 4	0

Figura 19: Texto editable (edit-text) para la elección de las fracciones molares de los explosivos

Los valores obtenidos en la figura 21, se almacenan en las variables “porcentaje_n”, donde n es la fracción molar elegida, ya sea 1, 2, 3 ó 4.

La programación de las fracciones molares, es igual a la de la masa de la carga, cambiando el nombre de la función, por lo que se omite la figura relativa a la programación interna del botón.

3.2.6 Inicialización

Se ha desarrollado una inicialización del programa, de modo que el usuario tuviese un ejemplo sobre el que trabajar. Además, dicha inicialización permite asegurarnos que el usuario no elija una opción incorrecta que provoque un error inicial.

Para poder llevar a cabo la esta opción, ha sido necesaria la inicialización de cada variable, de modo que al abrir el programa salga algo preseleccionado.

Para llevarlo a cabo hemos guardado en handles.data el valor que queremos que aparezca al abrir el programa.

Una vez dicho valor está asociado, realizamos un set de dicho handles.data, de modo que aparezca en el correspondiente handles:

- Mediante un string para aquellas variables que obtenemos a través de un texto editable.
- Mediante un value para los obtenidos a través de un menú desplegable.


```
display('Inicializacion')

handles.data.porcentaje_1 = 1;
handles.data.porcentaje_2 = 0;
handles.data.porcentaje_3 = 0;
handles.data.porcentaje_4 = 0;
handles.data.explosivo_1 = 2;
handles.data.explosivo_2 = 1;
handles.data.explosivo_3 = 1;
handles.data.explosivo_4 = 1;
handles.data.regla = 2;
handles.data.Masa_carga = 1;
handles.data.numero_compuestos = 1;
```

Figura 20: Guardado de los valores de inicialización

```
set(handles.porcentaje_1 , 'String', handles.data.porcentaje_1 );
set(handles.porcentaje_2 , 'String', handles.data.porcentaje_2 );
set(handles.porcentaje_3 , 'String', handles.data.porcentaje_3 );
set(handles.porcentaje_4 , 'String', handles.data.porcentaje_4 );
set(handles.Masa_carga , 'String', handles.data.Masa_carga );
set(handles.numero_compuestos , 'String', handles.data.numero_compuestos );
set(handles.explosivo_1 , 'Value', handles.data.explosivo_1 );
set(handles.explosivo_2 , 'Value', handles.data.explosivo_2 );
set(handles.explosivo_3 , 'Value', handles.data.explosivo_3 );
set(handles.explosivo_4 , 'Value', handles.data.explosivo_4 );
set(handles.regla , 'Value', handles.data.regla );
```

Figura 21: Muestra de los valores de inicialización

3.2.7 Calcular

Una vez el usuario ha introducido todas las variables, debe pulsar el botón de calcular, con el que obtendrá los valores relativos al explosivo sobre el que se quiere realizar el estudio.

Para ello, se ha utilizado un botón de pulsación (push-button), cuya única función es ser pulsado, no abre un desplegable, ni deja al usuario escribir nada sobre él.

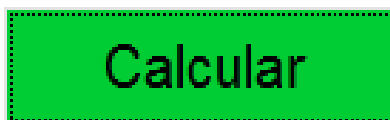


Figura 22: Botón de pulsación (push-button) para el cálculo de las características del explosivo

Una vez se pulsa el botón de calcular, el programa verifica una serie de requisitos:



- Si la suma de las 4 fracciones molares es distinta de 1. En caso de que así sea, aparece un error que obliga al usuario a cambiar los valores hasta que la suma sea 1.
- En caso de elegir trabajar con elementos puros, el programa verifica si el componente seleccionado es el BINDER o el WAX. En caso afirmativo, el programa exigirá al usuario que lo cambie o lo mezcle con otro componente.

Cuando las fracciones molares son correctas y el componente elegido no es el BINDER o el WAX, el programa recorre un switch, entrando en un case u otro en función de la regla elegida.

```
switch regla  
  
case 1
```

Figura 23: Switch del botón de calcular

Dentro de cada switch hay una función a la que recurre el programa para poder calcular todos los valores necesarios.

3.2.7.1 Funciones

Como hemos explicado en la teoría, hay cuatro tipos de reglas para obtener los productos de la explosión, que varían en gran medida los resultados a obtener. Por ello hemos tenido que desarrollar cuatro funciones, una por cada tipo de regla.

En primer lugar, se han definido las entradas y salidas para nuestras funciones, las cuales son las mismas para los cuatro casos.

Función KJ

```
Function[carbono_final, hidrogeno_final, nitrogeno_final, oxigeno_final,  
carga_tnt, balance_CO2, balance_CO, moles_totales, N2, H2, H2O, O2, C, CO, CO2,  
fuerza_explosiva, constante_gurney, P, D]=FuncionKJ (Mezcla,  
numero_compuestos, Masa_carga, porcentaje_1, porcentaje_2, porcentaje_3,  
porcentaje_4, i, j, k, l)
```

Función KW

```
function[carbono_final, hidrogeno_final, nitrogeno_final, oxigeno_final,  
carga_tnt, balance_CO2, balance_CO, moles_totales, N2, H2, H2O, O2, C, CO, CO2,  
fuerza_explosiva, constante_gurney, P, D]=FuncionKW (Mezcla,
```



```
numero_compuestos, Masa_carga, porcentaje_1, porcentaje_2, porcentaje_3,  
porcentaje_4, i, j, k, l)
```

Función Mod-KW

```
function[carbono_final, hidrogeno_final, nitrogeno_final, oxigeno_final,  
carga_tnt, balance_CO2, balance_CO, moles_totales, N2, H2, H2O, O2, C, CO, CO2,  
fuerza_explosiva, constante_gurney, P, D]=modKW(Mezcla, numero_compuestos,  
Masa_carga, porcentaje_1, porcentaje_2, porcentaje_3, porcentaje_4, i, j, k,  
l)
```

Función SR

```
function[carbono_final, hidrogeno_final, nitrogeno_final, oxigeno_final,  
carga_tnt, balance_CO2, balance_CO, moles_totales, N2, H2, H2O, O2, C, CO, CO2,  
fuerza_explosiva, constante_gurney, P, D]=SR(Mezcla, numero_compuestos,  
Masa_carga, porcentaje_1, porcentaje_2, porcentaje_3, porcentaje_4, i, j, k,  
l)
```

Como se puede apreciar en estas funciones, las entradas son:

- Mezcla: Necesario para saber si el usuario quiere trabajar con elementos puros o mezcla de explosivos.
- Número_compuestos: Utilizado para determinar el número de elementos con el que deseas realizar la mezcla explosiva.
- Masa_carga: Masa que poseerá el explosivo
- Porcentaje_1: Fracción molar del explosivo 1 que queremos introducir en la mezcla explosiva.
- Porcentaje_2: Fracción molar del explosivo 2 que queremos introducir en la mezcla explosiva.
- Porcentaje_3: Fracción molar del explosivo 3 que queremos introducir en la mezcla explosiva.
- Porcentaje_4: Fracción molar del explosivo 4 que queremos introducir en la mezcla explosiva.
- i: Utilizado para recorrer el vector de elementos descrito en el apartado 3.1 y detenernos en la posición que indique. De modo que quede definido dicho elemento como explosivo 1.
- j: Utilizado para recorrer el vector de elementos descrito en el apartado 3.1 y detenernos en la posición que indique. De modo que quede definido dicho elemento como explosivo 2.
- k: Utilizado para recorrer el vector de elementos descrito en el apartado 3.1 y detenernos en la posición que indique. De modo que quede definido dicho elemento como explosivo 3.
- l: Utilizado para recorrer el vector de elementos descrito en el apartado 3.1 y detenernos en la posición que indique. De modo que quede definido dicho elemento como explosivo 4.



Una vez descritas las entradas, pasamos a definir las salidas:

- Carbono_final: Número de carbonos que hay una vez se produce la mezcla de los elementos.
- Hidrógeno_final: Número de hidrógenos que hay una vez se produce la mezcla de los elementos.
- Nitrógeno_final: Número de nitrógenos que hay una vez se produce la mezcla de los elementos.
- Oxígeno_final: Número de oxígenos que hay una vez se produce la mezcla de los elementos.
- Carga_tnt: Valor resultante de dividir la presión de detonación entre el valor de la presión de detonación del TNT.
- Balance_CO₂: Valor numérico que representa el balance de CO₂ del explosivo.
- Balance_CO: Valor numérico que representa el balance de CO del explosivo.
- Moles_totales: Número de moles gaseosos formados durante la detonación.
- N₂: Moles de N₂ formados durante la detonación.
- H₂: Moles de H₂ formados durante la detonación.
- H₂O: Moles de H₂O formados durante la detonación.
- O₂: Moles de O₂ formados durante la detonación.
- C: Moles de C(s) formados durante la detonación.
- CO: Moles de CO formados durante la detonación.
- CO₂: Moles de CO₂ formados durante la detonación.
- Fuerza_explosiva: Valor de la fuerza explosiva en equivalente de TNT.
- Constante_gurney: Valor de la constante de Gurney.
- P: Presión de detonación.
- D: Velocidad de detonación.

Una vez definidas las salidas que obtenemos de cada función, pasamos a explicar el funcionamiento que sigue cada una de ellas.

Como sabemos, no se forman todos los moles en todas las explosiones, por lo que necesitamos inicializarlas con un valor de 0 y así evitar que MATLAB de error cuando no se formen.

Asimismo, es necesario guardar los valores que son constantes durante todos los casos posibles, como son las masas moleculares y las energías de formación.



```
4 - N2=0; H2=0; H2O=0; O2=0; C=0; CO=0; CO2=0;
5
6 - load('all_materials_1.mat');
7
8 - molecular_weight_C=12;
9 - molecular_weight_H=1;
10 - molecular_weight_O=16;
11 - molecular_weight_N=14;
12 - energy_N2=0;
13 - energy_H2=0;
14 - energy_C=0;
15 - energy_H2O=-240.6;
16 - energy_CO=-111.8;
17 - energy_CO2=-393.5;
18 - energy_O2=0;
```

Figura 24: Constantes establecidas para el cálculos de las características

En la línea 6 de la figura 24, podemos leer `load('all_materials_1.mat')`. Esta línea abre todos los elementos guardados.

El `.mat` que aparece es el formato en el cual se ha guardado, ya que el `.m` en el que se encontraba anteriormente era menos óptimo y ralentizaba el programa. En el formato `.mat`, se guarda en formato cuadrícula y hace mucho más fácil el acceso a los datos guardados.

Cuando todos los valores están guardados y tenemos abierto el `.mat` de los elementos, comienza la programación. Lo primero, es separar entre los dos casos posibles mediante “Mezcla”. Esta separación se realiza mediante un `if`.

```
20 - if Mezcla==1 ;
326 - if Mezcla==2;
```

Figura 25: If de dentro de las funciones

Una vez entramos en el primer `if`, realizamos el cálculo de los valores constantes para todos los elementos puros, tanto los balances de oxígeno como el peso molecular. Para ello, definiremos los valores de `carbono_final`, `hidrogeno_final`, `nitrógeno_final` y `oxigeno_final`. Este método de definirlo será diferente según estemos en elementos puros o mezcla de explosivos.

