



FCTUC FACULDADE DE CIÊNCIAS  
E TECNOLOGIA  
UNIVERSIDADE DE COIMBRA

DEPARTAMENTO DE  
ENGENHARIA MECÂNICA

## **Simulação Numérica da Detonação de Explosivos Não Ideais**

Dissertação apresentada para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica na Especialidade de Energia e Ambiente e Sistemas de Produção

**Autor**

**Eduardo Rodrigues Cardoso**

**Orientador**

**Professor Doutor José Manuel Baranda Moreira da Silva  
Ribeiro**

**Júri**

**Presidente** Professor Doutor Pedro de Figueiredo Vieira Carvalheira  
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra  
Professor Doutor José Manuel Baranda Moreira da Silva  
Ribeiro

**Vogais** Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra  
Professor Doutor Ricardo António Lopes Mendes  
Professor Auxiliar da Universidade de Coimbra

**Coimbra, Julho, 2011**

“Não basta ensinar ao homem uma especialidade, porque se tornará assim uma máquina utilizável e não uma personalidade. É necessário que adquira um sentimento, um senso prático daquilo que vale a pena ser empreendido, daquilo que é belo, do que é moralmente correcto.”

Albert Einstein

Aos meus pais e à Catarina.

## **Agradecimentos**

Gostaria de começar por agradecer ao orientador desta tese, o Professor Doutor José Baranda Ribeiro, pela ajuda e pela disponibilidade que demonstrou sempre ao longo do trabalho, por isso deixo aqui o meu mais sincero obrigado.

Gostaria também de deixar aqui a minha palavra de agradecimento à minha família pelo apoio e pelo suporte que me deram ao longo do curso, a todos um muito obrigado.

## Resumo

O objectivo deste trabalho é o desenvolvimento da capacidade de simulação numérica de processos de detonação. Este objectivo visa munir a ADAI-DEM de uma ferramenta que contribua para ajudar no projecto/desenho de montagens experimentais e na interpretação dos resultados entretanto obtidos. Concretamente pretendeu-se desenvolver a capacidade de simulação de processos de detonação envolvendo explosivos não ideais e procurou-se replicar numericamente um conjunto de experiências que podem ser designadas genericamente por “shear experiments” de modo a tentar encontrar justificações para os resultados obtidos. Todo este desenvolvimento referido anteriormente foi realizado com o “software package” desenvolvido para computadores pessoais pela empresa Hydrosoft Internacional do código de cálculo LS-DYNA2D.

A simulação do processo de detonação de explosivos não ideais foi realizada com recurso ao modelo material “Explosive Burn” e um conjunto com a equação de estado JWL. O trabalho de calibração passou por identificar quais os valores de velocidade de detonação e pressão de detonação permitiam, conhecida a JWL, descrever um dado resultado experimental considerado para comparação (benchmark). Atingiu-se resultados bastante plausíveis usando o modelo “Explosive Burn”, deste modo, pode-se concluir que é possível a calibração dos parâmetros, pressão e velocidade de detonação, com este modelo mais simplista.

Para a “shear experiments” foram desenvolvidos três modelos de detonação, com diferentes geometrias e tipos de materiais. Conclui-se que, como nos resultados experimentais, obtêm-se uma onda de detonação/choque divergente não esférica, a pressão ocorre em todos os casos em primeiro nas zonas periféricas, devendo-se à onda de propagação do material envolvente ao explosivo.

**Palavras-chave:** Detonação, Explosivos, Explosive Burn, Lee-Tarver Model, Corner Turning Test (Shear Experiments), Simulação Numérica.

## Abstract

The purpose of this work is to develop the capacity of numerical simulation of detonation processes. This objective seeks to equip the ADAI-DEM, with a tool that contributes to help the project/design of experimental assemblies and on interpretation of experimental results obtained in the meantime. Specifically, intended to develop the ability to simulate detonation processes involving non-ideal explosives and tried to replicate a set of numerical experiments which may be described generically as "*shear experiments*" in order to find explanations for the obtained results. All this development, previously explained, was done with the "*software package*" developed for personal computers by the company *Hydrosoft International* from the calculation code LS-DYNA2D.

The process simulation of non-ideal explosives detonation was carried out using the material model "*Explosive Burn*" in conjunction with the *JWL* equation of state. The calibration work was to identify which values of detonation velocity and detonation pressure which allow describing a given experimental result considered for comparison (*benchmark*), with a known *JWL*. Were reached quite plausible results using the "*Explosive Burn*" model, so, it can be concluded that it is possible to calibrate the parameters, pressure and velocity of detonation, with this simplistic model.