Para el primer caso, basta con asignar el valor que cogemos de `all_materials.mat` de cada uno.

```
carbono_final=all_materials{i}{2};
hidrogeno_final=all_materials{i}{3};
```



```
nitrogeno_final=all_materials{i}{4};
oxigeno_final=all_materials{i}{5};

molecular_weight_material=all_materials{i}{2}*molecular_weight_C+
all_materials{i}{3}*molecular_weight_H+all_materials{i}{4}*
molecular_weight_N+all_materials{i}{5}*molecular_weight_O;

balance_CO2=(16*(all_materials{i}{5}-(2*all_materials{i}{2})-
(all_materials{i}{3}/2))/molecular_weight_material)*100;

balance_CO=(16*(all_materials{i}{5}-all_materials{i}{2}-
(all_materials{i}{3}/2))/molecular_weight_material)*100;
```

Por el contrario, para el caso de mezcla explosiva, los pasos a seguir no son tan sencillos, debido a que para poder obtener los balances de oxígeno, primero hemos de obtener la cantidad de cada elemento que tenemos.

Para ello, primero hemos de obtener el peso molecular de cada explosivo utilizado en la mezcla, a continuación obtenemos las composiciones molares y las fracciones molares de cada uno. Por último, se calcula la cantidad de carbonos, hidrógenos, nitrógenos y oxígenos que disponemos y por consecuencia los balances de oxígeno de cada uno.

```
peso_molecular_1=((all_materials{i}{2})*molecular_weight_C)+
((all_materials{i}{3})*molecular_weight_H)+((all_materials{i}{4})
*molecular_weight_N)+((all_materials{i}{5})*molecular_weight_O);

peso_molecular_2=((all_materials{j}{2})*molecular_weight_C)+
((all_materials{j}{3})*molecular_weight_H)+((all_materials{j}{4})
*molecular_weight_N)+((all_materials{j}{5})*molecular_weight_O);

composicion_molar_1=(porcentaje_1*1000)/peso_molecular_1;
composicion_molar_2=(porcentaje_2*1000)/peso_molecular_2;
composicion_molar_total=composicion_molar_1+composicion_molar_2;

fraccion_molar_1=composicion_molar_1/composicion_molar_total;
fraccion_molar_2=composicion_molar_2/composicion_molar_total;
molecular_weight_material=1000/composicion_molar_total;

carbono_final=(fraccion_molar_1*all_materials{i}{2})+(fraccion_molar_2
*all_materials{j}{2});

hidrogeno_final=(fraccion_molar_1*all_materials{i}{3})+(fraccion_molar
_2*all_materials{j}{3});

nitrogeno_final=(fraccion_molar_1*all_materials{i}{4})+(fraccion_molar
_2*all_materials{j}{4});
```



```
oxigeno_final=(fraccion_molar_1*all_materials{i}{5})+(fraccion_molar_2  
*all_materials{j}{5});
```

```
balance_CO2=(16*(oxigeno_final-(2*carbono_final)-(hidrogeno_final/2))/  
molecular_weight_material)*100;
```

```
balance_CO=(16*(oxigeno_final-carbono_final-(hidrogeno_final/2))/  
molecular_weight_material)*100;
```

Para finalizar, se desarrolla en función de los balances de oxígeno cada posible tipo.

Para ello, no hacemos más que un if.

A continuación se expone un ejemplo de uno de los posibles casos:

```
if balance_CO<0 && all_materials{i}{2}>all_materials{i}{5} && all_materials{i}{6}==0;  
    CO=all_materials{i}{5};  
    N2= all_materials{i}{4}/2;  
    H2=all_materials{i}{3}/2;  
    C=all_materials{i}{2}-CO;  
    display(['Se forman ',num2str(CO) ' moles de CO'])  
    display(['Se forman ',num2str(N2) ' moles de N2'])  
    display(['Se forman ',num2str(H2) ' moles de H2'])  
    display(['Se forman ',num2str(C) ' moles de C(s)'])  
    moles_totales=CO+N2+H2;  
    display(['Por lo que se forman ',num2str(moles_totales) ' moles en total '])  
    energy_material=(H2*energy_H2)+(N2*energy_N2)+(CO*energy_CO)+(C*energy_C);  
    calor_explosion=all_materials{i}{7}-energy_material;  
    display(['El calor de explosión es: ',num2str(calor_explosion)])  
    fuerza_explosiva=((840*moles_totales*calor_explosion)/(molecular_weight_material*molecular_weight_material));  
    display(['La fuerza explosiva es: ',num2str(fuerza_explosiva)])  
    calor_explosion_SI=(calor_explosion/((molecular_weight_material/1000)/Masa_carga))*1000;  
    constante_gurney=sqrt(2*calor_explosion_SI);  
    display(['La constante de Gurney es: ',num2str(constante_gurney)])  
    calor_explosion_calorias=calor_explosion*238.8/molecular_weight_material;  
    N=moles_totales/molecular_weight_material;  
    Mave=(molecular_weight_material-(12*C))/moles_totales;  
    densidad=(all_materials{i}{8});  
    Dmm=1.01*(N^0.5)*(Mave^0.25)*(calor_explosion_calorias^0.25)*(1+(1.3*densidad));  
    D=Dmm*1000;  
    P=15.58*(N*(Mave^0.5)*(calor_explosion_calorias^0.5)*(all_materials{i}{8})^2);  
    display(['La velocidad de detonacion es: ',num2str(D)])  
    display(['La presion de detonacion es: ',num2str(P)])  
    carga_tnt=P/220.63;
```

Figura 26: Programación de un if de una función

En este ejemplo se puede observar la asignación de elementos para la formación de los productos. Asimismo, también podemos ver el desarrollo de las fórmulas que hemos visto en la teoría, de modo que una vez se ejecute el programa, nos ofrezca los valores buscados.

Una vez el programa ha recorrido la función, archiva en el handles.data los valores de los resultados.



3.2.8 Resultados

Para mostrar los resultados obtenidos por el botón calcular, se utilizan textos estáticos (static-texts).

Los textos estáticos, no tienen parte programable, sino un espacio de memoria al que se le asigna un valor. Una vez han sido asignados, se pueden mostrar los valores gracias a un set, como se muestra en la figura 28

Productos nominales de la explosión								
Fórmula química	Moles totales	Moles de C(s)	Moles de CO	Moles de CO2	Moles de H2	Moles de H2O	Moles de N2	Moles de O2
Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado

Resultados						
Balance de CO	Balance de CO2	Fuerza explosiva TNT	Gurney (m/s)	Presión detonación (kBar)	Velocidad detonación (m/s)	Carga en TNT
Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado	Resultado

Figura 27: Textos estáticos de los resultados (static-texts)

```
handles.data.fuerza_explosiva = fuerza_explosiva;  
set(handles.resultado_fuerza_explosiva, 'String', strcat(num2str(roundn(fuerza_explosiva,-2))));
```

Figura 28: Asignación de valores a los textos estáticos (static-texts) de los resultados

El roundn, se encarga de mostrar el resultado en la unidad deseada. Como se puede observar en la figura 28, el roundn busca redondear a la centésima con el -2. El string se utiliza para trabajar con cadenas de caracteres.

3.2.9 Reiniciar

El último botón al que el usuario tiene acceso es el botón de reiniciar, que se puede pulsar antes del cálculo de los resultados, así como a posteriori. Para llevarlo a cabo, se ha utilizado otro botón de pulsación, de modo que una sola pulsación devuelva todos los valores a su estado inicial.



Figura 29: Botón de pulsación (push-button) para el reinicio del programa



Para ambos casos, los valores establecidos al inicializar serán los mismos, pero el espacio reservado a los resultados pasará a ser un 0.

Regla: Número compuestos: Masa carga (Kg):

Calcular **Reiniciar**

Mezcla explosiva

Componente 1:

Componente 2:

Componente 3:

Componente 4:

Fraciones molares

Fraccion molar 1:

Fraccion molar 2:

Fraccion molar 3:

Fraccion molar 4:

Productos nominales de la explosión

Fórmula química	Moles totales	Moles de C(s)	Moles de CO	Moles de CO2	Moles de H2	Moles de H2O	Moles de N2	Moles de O2
C0H0N0O0	0	0	0	0	0	0	0	0

Resultados

Balance de CO	Balance de CO2	Fuerza explosiva TNT	Gurney (m/s)	Presión detonación (kBar)	Velocidad detonación (m/s)	Carga en TNT
0	0	0	0	0	0	0

Figura 30: Ejemplo de reinicio del programa

4. RESULTADOS

En este capítulo se presentan algunos resultados ilustrativos de las capacidades del módulo desarrollado para la herramienta SimEx. Se han considerado ejemplos con diferentes masas de carga o regla de cálculo de productos, tanto para elementos puros como para mezcla de componentes.

Además, se realizará un análisis de los mismos con el objetivo de mostrar como varían las diferentes características de los explosivos.



Figura 31: Resultados 1

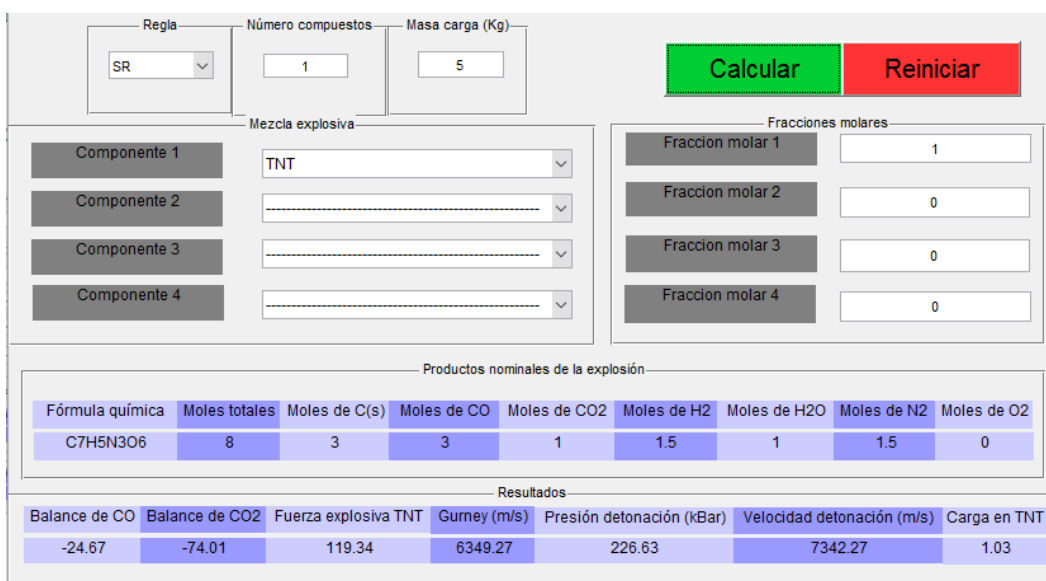


Figura 32: Resultados 2



En la figura 31 se muestran los resultados obtenidos para el elemento puro TNT utilizando la regla KW, mientras que en la figura 32 se calcula para la regla SR y modificando la masa de la carga.

Tal y como podemos observar, los valores coinciden con los obtenidos teóricamente, variando únicamente la constante de Gurney del TNT calculado por el método SR. Se debe a la masa de carga, ya que la constante de Gurney será mayor cuanto mayor sea este valor.

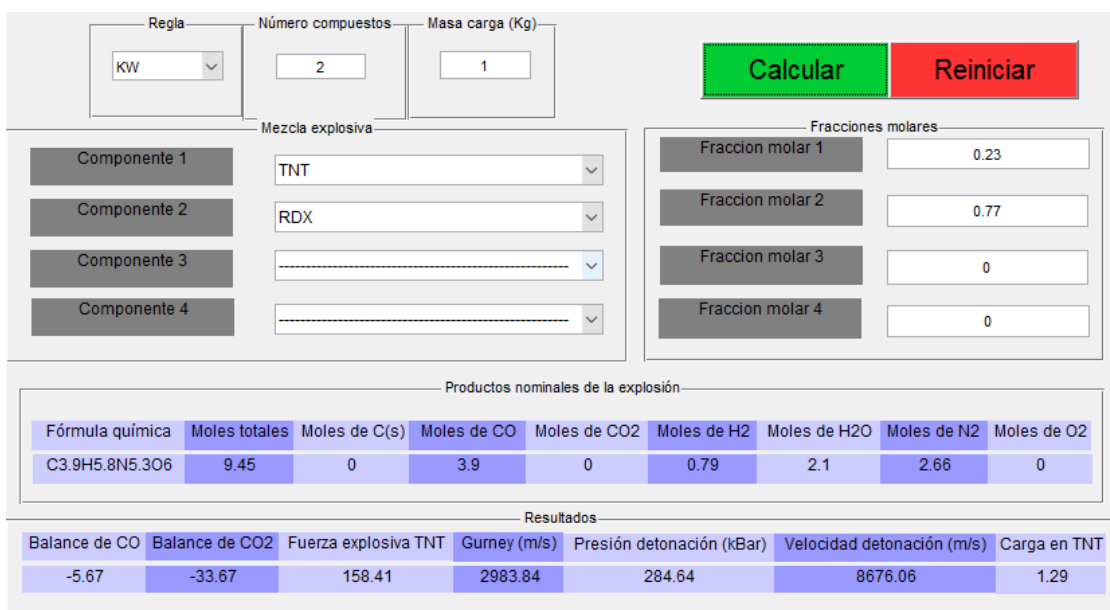


Figura 33: Resultados 3

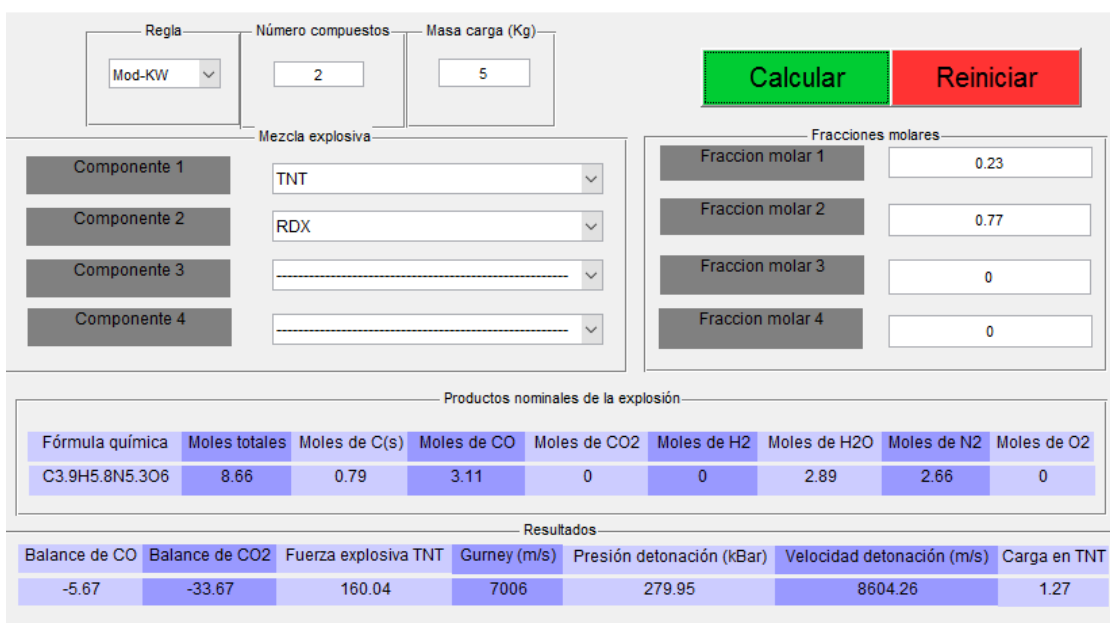


Figura 34: Resultados 4



En las figuras 34 y 35 se pueden observar los cálculos para la mezcla explosiva de TNT y RDX en proporción de 77/23, según las reglas KW y Mod-KW. A esta mezcla se la conoce tal y como hemos mencionado a lo largo de este proyecto como CYCLOTOL.

Tal y como pasa con el TNT, los valores son idénticos a los obtenidos teóricamente, con la excepción de la constante de Gurney en la regla Mod-KW, al haberse modificado la masa de la carga.

La diferencia entre las características del CYCLOTOL y el TNT se debe al RDX, al ser uno de los explosivos más potentes de la actualidad

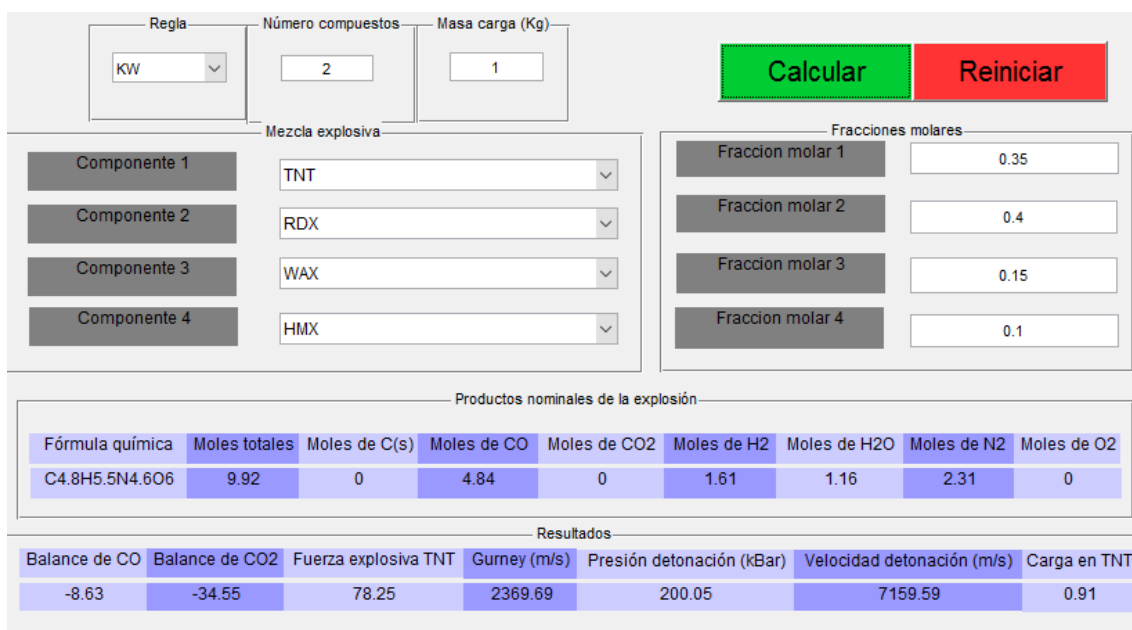


Figura 35: Resultados 5

En la figura 35 se obtienen los cálculos para la mezcla explosiva según la regla KW de TNT / RDX / WAX / HMX en proporción de 0.35 / 0.4 / 0.15 / 0.1. La mezcla no tiene un nombre específico al haber sido inventada para la ilustración de los cálculos para una mezcla de 4 componentes.

Esta mezcla es mucho menos potente que el CYCLOTOL y el TNT. Esto se debe a la presencia del HMX y en mayor medida del aglutinante (WAX).



5. PRESUPUESTO

La adquisición del programa MATLAB R2014a para el personal docente, tiene un coste de 500€, además de incluir licencias para el acceso de los estudiantes.

Si decidiésemos comercializar este proyecto, sería necesario adquirir la licencia standard, la cual tiene un precio unitario de 2000€, sin incluir licencias adicionales.

El tiempo necesitado para realizar el proyecto ha sido de 300 horas, trabajando tres horas diarias durante cinco meses. El ministerio de Educación Cultura y Deporte expuso en el Boletín Oficial del Estado, a 9 de julio de 2016, que la dotación de la beca de colaboración en la Universidad Carlos III sería de 2000€ a razón de tres horas diarias durante siete meses. [16]

Haciendo una equivalencia de euros-beca, se obtiene un sueldo de 1428.60€.

Por lo que el presupuesto total asciende a 1928.60€ en caso de no decidir comercializar o de 3428.60€ si se decidiese hacerlo.



6. CONCLUSIÓN

Se ha desarrollado un módulo para el análisis termoquímico de explosivos puros y mezclas explosivas de composición genérica CHNO. Dicho módulo es capaz de calcular a partir de la base de datos de las propiedades de explosivos CHNO guardada en Matlab las siguientes características:

- Balances de CO y CO₂. Permite conocer de antemano la relación entre la cantidad de oxígeno necesaria para oxidar todos los C(s) a CO y CO₂ y transformar el H₂ a H₂O, con la cantidad de oxígeno que posee el explosivo.
- Productos nominales de la explosión. Permite conocer los productos directos que se producen durante la explosión siguiendo una serie de aproximaciones.
- Fuerza explosiva equivalente de TNT. El programa sigue la aproximación de Berthelot, de modo que se pueda obtener un valor muy próximo al experimental.
- Constante de Gurney.
- Velocidad y presión de detonación. Siguiendo los métodos aproximados propuestos por Kamlet & Jacobs, el programa es capaz de sacar un valor bastante aproximado de ambas características.

El programa es capaz de calcular todas estas características según los 4 tipos de regla propuestos por Akhavan para el cálculo de los productos durante la explosión de un modo cómodo y rápido.



7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Kinney, G. F.; Graham, K. J. Explosive Shocks in Air, 2nd Ed. Springer-Verlag, New York, USA, 1985.
- [2] P. Politzer, J. S. Murray. The Role of Product Composition in Determining Detonation Velocity and Detonation Pressure. Central European Journal of Energetic Materials, 11(4) (2014) 459-474.
- [3] MEYER, Rudolf; KÖHLER, Josef; HOMBURG, Axel. Explosives. Fifth, completely revised edition. 2002.
- [4] Kamlet, M.J.; Jacobs, S.J. Chemistry of detonations. I. A simple method for calculating detonation properties of C,H,N,O explosives, J. Chem. Phys. 1968, 48, 23-55.
- [5] Información obtenida de la presentación de diapositivas facilitada por el SEDEX-NRBQ sobre explosivos y el material docente del Tema 2, apartado 2.6, de Seguridad de Infraestructuras Frente a Impacto e Intrusión.
- [6] <http://explosivos.wikidot.com/tipos-de-detonadores>
- [7] Hector Mora Chamorro. Manual del vigilante de explosivos. 2ª edición revisada. Editorial Club Universitario
- [8] Figura obtenida de los Apuntes de Dinámica de Explosiones de D. Marcos Vera Coello. Tema 2, Apartado 3,
- [9] Información extraída de los Apuntes de Dinámica de Explosiones de D. Marcos Vera Coello. Tema 2, Apartado 6,
- [10] Información obtenida de los Apuntes de Dinámica de Explosiones de D. Marcos Vera Coello. Tema 2, Apartado 5.8.,
- [11] Legorburu Zuazua y Luis Sánchez Barbero. Evolución de los explosivos industriales. Víctor
- [12] Manual de perforación y voladura de rocas, Serie Tecnológica y Seguridad Minera. Instituto Tecnológico Geominero de España.
- [13] EXPLOSIVES, Military. Department of the Army Technical Manual TM 9-1300-214. Washington, DC, 1967, p. 7-32.



[14] MUTHURAJAN, H.; GHEE, H. Software Development for the Detonation Product Analysis of High Energetic Materials-Part I. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2008, vol. 5, no 3-4, p. 19-35.

[15] Jacqueline Akhavan. *The Chemistry of Explosives*, 3rd ed. The Royal Society of Chemistry, 2011.