For the "*shear experiments*" were developed three detonation models with different geometries and types of materials. It is concluded that, as in the experimental results, we obtain a detonation wave/shock divergent non-spherical, the pressure occurs in all cases firstly in the peripheral areas, being due to the propagation wave of the material surrounding the explosive.

**Keywords** Detonation, Explosives, Explosive Burn, Lee-Tarver Model, Corner Turning Test (Shear Experiments), Numerical Simulation.

## ÍNDICE

Índice de Figuras .....	v
Índice de Tabelas .....	vi
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Motivação, enquadramento e objectivos.....	1
1.2. Guia de leitura.....	2
2. CÓDIGO USADO .....	3
2.1. MAZE .....	4
2.1.1. Primeira Parte – MAZE.....	4
2.1.2. Segunda Parte – MAZE.....	6
2.1.3. Terceira Parte – MAZE .....	6
2.2. DYNA .....	7
2.3. ORION.....	7
3. SIMULAÇÃO NUMÉRICA UTILIZANDO O MODELO “EXPLOSIVE BURN” ...	8
3.1. Descrição do Modelo Explosive Burn .....	8
4. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE DETONAÇÃO DE UMA EMULSÃO EXPLOSIVA UTILIZANDO O MODELO – EXPLOSIVE BURN .....	13
4.1. Simulação Numérica com Aumento de $P_{CJ}$ e Análise de Resultados.....	14
4.2. Simulação Numérica com Aumento de $D_{CJ}$ e Análise de Resultados .....	15
4.3. Comparação de Resultados – Experimentais com um $\Delta T$ de 0.02 e Numéricos..	16
4.4. Resultados experimentais com um $\Delta T$ de 0.01 .....	17
5. CORNER TURNING TEST .....	19
5.1. Modelo 1 .....	19
5.1.1. Resultados Obtidos .....	20
5.2. Modelo 2 .....	23
5.2.1. Resultados Obtidos .....	24
5.3. Modelo 3 .....	26
5.3.1. Resultados Obtidos .....	26
6. CONCLUSÕES .....	29
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	31
8. ANEXO A – EXPLOSIVE BURN .....	32
9. ANEXO B – CORNER TURNING TEST .....	36

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Fluxograma da simulação. ....	3
Figura 2. Exemplo de malha, coincidência de elementos entre partes superior/inferior e partes laterais. ....	5
Figura 3. Exemplo Cilíndrico da representação esquemática axissimétrica do modelo 2D introduzido no pré-processador MAZE. Linhas; Pontos; Coordenadas;.....	6
Figura 4. Representação esquemática do modelo 3D.....	9
Figura 5. Visualização dos pontos medidos no modelo de detonação utilizado. (a) Tubo de 10 cm; (b) tubo de 22 cm.....	10
Figura 6. Medição de pressão dos quatro pontos, no tubo com 10 cm de comprimento.....	10
Figura 7. Medição de pressão dos quatro pontos, no tubo com 22 cm de comprimento.....	11
Figura 8. Simulação Numérica com dados experimentais. ....	13
Figura 9. Simulação Numérica com aumento de $P_{CJ}$ e $D_{CJ}$ constante. ....	14
Figura 10. Simulação Numérica com aumento de $D_{CJ}$ e $P_{CJ}$ constante. ....	15
Figura 11. Simulação Numérica com $D_{CJ} = 0.536 \text{ cm}/\mu\text{s}$ .....	15
Figura 12. (a) Modelo Lee-Tarver Model; (b) Modelo Explosive Burn. ....	16
Figura 13. (a) Modelo Lee-Tarver; (b) Modelo Explosive Burn.....	17
Figura 14. (a) Modelo introduzido no pré-processador MAZE axissimétrico, LX-10, PMMA; (b) Modelo com visualização de malha retirado do processador Orion, vista 2D.	20
Figura 15. Representação das linhas de pressão.....	20
Figura 16. Detonação e respectivos resultados com iteração de 50 estados, resultados desde o estado 250 a 400. ....	22
Figura 17. (a) Modelo introduzido no pré-processador MAZE axissimétrico, LX-10, PMMA; (b) Modelo com visualização de malha retirado do processador Orion, vista 2D.	23
Figura 18. Detonação e respectivos resultados com iteração de 25 estados, resultados desde o estado 195 a 270. ....	25
Figura 19. (a) Modelo introduzido no pré-processador MAZE axissimétrico, LX-10, PMMA, RF-04; (b) Modelo com visualização de malha retirado do processador Orion, vista 2D.....	26
Figura 20. Detonação e respectivos resultados com iteração de 50 estados, resultados desde o estado 195 a 270. ....	28