[16]http://portal.uc3m.es/portal/page/portal/becas_premios/becas_ministerio/colaboracion_dptos



8. ANEXOS

8.1 Tabla de valores característicos para cada explosivo

Elemento	Regla	Balace de CO	Balace de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
H4N2O3	KJ	20,00	20,00	185,86	6,55	55,88	1743,92
	KW			185,86	6,55	55,88	1743,92
	Mod-KW			185,86	6,55	55,88	1743,92
	SR			185,86	6,55	55,88	1743,92
H5N3O3	KJ	8,42	8,42	265,11	7,98	145,71	2784,77
	KW			265,11	7,98	145,71	2784,77
	Mod-KW			265,11	7,98	145,71	2784,77
	SR			265,11	7,98	145,71	2784,77
H5N5	KJ	-53,33	-53,33	101,43	5,93	149,09	2307,50
	KW			101,43	5,93	149,09	2307,50
	Mod-KW			101,43	5,93	149,09	2307,50
	SR			101,43	5,93	149,09	2307,50
CN4O8	KJ	57,14	48,98	174,09	6,45	60,71	2173,05
	KW			174,09	6,45	60,71	2173,05
	Mod-KW			174,09	6,45	60,71	2173,05
	SR			174,09	6,45	60,71	2173,05
CH3NO2	KJ	-13,11	-39,34	135,14	6,50	191,75	3518,17
	KW			143,09	6,69	183,29	2978,83
	Mod-KW			138,00	6,57	189,08	3314,35
	SR			141,90	6,66	192,89	3241,25
CH3NO3	KJ	10,39	-10,39	167,32	7,02	190,55	3564,20
	KW			170,35	7,08	189,92	3405,92
	Mod-KW			170,35	7,08	189,92	3405,92
	SR			169,50	7,06	190,40	3459,48
CH3N3O3	KJ	7,62	-7,62	86,83	5,48	112,48	2738,39
	KW			85,94	5,46	107,04	2586,45
	Mod-KW			85,94	5,46	107,04	2586,45
	SR			86,33	5,47	109,03	2638,07
CH4N4O2	KJ	-15,38	-30,77	259,55	7,76	126,09	2793,85
	KW			254,92	7,68	107,60	2308,39
	Mod-KW			259,55	7,76	126,09	2793,85
	SR			262,29	7,80	118,47	2507,19
CH5N3O4	KJ	6,50	-6,50	231,32	7,36	97,43	2450,97
	KW			226,04	7,28	90,77	2305,77
	Mod-KW			226,04	7,28	90,77	2305,77
	SR			228,02	7,31	93,12	2355,17



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
CH6N2O3	KJ	-17,02	-34,04	211,17	7,45	182,20	3192,84
	KW			216,15	7,54	166,52	2730,17
	Mod-KW			211,17	7,45	182,20	3192,84
	SR			218,37	7,58	177,51	2917,71
CH6N4O3	KJ	-13,11	-26,23	163,39	6,52	99,78	2407,67
	KW			150,29	6,26	76,12	1919,74
	Mod-KW			163,39	6,52	99,78	2407,67
	SR			158,75	6,43	87,82	2121,68
C2H3NO3	KJ	-8,99	-44,94	236,87	7,58	149,22	3390,92
	KW			247,71	7,75	135,68	2680,98
	Mod-KW			245,26	7,71	142,62	2938,51
	SR			247,03	7,74	148,26	3070,03
C2H4N2O6	KJ	21,05	0	249,45	7,98	187,95	3688,35
	KW			249,45	7,98	187,95	3688,35
	Mod-KW			249,45	7,98	187,95	3688,35
	SR			249,45	7,98	187,95	3688,35
C2H5NO2	KJ	-53,33	-96,00	92,61	5,54	149,22	2980,33
	KW			69,02	4,78	56,37	1418,83
	Mod-KW			92,61	5,54	149,22	2980,33
	SR			92,48	5,54	113,28	2160,60
C2H5NO3	KJ	-26,37	-61,54	121,20	6,21	185,62	3517,79
	KW			130,70	6,45	166,04	2682,38
	Mod-KW			123,51	6,27	184,82	3382,50
	SR			132,7	6,5	187,67	3063,24
C2H6N2O2	KJ	-53,33	-88,89	138,80	6,39	171,84	3034,10
	KW			122,07	5,99	97,48	1865,83
	Mod-KW			138,80	6,39	171,72	3034,10
	SR			140,49	6,43	141,72	2386,20
C2H6N4O4	KJ	-10,67	-32,00	295,34	8,29	167,99	3302,79
	KW			305,27	8,43	157,94	2838,73
	Mod-KW			298,58	8,33	164,23	3126,62
	SR			304,91	8,42	166,44	3063,65
C2H7N3O6	KJ	4,73	-14,20	241,50	7,77	162,91	3238,61
	KW			243,06	7,79	156,23	2996,76
	Mod-KW			243,06	7,79	156,23	2996,76
	SR			243,08	7,79	159,08	3079,49
H4N4	KJ	-53,33	-53,33	6,14	138,40	83,57	1727,62
	KW			6,14	138,40	83,57	1727,62
	Mod-KW			6,14	138,40	83,57	1727,62
	SR			6,14	138,40	83,57	1727,62
C2H8N10O	KJ	-42,55	-59,57	269,57	7,93	144,54	2681,18
	KW			264,83	7,86	129,99	2412,16
	Mod-KW			269,57	7,93	144,54	2681,18
	SR			268,87	7,92	137,09	2519,55



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C2H10N4O6	KJ	-8,60	-25,81	218,66	7,31	123,09	2695,91
	KW			208,40	7,14	100,99	2229,25
	Mod-KW			214,90	7,25	114,79	2520,82
	SR			216,28	7,27	113,66	2457,68
C3N12	KJ	-23,53	-47,06	189,62	6,87	112,49	3017,68
	KW			189,62	6,87	112,49	3017,68
	Mod-KW			189,62	6,87	112,49	3017,68
	SR			189,62	6,87	112,49	3017,68
C3H4N6O6	KJ	7,27	-14,53	328,60	8,56	145,97	3305,00
	KW			334,77	8,64	143,23	3062,43
	Mod-KW			334,77	8,64	143,23	3062,43
	SR			333,52	8,62	144,80	3145,36
C3H5N3O9	KJ	3,52	24,67	274,76	8,18	171,17	3572,21
	KW			274,76	8,18	171,17	3572,21
	Mod-KW			274,76	8,18	171,17	3572,21
	SR			274,76	8,18	171,17	3572,21
C3H6N6O6	KJ	0	-21,62	352,34	8,88	178,43	3546,18
	KW			364,03	9,03	175,03	3206,16
	Mod-KW			364,03	9,03	175,03	3206,16
	SR			361,72	9,00	177,61	3323,39
C4H6N4O6	KJ	-7,77	-38,84	203,98	7,16	138,21	3158,50
	KW			205,56	7,18	114,71	2500,27
	Mod-KW			206,02	7,19	122,36	2738,95
	SR			208,48	7,23	127,94	2860,89
C4H6N4O12	KJ	26,49	5,30	268,58	8,07	159,51	3474,61
	KW			268,58	8,07	159,51	3474,61
	Mod-KW			268,58	8,07	159,51	3474,61
	SR			268,58	8,07	159,51	3474,61
C4H7N3O9	KJ	9,96	-16,60	245,28	7,85	174,17	3591,07
	KW			253,62	7,98	174,62	3336,67
	Mod-KW			253,62	7,98	174,62	3336,67
	SR			251,48	7,94	175,33	3423,57
C4H8N2O7	KJ	-8,16	-40,82	185,06	7,05	161,57	3405,82
	KW			192,59	7,19	148,21	2772,15
	Mod-KW			190,38	7,15	154,27	2999,85
	SR			191,55	7,17	159,63	3117,17
C4H8N4O8	KJ	0	-26,67	252,49	7,88	168,95	3473,89
	KW			260,32	8,00	161,63	3039,12
	Mod-KW			260,32	8,00	161,63	3039,12
	SR			259,60	7,99	166,28	3190,63
C4H8N8O8	KJ	0	-21,62	383,28	9,15	177,76	3539,52
	KW			395,83	9,30	174,22	3198,79
	Mod-KW			395,83	9,30	174,22	3198,79
	SR			393,38	9,27	176,85	3316,25



Elemento	Regla	Balace de CO	Balace de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C5H8N4O12	KJ	13,19	-10,13	332,89	8,71	170,07	3577,15
	KW			340,68	8,81	171,36	3423,55
	Mod-KW			340,68	8,81	171,36	3423,55
	SR			338,41	8,78	171,25	3475,51
C5H9N3O9	KJ	-3,14	-34,51	216,40	7,45	166,94	3505,08
	KW			226,43	7,62	159,11	2963,49
	Mod-KW			224,80	7,60	160,62	3047,52
	SR			218,58	7,49	160,90	3178,92
C6N6O6	KJ	0	-38,09	318,01	8,39	142,85	3779,60
	KW			356,18	8,87	153,60	3200,08
	Mod-KW			356,18	8,87	153,60	3200,08
	SR			348,63	8,78	154,51	3404,20
C6N6O12	KJ	27,59	0	385,31	9,08	142,85	3626,42
	KW			385,31	9,08	142,85	3626,42
	Mod-KW			385,31	9,08	142,85	3626,42
	SR			385,31	9,08	142,85	3626,42
C6N12O6	KJ	0	-28,57	319,84	8,48	154,70	3708,24
	KW			345,05	8,81	160,76	3273,70
	Mod-KW			345,05	8,81	160,76	3273,70
	SR			339,37	8,73	161,27	3424,68
C6H2N4O5	KJ	-15,24	-60,95	211,10	7,11	118,59	3443,66
	KW			233,13	7,48	118,33	2719,54
	Mod-KW			228,22	7,40	120,72	2936,42
	SR			226,01	7,36	123,71	3123,15
C6H2N6O10	KJ	15,09	-15,09	251,32	7,66	116,17	3216,77
	KW			258,01	7,76	115,50	2957,16
	Mod-KW			258,01	7,76	115,50	2957,16
	SR			256,59	7,74	116,43	3046,15
C6H3N3	KJ	102,56	-184,62	75,73	4,53	63,16	2421,73
	KW			75,73	4,53	63,16	2421,73
	Mod-KW			75,73	4,53	63,16	2421,73
	SR			75,73	4,53	63,16	2421,73
C6H3N3O6	KJ	-11,27	-56,34	248,03	7,57	126,18	3491,31
	KW			272,83	7,94	120,42	2604,94
	Mod-KW			268,27	7,87	127,18	2932,54
	SR			269,45	7,89	132,37	3096,84
C6H3N3O6	KJ	-11,27	-56,34	231,02	7,36	120,21	3407,61
	KW			249,03	7,64	110,17	2491,64
	Mod-KW			247,26	7,61	118,64	2832,37
	SR			249,27	7,64	124,40	3002,16
C6H3N3O7	KJ	-3,49	-45,41	248,37	7,53	112,29	3263,11
	KW			256,18	7,65	99,12	2450,49
	Mod-KW			256,93	7,66	102,38	2562,68
	SR			248,32	7,53	104,03	2750,09



Elemento	Regla	Balace de CO	Balace de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C6H3N3O8	KJ	3,27	-35,92	255,76	7,56	97,68	3019,36
	KW			251,62	7,49	81,81	2302,70
	Mod-KW			251,62	7,49	81,81	2302,70
	SR			259,49	7,61	91,09	2563,94
C6H3N5O8	KJ	2,93	-32,23	311,84	8,29	131,09	3428,19
	KW			328,84	8,51	128,15	2886,10
	Mod-KW			328,84	8,51	128,15	2886,10
	SR			327,38	8,49	132,35	3077,43
C6H4N2O4	KJ	-38,10	-95,24	166,39	6,41	105,37	3246,17
	KW			182,76	6,71	95,35	2334,17
	Mod-KW			176,27	6,59	106,44	2918,05
	SR			183,72	6,77	110,77	2796,24
C6H4N2O4	KJ	-38,10	-95,24	165,92	6,38	102,14	3195,91
	KW			179,52	6,64	89,68	2263,74
	Mod-KW			175,11	6,56	102,39	2862,03
	SR			184,17	6,73	106,18	2737,73
C6H4N2O4	KJ	-38,10	-95,24	165,27	6,37	101,34	3183,42
	KW			178,12	6,61	88,29	2246,68
	Mod-KW			174,26	6,54	101,39	2848,08
	SR			183,19	6,71	105,05	2723,14
C6H4N2O5	KJ	-26,09	-78,26	211,78	7,06	115,48	3353,00
	KW			230,71	7,37	103,58	2381,70
	Mod-KW			226,51	7,36	116,04	2910,76
	SR			234,52	7,43	121,12	2894,50
C6H4N4O6	KJ	-14,04	-56,14	231,09	7,32	112,00	3183,33
	KW			233,32	7,35	90,14	2212,07
	Mod-KW			238,67	7,44	105,41	2674,49
	SR			244,61	7,53	110,72	2741,06
C6H5N5O6	KJ	-16,46	-55,97	255,15	7,60	116,30	3157,35
	KW			256,15	7,61	92,62	2207,15
	Mod-KW			261,96	7,70	110,50	2742,58
	SR			269,81	7,81	114,02	2707,39
C6H6N4O7	KJ	-13,01	-52,03	234,65	7,37	113,27	3078,53
	KW			228,93	7,28	86,77	2149,51
	Mod-KW			237,14	7,41	103,18	2591,28
	SR			242,97	7,50	108,31	2654,97
C6H7N2.25O9.5	KJ	0	-36,57	227,08	7,29	106,16	2949,87
	KW			214,73	7,09	81,91	2195,06
	Mod-KW			214,73	7,09	81,91	2195,06
	SR			224,87	7,26	94,14	2472,40
C6H7N2.5O10	KJ	2,92	-32,12	235,13	7,45	117,11	3090,30
	KW			233,02	7,42	101,17	2477,81
	Mod-KW			233,02	7,42	101,17	2477,81
	SR			237,70	7,49	109,68	2697,47



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C6H7N3O11	KJ	8,08	-24,24	259,01	7,83	140,83	3373,62
	KW			267,93	7,97	137,00	2967,67
	Mod-KW			267,93	7,97	137,00	2967,67
	SR			266,80	7,95	140,10	3108,88
C6H8N2O6	KJ	-31,37	-78,43	158,80	6,39	110,87	2995,90
	KW			128,39	5,74	51,15	1502,91
	Mod-KW			161,11	6,43	105,35	2703,65
	SR			165,39	6,59	96,99	2267,53
C6H8N4O9	KJ	-5,71	-40,00	216,09	7,16	104,84	2867,49
	KW			200,65	6,90	76,83	2066,05
	Mod-KW			207,21	7,01	85,61	2277,84
	SR			214,49	7,13	96,03	2530,25
C6H8N6O18	KJ	28,32	7,08	309,22	8,45	954,69	3448,37
	KW			309,22	8,45	954,69	3448,37
	Mod-KW			309,22	8,45	954,69	3448,37
	SR			309,22	8,45	954,69	3448,37
C6H9N3O11	KJ	2,68	-29,43	210,09	7,34	953,98	3442,44
	KW			217,69	7,48	147,07	2953,84
	Mod-KW			217,69	7,48	147,07	2953,84
	SR			217,24	7,47	152,06	3725,20
C7H3N3O7	KJ	-9,96	-56,43	222,56	7,21	109,01	3298,20
	KW			232,84	7,37	94,06	2323,24
	Mod-KW			235,17	7,41	103,70	2645,89
	SR			237,52	7,45	110,75	2879,73
C7H5N3O6	KJ	-24,76	-74,01	206,89	7,02	115,83	3299,63
	KW			220,63	7,24	100,48	2330,43
	Mod-KW			218,69	7,21	114,73	2875,40
	SR			226,63	7,34	119,34	2839,48
C7H5N3O6	KJ	-24,67	-74,01	160,29	6,45	117,56	3324,11
	KW			172,20	6,69	103,49	2364,98
	Mod-KW			169,83	6,64	116,98	2903,47
	SR			176,04	6,76	121,74	2867,90
C7H5N3O7	KJ	-16,46	-62,55	155,51	6,41	115,83	3274,51
	KW			159,83	6,50	93,65	2219,44
	Mod-KW			163,13	6,57	111,30	2752,48
	SR			167,85	6,66	116,75	2791,79
C7H5N3O7	KJ	-16,46	-62,55	217,55	7,15	112,48	3226,85
	KW			219,64	7,19	87,76	2148,50
	Mod-KW			226,80	7,30	106,75	2695,60
	SR			233,51	7,41	112,11	2735,73
C7H5N5O8	KJ	-8,36	-47,39	263,05	7,79	136,14	3464,64
	KW			283,45	8,09	139,98	2720,56
	Mod-KW			279,06	8,03	134,42	2957,67
	SR			278,51	8,02	139,06	3135,27



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C7H6N2O4	KJ	-52,75	-114,29	145,15	6,04	100,10	3104,64
	KW			155,97	6,26	82,32	2111,66
	Mod-KW			149,54	6,13	100,45	2950,47
	SR			164,04	6,42	102,27	2578,26
C7H12N2O6	KJ	-50,91	-101,82	110,81	5,61	107,23	2832,65
	KW			65,88	4,32	77,99	999,23
	Mod-KW			110,81	5,61	113,39	2832,65
	SR			109,92	5,58	94,07	1927,15
C8H7N3O6	KJ	-36,51	-89,63	184,51	6,69	113,39	3226,54
	KW			195,72	6,89	94,07	2215,19
	Mod-KW			192,67	6,84	113,04	2240,67
	SR			204,83	7,05	115,85	2717,70
C10H4N4O8	KJ	-20,78	-72,73	233,76	7,26	103,26	3288,98
	KW			253,10	7,55	95,48	2415,56
	Mod-KW			250,77	7,52	102,38	2740,01
	SR			252,60	7,54	107,18	2901,91
C10H5N3O6	KJ	-39,54	-100,38	177,97	6,45	88,13	3098,07
	KW			191,78	6,69	78,06	2210,88
	Mod-KW			188,75	6,64	87,87	2708,63
	SR			195,67	6,76	91,47	2675,72
C10H16N6O19	KJ	3,05	-27,48	280,44	8,20	180,01	3689,29
	KW			296,10	8,43	179,98	3269,98
	Mod-KW			296,10	8,43	179,98	3269,98
	SR			292,86	8,38	182,33	3415,47
C12H4N6O12	KJ	-7,55	-58,83	245,51	7,52	118,83	3463,54
	KW			268,41	7,86	114,07	2602,67
	Mod-KW			266,15	7,83	118,70	2826,48
	SR			263,22	7,78	123,52	3097,07
C12H4N8O8	KJ	-24,74	-74,23	239,96	7,34	107,73	3325,33
	KW			264,31	7,71	107,64	2665,09
	Mod-KW			257,01	7,60	109,51	2903,54
	SR			256,98	7,60	112,320	3025,82
C12H4N8O8	KJ	-24,74	-74,23	250,78	7,46	107,81	3326,62
	KW			276,29	7,83	107,77	2666,71
	Mod-KW			268,64	7,72	109,62	2905,03
	SR			268,59	7,72	112,43	3027,25
C12H4N8O10	KJ	-15,24	-60,95	235,24	7,36	113,41	3367,63
	KW			256,19	7,68	110,05	2622,61
	Mod-KW			252,13	7,62	113,47	2846,89
	SR			250,62	7,59	117,15	3041,17
C12H4N8O12	KJ	-7,08	-49,56	265,46	7,76	124,94	3496,23
	KW			291,33	8,13	122,51	2706,47
	Mod-KW			287,32	8,08	125,85	2909,43
	SR			283,36	8,02	129,68	3157,26



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C12H6N8O12	KJ	-10,57	-52,86	258,42	7,65	117,57	3324,38
	KW			272,91	7,86	105,13	2445,66
	Mod-KW			272,36	7,85	113,73	2771,90
	SR			275,17	7,89	119,52	2934,78
C13H5N5O11	KJ	-17,69	-68,80	250,58	7,44	102,46	3276,78
	KW			267,79	7,69	100,10	2680,60
	Mod-KW			267,79	7,69	100,10	2680,60
	SR			269,48	7,72	105,56	2879,98
C14H6N6O12	KJ	-17,78	-67,56	231,29	7,30	113,27	3399,70
	KW			254,58	7,65	108,24	2538,23
	Mod-KW			250,25	7,59	114,24	2856,56
	SR			251,32	7,60	118,88	3016,24
C17H5N13O16	KJ	-8,66	-50,70	287,71	7,98	123,75	3479,04
	KW			315,43	8,35	122,74	2750,15
	Mod-KW			310,72	8,23	125,01	2925,52
	SR			304,83	8,21	127,48	3146,68
C18H5N9O18	KJ	-6,30	-51,65	256,10	7,62	117,42	3469,31
	KW			280,62	7,98	113,68	2621,98
	Mod-KW			278,37	7,95	117,40	2808,73
	SR			271,69	7,85	120,18	3052,58
C18H6N8O16	KJ	-13,56	-62,37	248,29	7,48	120,18	3399,87
	KW			272,07	7,83	111,08	2550,63
	Mod-KW			269,09	7,79	106,52	2795,63
	SR			267,13	7,76	111,27	3034,11
C18H7N11O18	KJ	-8,42	-51,73	254,12	7,58	113,10	3319,58
	KW			268,31	7,79	101,62	2441,16
	Mod-KW			268,44	7,79	108,57	2704,73
	SR			269,28	7,80	114,78	2941,82
C21H9N15O18	KJ	-15,81	-60,08	225,10	7,18	101,06	3120,87
	KW			230,49	7,27	86,17	2278,29
	Mod-KW			232,54	7,30	94,79	2591,89
	SR			235,95	7,36	100,29	2748,07
C22H9N15O20	KJ	-12,95	-56,79	260,37	7,56	99,92	3110,10
	KW			263,21	7,60	82,84	2224,77
	Mod-KW			267,52	7,67	91,96	2528,48
	SR			271,79	7,73	98,44	2725,75
C23H9N15O22	KJ	-10,39	-53,84	252,35	7,54	110,15	3271,86
	KW			264,85	7,73	98,23	2413,74
	Mod-KW			265,14	7,73	105,25	2682,30
	SR			266,58	7,75	111,24	2900,39
C24H6N12O24	KJ	-5,67	-51,06	264,80	7,77	117,10	3477,91
	KW			290,71	8,08	114,11	2639,14
	Mod-KW			288,46	8,05	117,34	2806,87
	SR			277,55	7,93	119,02	3036,58