---

## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1. Unidades utilizadas na tese. ....	3
Tabela 2. Medidas utilizadas para o modelo Explosive Burn. ....	5
Tabela 3. Valores usados no ensaio experimental. ....	12
Tabela 4. Valores encontrados para a melhor solução utilizando o modelo Explosive Burn. .....	16
Tabela 5. Valores encontrados para a melhor solução utilizando o modelo Explosive Burn tendo como referência os segundos resultados experimentais apresentados. ....	18
Tabela 6. Tempo de detonação com referência ao estado utilizado. ....	21
Tabela 7. Tempo de detonação com referência ao estado utilizado. ....	24
Tabela 8. Tempo de detonação com referência ao estado utilizado. ....	27

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1. Motivação, enquadramento e objectivos

Uma das razões por de trás da realização desta tese surge da necessidade da calibração dos modelos materiais e equações de estado usadas na simulação numérica de explosivos não ideais. Explosivos não ideais podem ser considerados aqueles cuja velocidade de detonação apresenta uma grande dependência face ao diâmetro da carga (Peter et al., 2009). Estes explosivos são utilizados quase exclusivamente em ambiente industrial em operações de desmonte/demolição em pedreiras ou obras de construção civil.

Para além desta utilização industrial os explosivos civis, nomeadamente as emulsões explosivas podem ser usadas em processos de compactação de pós ou soldadura de metais dissemelhantes. Nestes últimos casos, tipicamente, multiparamétricos, a simulação numérica tem uma grande importância para a optimização do setup, para que aquando de ensaios experimentais haja algum conhecimento sobre o comportamento da montagem experimental. A simulação numérica nesta área é muito importante visto que os ensaios experimentais são muito dispendiosos e morosos.

Nas simulações numéricas é preciso um alto rigor na construção do modelo, para que os resultados obtidos sejam o mais realistas possível mas, mesmo assim, é necessário possuir espírito crítico para a avaliação dos resultados, pois por vezes podem obter-se valores sem significado físico devido a erros cometidos na construção do modelo. A simulação numérica é uma ferramenta muito útil mas é necessário um cuidado acrescido na interpretação dos seus resultados.

Um dos aspectos referidos anteriormente prende-se com os parâmetros usados no modelo material e na equação de estado do explosivo. Trabalhos anteriores foram realizados para calibração do modelo conhecido por Lee-Tarver model e publicados em (Ribeiro et al., 2010). Prosseguindo um objectivo de simplificação, o modelo Lee-Tarver usa duas equações de estado e tem 25 parâmetros de “calibração”, neste trabalho procurou-se modelar o comportamento em detonação da emulsão explosiva usada por (Ribeiro et al., 2010), usando o modelo Explosive Burn, que em conjunto com a equação de estado JWL

associada necessita apenas de sete parâmetros de calibração. Os resultados obtidos com o outro modelo foram comparados entre si e com os resultados experimentais.

Nesta tese também foi replicado numericamente um conjunto de testes experimentais realizados com o intuito de verificar o papel das tensões de corte no processo de iniciação de explosivos ideais. Os resultados obtidos coincidem com os experimentais tendo-se obtido uma onda de detonação/choque divergente não esférica. A explicação para esse efeito será apresentada mais tarde aquando da altura da apresentação e análise dos resultados.

De salientar que um trabalho de simulação numérica acarreta sempre algumas limitações. Apesar de se conseguirem controlar, mais facilmente, variáveis e fazer o estudo de cada parâmetro de forma quase independente, existem sempre.

Contudo, o mundo dos explosivos é grandioso e complexo e apesar de ter havido um grande desenvolvimento nesta área ainda há um longo caminho a percorrer.

## **1.2. Guia de leitura**

No capítulo 2 será abordado o código usado nesta tese, será explicado o seu funcionamento/potência, para o estudo em causa, detonações de explosivos e construção de modelos geométricos.

No capítulo 3 apresenta-se em detalhadamente a descrição do modelo “Explosive Burn” e a calibração do comprimento da carga explosiva a utilizar no modelo.

No capítulo 4, definido o modelo a utilizar, ir-se-á simular numericamente o modelo em estudo e concluir os resultados obtidos.

No seguinte capítulo, irá ser construído três modelos de detonação para a verificação da ocorrência da onda de detonação/choque divergente não esférica.

Por fim, no capítulo 6 serão retiradas as conclusões referentes ao estudo efectuado ao longo da tese.

## 2. CÓDIGO USADO

Esta tese iniciou-se com a familiarização do funcionamento e das potencialidades do package de programas utilizado, a versão Hydrosoft Internacional do DYNA2D.

Este conjunto inclui para além do processador propriamente dito, o HI-DYNA2D, um módulo de pré-processamento, a versão do HI-MAZE, para a definição do problema. Este pré-processador gera um ficheiro que contém toda a informação que define o problema num formato que pode ser lido pelo HI-DYNA2D. Com todas as informações geradas pelo HI-DYNA2D, é necessário correr com a versão HI pós-processador, o HI-ORION, que irá permitir a análise dos resultados.

O fluxograma detalhado da simulação é apresentado na seguinte Figura 1.

As unidades utilizadas e apresentadas ao longo da tese terão a seguinte grandeza, Tabela 1.

**Tabela 1.** Unidades utilizadas na tese.

Símbolo	Significado	Unidade
T	Tempo	$\mu\text{s}$
d	Distância	cm
P	Pressão	Mbar
$P_{CJ}$	Pressão Chapman-Jouget	Mbar
$D_{CJ}$	Velocidade de detonação Chapman-Jouget	cm/ $\mu\text{s}$
$\rho$	Densidade	g/cm <sup>3</sup>



**Figura 1.** Fluxograma da simulação.

## 2.1. MAZE

No pré-processador é onde acontece a construção do modelo geométrico, por esse motivo, é uma parte importante do programa pois basta um pequeno erro, para que os resultados não tenham qualquer nexos, por isso mesmo é sempre necessário algumas revisões do ficheiro antes de este ser corrido.

A informação a inserir neste pré-processador pode ser considerada dividida em três partes: a primeira refere-se aos parâmetros geométricos, a segunda à definição das zonas, malhagem, linhas de contacto e definição das condições fronteira, por fim, a última parte, diz respeito à definição dos materiais utilizados nas diferentes zonas.