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
C24H6N14O24	KJ	-5,49	-49,43	261,77	7,71	121,43	3510,83
	KW			288,61	8,09	120,24	2712,83
	Mod-KW			285,60	8,05	122,81	2871,18
	SR			276,32	7,92	123,88	3089,17
C24H6N16O24	KJ	-5,32	-47,89	277,28	7,89	126,53	3555,14
	KW			307,36	8,31	127,55	2797,62
	Mod-KW			303,32	8,23	129,39	2946,67
	SR			292,90	8,11	129,63	3153,16
C24H9N9O18	KJ	-23,63	-77,64	287,68	6,66	92,58	3154,54
	KW			197,98	6,84	81,26	2257,16
	Mod-KW			198,88	6,85	89,38	2593,29
	SR			201,06	6,89	94,47	2759,61
C6H6N6O6	KJ	-18,60	-55,81	284,35	7,89	114,91	3067,90
	KW			277,85	7,80	86,76	2107,39
	Mod-KW			288,83	7,95	108,95	2726,98
	SR			297,95	8,07	109,99	2599,34
AMATOL	KJ	11,07	1,20	266,49	8,20	138,84	2872,42
	KW			266,49	8,20	138,84	2872,42
	Mod-KW			266,49	8,20	138,84	2872,42
	SR			266,49	8,20	138,84	2872,42
ANFO	KJ	4,68	-2,09	293,06	8,14	140,04	2771,17
	KW			292,10	8,13	138,04	2730,75
	Mod-KW			292,10	8,13	138,04	2730,75
	SR			292,44	8,13	138,72	2744,29
COMP. A3	KJ	-20,88	-50,75	320,91	8,31	168,01	3426,48
	KW			343,30	8,60	155,66	2724,24
	Mod-KW			326,63	8,39	167,07	3283,66
	SR			343,51	8,63	170,40	3046,66
COMP. B3	KJ	-8,88	-40,48	315,01	8,20	154,52	3459,45
	KW			275,21	8,46	148,08	2850,52
	Mod-KW			269,26	8,37	151,86	3091,17
	SR			271,10	8,39	156,01	3176,77
CYCLOTOL	KJ	-5,67	-33,67	328,35	8,45	162,97	3491,02
	KW			284,64	8,68	158,41	2983,84
	Mod-KW			279,95	8,60	160,04	3133,18
	SR			339,12	8,59	163,33	3262,75
LX-14	KJ	-5,12	-29,45	370,51	6,94	171,60	3489,38
	KW			387,80	7,10	167,22	3051,53
	Mod-KW			381,61	7,04	168,41	3183,76
	SR			380,44	7,03	171,37	3290,24
OCTOL	KJ	-5,85	-34,04	356,53	8,59	162,03	3484,16
	KW			376,02	8,82	157,23	2970,75
	Mod-KW			369,76	8,74	159,01	3125,17
	SR			368,43	8,73	162,38	3252,64



Elemento	Regla	Balance de CO	Balance de CO2	P (kBar)	D (mm/μm)	Fuerza explosiva	Constante Gurney(m/s)
PBX-9011	KJ	-11,38	-39,01	354,99	6,33	164,38	3427,10
	KW			374,96	6,51	156,34	2861,28
	Mod-KW			364,36	6,42	161,40	3165,30
	SR			371,92	6,48	165,23	3147,46
PBXC-116	KJ	-22,11	-53,72	224,17	6,54	143,13	3187,64
	KW			299,17	6,59	118,21	2364,93
	Mod-KW			297,71	6,58	140,33	3025,41
	SR			311,19	6,72	138,89	2749,49
PENTOLITE	KJ	-4,74	-42,07	247,06	7,83	141,69	3441,19
	KW			261,03	8,04	133,21	2760,11
	Mod-KW			259,14	8,01	136,13	2895,05
	SR			253,64	7,73	138,72	3081,49
CL-20	KJ	10,96	-10,96	440,92	9,62	169,64	3620,05
	KW			453,07	9,75	171,76	3455,59
	Mod-KW			453,07	9,75	171,76	3455,59
	SR			449,52	9,71	171,41	3511,27
FOX-7	KJ	0	-21,62	339,02	8,62	142,05	3164,01
	KW			340,10	8,63	131,36	2777,59
	Mod-KW			340,10	8,63	131,36	2777,59
	SR			341,81	8,65	136,37	2912,10
NO	KJ	53,33	53,33	116,46	5,71	68,81	2217,06
	KW			116,46	5,71	68,81	2217,06
	Mod-KW			116,46	5,71	68,81	2217,06
	SR			116,46	5,71	68,81	2217,06



8.2 Tabla de moles producidos durante la detonación

Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
H4N2O3	KJ	1,00	0	2,00	0,50	0	0	0	3,50
	KW	1,00	0	2,00	0,50	0	0	0	3,50
	Mod-KW	1,00	0	2,00	0,50	0	0	0	3,50
	SR	1,00	0	2,00	0,50	0	0	0	3,50
H5N3O3	KJ	1,50	0	2,50	0,25	0	0	0	4,25
	KW	1,50	0	2,50	0,25	0	0	0	4,25
	Mod-KW	1,50	0	2,50	0,25	0	0	0	4,25
	SR	1,50	0	2,50	0,25	0	0	0	4,25
H5N5	KJ	2,50	2,50	0	0	0	0	0	5,00
	KW	2,50	2,50	0	0	0	0	0	5,00
	Mod-KW	2,50	2,50	0	0	0	0	0	5,00
	SR	2,50	2,50	0	0	0	0	0	5,00
CN4O8	KJ	2,00	0	0	3,00	0	0	1,00	6,00
	KW	2,00	0	0	3,00	0	0	1,00	6,00
	Mod-KW	2,00	0	0	3,00	0	0	1,00	6,00
	SR	2,00	0	0	3,00	0	0	1,00	6,00
CH3NO2	KJ	0,50	0	1,50	0	0,75	0	0,25	2,25
	KW	0,50	0,50	1,00	0	0	1,00	0	3,00
	Mod-KW	0,50	0	1,50	0	0,50	0,50	0	2,50
	SR	0,50	0,33	1,17	0	0,33	0,50	0,17	2,67
CH3NO3	KJ	0,50	0	1,50	0	0,25	0	0,75	2,75
	KW	0,50	0	1,50	0	0	0,50	0,50	3,00
	Mod-KW	0,50	0	1,50	0	0	0,50	0,50	3,00
	SR	0,50	0	1,50	0	0,08	0,33	0,58	2,92
CH3N3O3	KJ	1,50	0	1,50	0	0,25	0	0,75	3,75
	KW	1,50	0	1,50	0	0	0,50	0,50	4,00
	Mod-KW	1,50	0	1,50	0	0	0,50	0,50	4,00
	SR	1,50	0	1,50	0	0,08	0,33	0,58	3,91
CH4N4O2	KJ	2,00	0	2,00	0	1,00	0	0	4,00
	KW		1,00	1,00	0	0	1,00	0	5,00
	Mod-KW		0	2,00	0	1,00	0	0	4,00
	SR		0,83	1,17	0	0,33	0,5	0,17	4,67
CH5N3O4	KJ	1,50	0	2,50	0	0,25	0	0,75	4,75
	KW		0	2,50	0	0	0,50	0,50	5,00
	Mod-KW		0	2,50	0	0	0,50	0,50	5,00
	SR		0	2,50	0	0,08	0,33	0,58	4,92
CH6N2O3	KJ	1,00	0	3,00	0	1,00	0	0	4,00
	KW		1,00	2,00	0	0	1,00	0	5,00
	Mod-KW		0	3,00	0	1,00	0	0	4,00
	SR		0,83	2,17	0	0,33	0,50	0,17	4,67
CH6N4O3	KJ	2,00	0	3,00	0	1,00	0	0	5,00
	KW		1,00	2,00	0	0	1,00	0	6,00
	Mod-KW		0	3,00	0	1,00	0	0	5,00
	SR		0,83	2,17	0	0,33	0,5	0,17	5,67



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C2H3NO3	KJ	0,50	0	1,50	0	1,25	0	0,75	2,75
	KW		0,50	1,00	0	0	2,00	0	4,00
	Mod-KW		0	1,50	0	0,50	1,50	0	3,50
	SR		0,17	1,33	0	0,67	1,00	0,33	3,33
C2H4N2O6	KJ	1,00	0	2,00	0	0	0	2,00	5,00
	KW		0	2,00	0	0	0	2,00	5,00
	Mod-KW		0	2,00	0	0	0	2,00	5,00
	SR		0	2,00	0	0	0	2,00	5,00
C2H5NO2	KJ	0,50	0,50	2,00	0	2,00	0	0	3,00
	KW		2,50	0	0	0	2,00	0	5,00
	Mod-KW		0,50	2,00	0	2,00	0	0	3,00
	SR		0,50	2,00	0	2,00	0	0	4,33
C2H5NO3	KJ	0,50	0	2,50	0	1,75	0	0,25	3,25
	KW		1,50	1,00	0	0	2,00	0	5,00
	Mod-KW		0	2,50	0	1,50	0,50	0	3,50
	SR		1,17	1,33	0	0,67	1,00	0,33	4,33
C2H6N2O2	KJ	1,00	1,00	0	0	0	2,00	0	4,00
	KW		3,00	2,00	0	2,00	0	0	6,00
	Mod-KW		1,00	0,33	0	0,67	1,00	0,33	4,00
	SR		2,67	3,00	0	1,50	0	0,50	5,33
C2H6N4O4	KJ	2,00	0	3,00	0	1,50	0	0,50	5,50
	KW		1,00	2,00	0	0	2,00	0	7,00
	Mod-KW		0	3,00	0	1,00	1,00	0	6,00
	SR		0,67	2,33	0	0,67	1,00	0,33	6,33
C2H7N3O6	KJ	1,50	0	3,5	0	0	0,75	1,25	6,25
	KW		0	3,5	0	0	1,5	0,50	7,00
	Mod-KW		0	3,5	0	0	1,5	0,50	7,00
	SR		0	3,5	0	0,25	1,00	0,75	6,75
H4N4	KJ	2,00	2,00	0	0	0	0	0	4,00
	KW		2,00	0	0	0	0	0	4,00
	Mod-KW		2,00	0	0	0	0	0	4,00
	SR		2,00	0	0	0	0	0	4,00
C2H8N10O	KJ	5,00	3,00	1,00	0	2,00	0	0	9,00
	KW		4,00	0	0	1,00	1,00	0	10,00
	Mod-KW		3,00	1,00	0	2,00	0	0	9,00
	SR		3,83	0,17	0	1,33	0,50	0,17	9,67
C2H10N4O6	KJ	2,00	0	5,00	0	1,50	0	0,50	7,50
	KW		1,00	4,00	0	0	2,00	0	9,00
	Mod-KW		0	5,00	0	1,00	1,00	0	8,00
	SR		0,67	4,33	0	0,67	1,00	0,33	8,33
C3N12	KJ	6,00	0	0	0	3	0	0	6,00
	KW		0	0	0	3	0	0	6,00
	Mod-KW		0	0	0	3	0	0	6,00
	SR		0	0	0	3	0	0	6,00
C3H4N6O6	KJ	3,00	0	2,00	0	1,00	0	2,00	7,00
	KW		0	2,00	0	0	2,00	1,00	8,00
	Mod-KW		0	2,00	0	0	2,00	1,00	8,00
	SR		0	2,00	0	0,33	1,33	1,33	7,67



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C3H5N3O9	KJ	1,50	0	2,50	0,25	0	0	3,00	7,25
	KW		0	2,50	0,25	0	0	3,00	7,25
	Mod-KW		0	2,50	0,25	0	0	3,00	7,25
	SR		0	2,50	0,25	0	0	3,00	7,25
C3H6N6O6	KJ	3,00	0	3,00	0	1,50	0	1,50	7,50
	KW		0	3,00	0	0	3,00	0	9,00
	Mod-KW		0	3,00	0	0	3,00	0	9,00
	SR		0	3,00	0	0,50	2,00	0,50	8,50
C4H6N4O6	KJ	2,00	0	3,00	0	2,50	0	1,50	6,50
	KW		1	2,00	0	0	4,00	0	9,00
	Mod-KW		0	3,00	0	1,00	3,00	0	8,00
	SR		0,33	2,67	0	1,33	2,00	0,67	7,67
C4H6N4O12	KJ	2,00	0	3,00	0,50	0	0	4,00	9,50
	KW		0	3,00	0,50	0	0	4,00	9,50
	Mod-KW		0	3,00	0,50	0	0	4,00	9,50
	SR		0	3,00	0,50	0	0	4,00	9,50
C4H7N3O9	KJ	1,50	0	3,50	0	1,25	0	2,75	7,75
	KW		0	3,50	0	0	2,50	1,50	9,00
	Mod-KW		0	3,50	0	0	2,50	1,50	9,00
	SR		0	3,50	0	0,42	1,67	1,92	8,58
C4H8N2O7	KJ	1,00	0	4,00	0	2,50	0	1,50	6,50
	KW		1,00	3,00	0	0	4,00	0	9,00
	Mod-KW		0	4,00	0	1,00	3,00	0	8,00
	SR		0,33	3,67	0	1,33	2,00	0,67	7,67
C4H8N4O8	KJ	2,00	0	4,00	0	2,00	0	2,00	8,00
	KW		0	4,00	0	0	4,00	0	10,00
	Mod-KW		0	4,00	0	0	4,00	0	10,00
	SR		0	4,00	0	0,67	2,67	0,67	9,33
C4H8N8O8	KJ	4,00	0	4,00	0	2,00	0	2,00	10,00
	KW		0	4,00	0	0	4,00	0	12,00
	Mod-KW		0	4,00	0	0	0	0	12,00
	SR		0	4,00	0	0,67	2,67	0,67	11,33
C5H8N4O12	KJ	2,00	0	4,00	0	1,00	0	4,00	10,00
	KW		0	4,00	0	0	2,00	3,00	11,00
	Mod-KW		0	4,00	0	0	2,00	3,00	11,00
	SR		0	4,00	0	0,33	1,33	3,33	10,67
C5H9N3O9	KJ	1,50	0	4,50	0	2,75	0	2,25	8,25
	KW		0,50	4,00	0	0	5,000	0	11,00
	Mod-KW		0	4,50	0	0,50	4,50	0	10,50
	SR		0	4,50	0,33	1,67	2,50	0,83	9,67
C6N6O6	KJ	3,00	0	0	0	3,00	0	3,00	6,00
	KW		0	0	0	0	6,00	0	9,00
	Mod-KW		0	0	0	0	6,00	0	9,00
	SR		0	0	0	1,00	4,00	1,00	8,00



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C6N6O12	KJ	3,00	3,00	0	0	0	0	6,00	9,00
	KW		3,00	0	0	0	0	6,00	9,00
	Mod-KW		3,00	0	0	0	0	6,00	9,00
	SR		3,00	0	0	0	0	6,00	9,00
C6N12O6	KJ	6,00	0	0	0	3,00	0	3,00	9,00
	KW		0	0	0	0	6,00	0	12,00
	Mod-KW		0	0	0	0	6,00	0	12,00
	SR		0	0	0	1,00	4,00	1,00	11,00
C6H2N4O5	KJ	2,00	0	1,00	0	4,00	0	2,00	5,00
	KW		1,00	0	0	1,00	5,00	0	8,00
	Mod-KW		0	1,00	0	2,00	4,00	0	7,00
	SR		0,17	0,83	0	2,67	2,50	0,83	6,33
C6H2N6O10	KJ	3,00	0	1,00	0	1,50	0	4,50	8,50
	KW		0	1,00	0	1,50	3,00	3,00	10,00
	Mod-KW		0	1,00	0	1,50	3,00	3,00	10,00
	SR		0	1,00	0	0,50	2,00	3,50	9,50
C6H3N3	KJ	1,50	1,50	0	0	6,00	0	0	3,00
	KW		1,50	0	0	6,00	0	0	3,00
	Mod-KW		1,50	0	0	6,00	0	0	3,00
	SR		1,50	0	0	6,00	0	0	3,00
C6H3N3O6	KJ	1,50	0	1,50	0	3,75	0	2,25	5,25
	KW		1,50	1,50	0	0	6,00	0	9,00
	Mod-KW		0	1,50	0	1,50	4,50	0	7,50
	SR		0,50	1,00	0	2,00	3,00	1,00	7,00
C6H3N3O6	KJ	1,50	0	1,50	0	3,75	0	2,25	5,25
	KW		1,50	0	0	6,00	0	9,00	
	Mod-KW		0	1,50	0	1,50	4,50	0	7,50
	SR		0,50	1,00	0	2,00	3,00	1,00	7,00
C6H3N3O7	KJ	1,50	0	1,50	0	3,25	0	2,75	5,75
	KW		0,50	1,00	0	0	6,00	0	9,00
	Mod-KW		0	1,50	0	0,50	5,50	0	8,50
	SR		0	1,50	0,50	2,00	3,00	1,00	7,50
C6H3N3O8	KJ	1,50	0	1,50	0	2,75	0	3,25	6,25
	KW		0	1,50	0	0	5,50	0,50	9,00
	Mod-KW		0	1,50	0	0	5,50	0,50	9,00
	SR		0	1,50	0	0,92	3,67	1,42	8,08
C6H3N5O8	KJ	2,50	0	1,50	0	2,75	0	3,25	7,25
	KW		0	1,50	0	0	5,50	0,50	10,00
	Mod-KW		0	1,50	0	0	5,50	0,50	10,00
	SR		0	1,50	0	0,92	3,67	1,42	9,08
C6H4N2O4	KJ	1,00	0	2,00	0	5,00	0	1,00	4,00
	KW		2,00	0	0	2,00	4,00	0	7,00
	Mod-KW		0	2,00	0	4,00	4,00	0	5,00
	SR		1,33	0,67	0	3,33	2,00	0,67	5,67
C6H4N2O4	KJ	1,00	0	2,00	0	5,00	0	1,00	4,00
	KW		2,00	0	0	2,00	4,00	0	7,00
	Mod-KW		0	2,00	0	4,00	4,00	0	5,00
	SR		1,33	0,67	0	3,33	2,00	0,67	5,67



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C6H4N2O4	KJ	1,00	0	2,00	0	5,00	0	1,00	4,00
	KW		2,00	0	0	2,00	4,00	0	7,00
	Mod-KW		0	2,00	0	4,00	4,00	0	5,00
	SR		1,33	0,67	0	3,33	2,00	0,67	5,67
C6H4N2O5	KJ	1,00	0	2,00	0	4,50	0	1,50	4,50
	KW		2,00	0	0	1,00	5,00	0	8,00
	Mod-KW		0	2,00	0	3,00	3,00	0	6,00
	SR		1,17	0,83	0	2,67	2,50	0,83	6,33
C6H4N4O6	KJ	2,00	0	2,00	0	4,00	0	2,00	6,00
	KW		2,00	0	0	0	6,00	0	10,00
	Mod-KW		0	2,00	0	2,00	4,00	0	8,00
	SR		1,00	1,00	0	2,00	3,00	1,00	8,00
C6H5N5O6	KJ	2,50	0	2,50	0	4,25	0	1,75	6,75
	KW		2,50	0	0	0	6,00	0	11,00
	Mod-KW		0	2,50	0	2,50	3,50	0	8,50
	SR		1,50	1,00	0	2,00	3,00	1,00	9,00
C6H6N4O7	KJ	2,00	0	3,00	0	4,00	0	2,00	7,00
	KW		2,00	1,00	0	0	6,00	0	11,00
	Mod-KW		0	3,00	0	2,00	4,00	0	9,00
	SR		1,00	2,00	0	2,00	3,00	1,00	9,00
C6H7N2.25O9 .5	KJ	1,13	0	3,50	0	3,00	0	3,00	7,63
	KW		0	3,50	0	0	6,00	0	10,63
	Mod-KW		0	3,50	0	0	6,00	0	10,63
	SR		0	3,50	0	1,00	4,00	1,00	9,63
C6H7N2.5O10	KJ	1,25	0	3,50	0	2,75	0	3,25	8,00
	KW		0	3,50	0	0	5,50	0,50	10,75
	Mod-KW		0	3,50	0	0	5,50	0,50	10,75
	SR		0	3,50	0	0,92	3,67	1,42	9,83
C6H7N3O11	KJ	1,50	0	3,50	0	2,25	0	3,75	8,75
	KW		0	3,50	0	0	4,50	1,50	11,00
	Mod-KW		0	3,50	0	0	4,50	1,50	11,00
	SR		0	3,50	0	0,75	3,00	2,25	10,25
C6H8N2O6	KJ	1,00	0	4,00	0	5,00	0	1,00	6,00
	KW		4,00	0	0	0	6,00	0	11,00
	Mod-KW		0	4,00	0	4,00	2,00	0	7,00
	SR		3,00	1,00	0	2,00	3,00	1,00	9,00
C6H8N4O9	KJ	2,00	0	4,00	0	3,50	0	2,50	8,50
	KW		1,00	3,00	0	0	6,00	0	12,00
	Mod-KW		0	4,00	0	1,00	5,00	0	11,00
	SR		0	4,00	0	2,00	3,00	1,00	10,00
C6H8N6O18	KJ	3,00	0	4,00	1,00	0	0	6,00	14,00
	KW		0	4,00	1,00	0	0	6,00	14,00
	Mod-KW		0	4,00	1,00	0	0	6,00	14,00
	SR		0	4,00	1,00	0	0	6,00	14,00



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C6H9N3O11	KJ	1,50	0	4,50	0	2,75	0	3,25	9,25
	KW		0	4,50	0	0	5,50	0,50	12,00
	Mod-KW		0	4,50	0	0	5,50	0,50	12,00
	SR		0	4,50	0	0,92	3,67	1,42	11,08
C7H3N3O7	KJ	1,50	0	1,50	0	4,25	0	2,75	5,75
	KW		1,50	0	0	0	7,00	0	10,00
	Mod-KW		0	1,50	0	1,5	5,50	0	8,50
	SR		0,33	1,17	0	2,33	3,50	1,17	7,77
C7H5N3O6	KJ	1,50	0	2,50	0	5,25	0	1,75	5,75
	KW		2,50	0	0	1,00	6,00	0	10,00
	Mod-KW		0	2,50	0	3,50	3,50	0	7,50
	SR		1,50	1,00	0	3,00	3,00	1,00	8,00
C7H5N3O6	KJ	1,50	0	2,50	0	5,25	0	1,75	5,75
	KW		2,50	0	0	1,00	6,00	0	10,00
	Mod-KW		0	2,50	0	3,50	3,50	0	7,50
	SR		1,50	1,00	0	3,00	3,00	1,00	8,00
C7H5N3O7	KJ	1,50	0	2,50	0	4,75	0	2,25	6,25
	KW		2,50	0	0	7,00	0	11,00	
	Mod-KW		0	2,50	0	2,50	4,50	0	8,50
	SR		1,33	1,17	0	2,33	3,50	1,17	8,67
C7H5N3O7	KJ	1,50	0	2,50	0	4,75	0	2,25	6,25
	KW		2,50	0	0	7,00	0	11,00	
	Mod-KW		0	2,50	0	2,50	4,50	0	8,50
	SR		1,33	1,17	0	2,33	3,50	1,17	8,67
C7H5N5O8	KJ	2,50	0	2,50	0	4,25	0	2,75	7,75
	KW		1,50	1,00	0	0	7,00	0	12,00
	Mod-KW		0	2,50	0	1,50	5,50	0	10,50
	SR		0,33	2,17	0	2,33	3,50	1,17	9,67
C7H6N2O4	KJ	1,00	0	3,00	0	6,50	0	0,50	4,50
	KW		3,00	0	0	3,00	4,00	0	8,00
	Mod-KW		0	3,00	0	6,00	1,00	0	5,00
	SR		2,33	0,67	0	4,33	2,00	0,67	6,67
C7H12N2O6	KJ	1,00	0	6,00	0	7,00	0	0	7,00
	KW		6,00	0	0	1,00	6,00	0	13,00
	Mod-KW		0	6,00	0	7,00	0	0	7,00
	SR		5,00	1,00	0	3,00	3,00	1,00	11,00
C8H7N3O6	KJ	1,50	0	3,50	0	6,75	0	1,25	6,25
	KW		3,50	0	0	2,00	6,00	0	11,00
	Mod-KW		0	3,50	0	5,50	2,50	0	7,50
	SR		2,50	1,00	0	4,00	3,00	1,00	9,00
C10H4N4O8	KJ	2,00	0	2,00	0	7,00	0	3,00	7,00
	KW		2,00	0	0	2,00	8,00	0	12,00
	Mod-KW		0	2,00	0	4,00	6,00	0	10,00
	SR		0,67	1,33	0	4,67	4,00	1,33	9,33
C10H5N3O6	KJ	1,50	0	2,50	0	8,25	0	1,75	5,75
	KW		2,50	0	0	4,00	6,00	0	10,00
	Mod-KW		0	2,50	0	6,50	3,50	0	7,50
	SR		1,50	1,00	0	6,00	3,00	1,00	8,00



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C10H16N6O1 9	KJ	3,00	0	8,00	0	4,50	0	5,50	16,50
	KW		0	8,00	0	0	9,00	1,00	21,00
	Mod-KW		0	8,00	0	0	9,00	1,00	21,00
	SR		0	8,00	0	1,50	6,00	2,50	19,50
C12H4N6O12	KJ	3,00	0	2,00	0	7,00	0	5,00	10,00
	KW		2,00	0	0	0	12,00	0	17,00
	Mod-KW		0	2,00	0	2,00	10,00	0	15,00
	SR		0	2,00	0	4,00	6,00	2,00	13,00
C12H4N8O8	KJ	4,00	0	2,00	0	9,00	0	3,00	9,00
	KW		2,00	0	0	4,00	8,00	0	14,00
	Mod-KW		0	2,00	0	6,00	6,00	0	12,00
	SR		0,33	1,33	0	6,67	4,00	1,33	11,33
C12H4N8O8	KJ	4,00	0	2,00	0	9,00	0	3,00	9,00
	KW		2,00	0	0	4,00	8,00	0	14,00
	Mod-KW		0	2,00	0	6,00	6,00	0	12,00
	SR		0,33	1,33	0	6,67	4,00	1,33	11,33
C12H4N8O10	KJ	4,00	0	2,00	0	8,00	0	4,00	10,00
	KW		2,00	0	0	2,00	10,00	0	16,00
	Mod-KW		0	2,00	0	4,00	8,00	0	14,00
	SR		0,33	1,67	0	5,33	5,00	1,67	12,67
C12H4N8O12	KJ	4,00	0	2,00	0	8,00	0	4,00	10,00
	KW		2,00	0	0	0	12,00	0	18,00
	Mod-KW		0	2,00	0	2,00	10,00	0	16,00
	SR		0	2,00	0	4,00	6,00	2,00	14,00
C12H6N8O12	KJ	4,00	0	3,00	0	7,50	0	4,50	11,50
	KW		3,00	0	0	0	12,00	0	19,00
	Mod-KW		0	3,00	0	3,00	9,00	0	16,00
	SR		1,00	2,00	0	4,00	6,00	2,00	15,00
C13H5N5O11	KJ	2,50	0	2,50	0	8,75	0	4,25	9,25
	KW		0	2,50	0	4,50	8,50	0	13,50
	Mod-KW		0	2,50	0	4,50	8,50	0	13,50
	SR		0,67	1,83	0	5,67	5,50	1,83	12,33
C14H6N6O12	KJ	3,00	0	3,00	0	9,50	0	4,50	10,50
	KW		3,00	0	0	2,00	12,00	0	18,00
	Mod-KW		0	3,00	0	5,00	9,00	0	15,00
	SR		1,00	2,00	0	6,00	6,00	2,00	14,00
C17H5N13O1 6	KJ	6,50	0	2,50	0	10,25	0	6,75	15,75
	KW		2,50	0	0	1,00	16,00	0	25,00
	Mod-KW		0	2,50	0	3,50	13,50	0	22,50
	SR		0	2,50	0,17	6,33	8,00	2,67	19,83
C18H5N9O18	KJ	4,50	0	2,5	0	10,25	0	7,75	14,75
	KW		2,5	0	0	0	18,00	0	25,00
	Mod-KW		0	2,5	0	2,5	15,50	0	22,50
	SR		0	2,5	0,5	6,00	9,00	3,00	19,50



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
C18H6N8O16	KJ	4,00	0	3,00	0	11,50	0	6,50	13,50
	KW		3,00	0	0	2,00	16,00	0	23,00
	Mod-KW		0	3,00	0	5,00	13,00	0	20,00
	SR		0,33	2,67	0	7,33	8,00	2,67	17,67
C18H7N11O18	KJ	5,50	0	3,50	0	10,75	0	7,25	16,25
	KW		3,50	0	0	0	18,00	0	27,00
	Mod-KW		0	3,50	0	3,50	14,50	0	23,50
	SR		0,50	3,00	0	6,00	9,00	3,00	21,00
C21H9N15O18	KJ	7,50	0	4,50	0	14,25	0	6,75	18,75
	KW		4,50	0	0	3,00	18,00	0	30,00
	Mod-KW		0	4,50	0	7,50	13,50	0	25,50
	SR		1,50	3,00	0	9,00	9,00	3,00	24,00
C22H9N15O20	KJ	7,50	0	4,50	0	14,25	0	7,75	19,75
	KW		4,50	0	0	2,00	20,00	0	32,00
	Mod-KW		0	4,50	0	6,50	15,50	0	27,50
	SR		1,17	3,33	0	8,67	10,00	3,33	25,33
C23H9N15O22	KJ	7,50	0	4,50	0	14,25	0	8,75	20,75
	KW		4,50	0	0	1,00	22,00	0	34,00
	Mod-KW		0	4,50	0	5,50	17,50	0	29,50
	SR		0,83	3,67	0	8,33	11,00	3,67	26,67
C24H6N12O24	KJ	6,00	0	3,00	0	13,50	0	10,50	19,50
	KW		3,00	0	0	0	24,00	0	33,00
	Mod-KW		0	3,00	0	3,00	21,00	0	30,00
	SR		0	3,00	1,00	8,00	12,00	4,00	26,00
C24H6N14O24	KJ	7,00	0	3,00	0	13,50	0	10,50	20,50
	KW		3,00	0	0	0	24,00	0	34,00
	Mod-KW		0	3,00	0	3,00	21,00	0	31,00
	SR		0	3,00	1,00	8,00	12,00	4,00	27,00
C24H6N16O24	KJ	8,00	0	3,00	0	13,50	0	10,50	21,50
	KW		3,00	0	0	0	24,00	0	35,00
	Mod-KW		0	3,00	0	3,00	21,00	0	32,00
	SR		0	3,00	1,00	8,00	12,00	4,00	28,00
C24H9N9O18	KJ	4,50	0	4,50	0	17,25	0	6,75	15,75
	KW		4,50	0	0	6,00	18,00	0	27,00
	Mod-KW		0	4,50	0	10,50	13,50	0	22,50
	SR		1,50	3,00	0	12,00	9,00	3,00	21,00
C6H6N6O6	KJ	3,00	0	3,00	0	4,50	0	1,50	7,50
	KW		3,00	0	0	0	6,00	0	12,00
	Mod-KW		0	3,00	0	3,00	3,00	0	9,00
	SR		2,00	1,00	0	2,00	3,00	1,00	10,00
AMATOL	KJ	1,04	0	2,04	0,03	0	0	0,57	3,68
	KW		0	2,04	0,03	0	0	0,57	3,68
	Mod-KW		0	2,04	0,03	0	0	0,57	3,68
	SR		0	2,04	0,03	0	0	0,57	3,68
ANFO	KJ	0,97	0	2,32	0	0,05	0	0,30	3,59
	KW		0	2,32	0	0	0,11	0,24	3,64
	Mod-KW		0	2,32	0	0	0,11	0,24	3,64
	SR		0	2,32	0	0,02	0,07	0,26	3,62



Elemento	Regla	N2	H2	H2O	O2	C(s)	CO	CO2	moles gaseosos
COMP. A3	KJ	2,82	0	4,34	0	3,63	0	0,65	7,81
	KW		2,99	1,35	0	0	4,28	0	11,44
	Mod-KW		0	4,34	0	2,99	1,29	0	8,45
	SR		2,28	2,07	0	1,43	2,14	0,71	10,01
COMP. B3	KJ	2,47	0	2,82	0	2,83	0	1,59	6,88
	KW		1,24	1,58	0	0	4,42	0	9,71
	Mod-KW		0	2,82	0	1,24	3,18	0	8,47
	SR		0,51	2,32	0	1,47	2,21	0,74	8,24
CYCLOTOL	KJ	2,66	0	2,89	0	2,35	0	1,56	7,10
	KW		0,79	2,10	0	0	3,90	0	9,45
	Mod-KW		0	2,89	0	0,79	3,11	0	8,66
	SR		0,14	2,75	0	1,30	1,95	0,65	8,15
LX-14	KJ	1,29	0	1,46	0	0,92	0	0,60	3,35
	KW		0,32	1,14	0	0	1,52	0	4,27
	Mod-KW		0	1,46	0	0,32	1,20	0	3,95
	SR		0,07	1,39	0	0,51	0,76	0,25	3,77
OCTOL	KJ	3,28	0	3,57	0	2,94	0	1,93	8,78
	KW		1,01	2,56	0	0	4,87	0	11,71
	Mod-KW		0	3,57	0	1,01	3,86	0	10,70
	SR		0,20	3,37	0	1,62	2,43	0,81	10,09
PBX-9011	KJ	0,68	0	0,88	0	0,67	0	0,28	1,84
	KW		0,39	0,49	0	0	0,95	0	2,51
	Mod-KW		0	0,88	0	0,39	0,56	0	2,12
	SR		0,23	0,65	0	0,32	0,48	0,16	2,19
PBXC-116	KJ	1,17	0	1,87	0	1,67	0	0,29	3,33
	KW		1,37	0,49	0	0	1,96	0	5,00
	Mod-KW		0	1,87	0	1,37	0,59	0	3,63
	SR		1,05	0,81	0	0,65	0,98	0,33	4,35
PENTOLITE	KJ	1,71	0	3,13	0	3,47	0	2,69	7,53
	KW		0,78	2,34	0	0	6,16	0	11,00
	Mod-KW		0	3,13	0	0,78	5,38	0	10,22
	SR		0	3,13	0	2,05	3,08	1,03	9,19
CL-20	KJ	6,00	0	3,00	0	1,50	0	4,50	13,50
	KW		0	3,00	0	0	3,00	3,00	15,00
	Mod-KW		0	3,00	0	0	3,00	3,00	15,00
	SR		0	3,00	0	0,50	2,00	3,50	14,50
FOX-7	KJ	2,00	0	2,00	0	1,00	0	1,00	5,00
	KW		0	2,00	0	0	2,00	0	6,00
	Mod-KW		0	2,00	0	0	2,00	0	6,00
	SR		0	2,00	0	0,33	1,33	0,33	5,67
NO	KJ	0,50	0	0	0,50	0	0	0	1,00
	KW		0	0	0,50	0	0	0	1,00
	Mod-KW		0	0	0,50	0	0	0	1,00
	SR		0	0	0,50	0	0	0	1,00