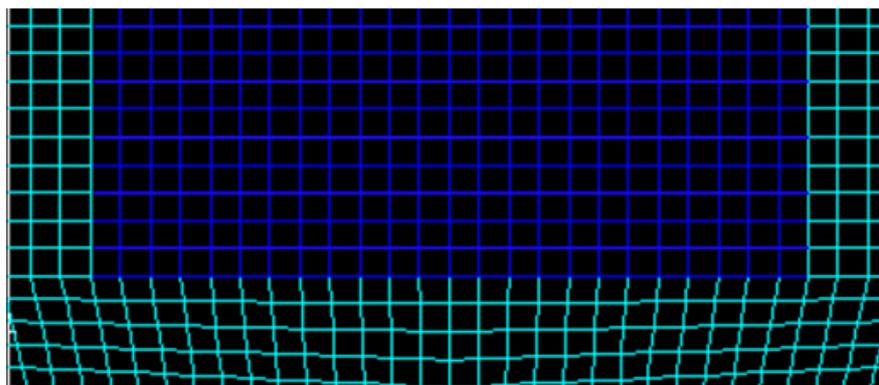
### 2.1.1. Primeira Parte – MAZE

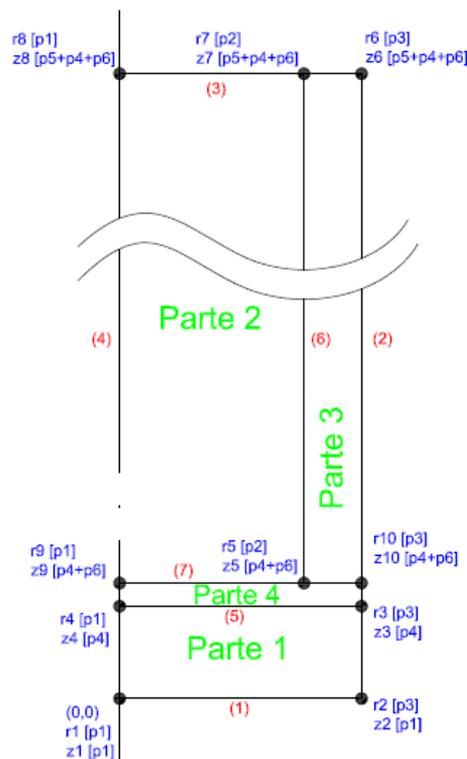
Nesta parte é onde acontece a definição de todos os parâmetros geométricos. Inicialmente é necessário definir os parâmetros dimensionais, ou seja, todos os limites do modelo utilizado. Como exemplo apresenta-se a Tabela 2. Definidos estes parâmetros, prossegue-se com a definição de todos os pontos existentes no modelo, considera-se um ponto, o início ou fim de uma linha que será também necessária definir. Já definidas as linhas, que são construídas com a utilização dos pontos, segue-se para a definição de partes ou zonas, que são definidas pela junção de linhas, sejam estas curvas ou rectas. Na definição de partes é necessário definir também o número de elementos existentes em cada uma das direcções características das zonas. De salientar que ajuda à robustez do cálculo o facto de os elementos de uma parte coincidam com os das partes adjacentes, como, por exemplo está representado na Figura 2.

Para uma melhor percepção do que foi descrito, pode ser consultado a Figura 3.

**Tabela 2.** Medidas utilizadas para o modelo Explosive Burn.

Parâmetro	Designação	Medidas
p1	Ponto (0,0)	0
p2	Raio interior do tubo	1.6
p3	Raio exterior do tubo	2.1
p4	Espessura de PMMA (placa inferior)	0.8
p5	Comprimento da carga explosiva	10
p6	Espessura de PMMA (placa superior)	0.2

**Figura 2.** Exemplo de malha, coincidência de elementos entre partes superior/inferior e partes laterais.



**Figura 3.** Exemplo Cilíndrico da representação esquemática axissimétrica do modelo 2D introduzido no pré-processador MAZE. Linhas; Pontos; Coordenadas;

### 2.1.2. Segunda Parte – MAZE

Nesta parte é onde é realizada a definição das linhas de contacto e das condições fronteira. Irá ser necessário, por exemplo, definir onde se inicia a detonação do modelo. Será necessário também definir as condições de fronteira do modelo, ou seja o modo como as diversas partes interagem umas com as outras. Por último será preciso escolher o intervalo entre os instantes de detonação a iterar.

### 2.1.3. Terceira Parte – MAZE

Nesta parte é feita a escolha dos materiais usados no modelo de detonação. Existe já uma base de dados, com vários materiais disponíveis, no programa em causa, se for esse o caso basta consultar (Hallquist, 1983) e referir o tipo de designação que lhe é concedida. Caso o material não seja conhecido, como será no caso dos explosivos não ideais é necessário a introdução de todos os parâmetros do modelo e equação de estado seleccionados.

## **2.2. DYNA**

Com a informação devidamente formatada pelo MAZE o DYNA2D vai realizar os cálculos do fenómeno físico simulado, gerando um conjunto de ficheiros que contem informação da distribuição espacial de diversas grandezas para um determinado instante e informação da variação temporal de diversas grandezas para localizações determinadas.

## **2.3. ORION**

No pós-processador ORION permite a visualização gráfica, ou a exportação dos dados da distribuição espacial ou temporal de uma ou mais variáveis do processo. É possível também “visualizar” o decorrer da detonação, podendo desta forma verificar se a detonação ocorre como o esperado, para uma melhor compressão (Hallquist, 1985).

### 3. SIMULAÇÃO NUMÉRICA UTILIZANDO O MODELO “EXPLOSIVE BURN”

#### 3.1. Descrição do Modelo Explosive Burn

Este modelo utiliza uma única equação de estado do tipo JWL para os produtos da detonação e necessita ainda que seja definida a densidade, a velocidade de detonação ideal ( $D_{CJ}$ ) e a pressão de detonação associada a essa onda ( $P_{CJ}$ ).

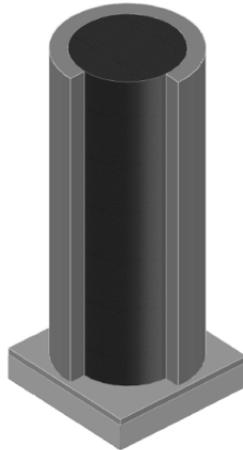
Os parâmetros da JWL dos produtos de detonação foram obtidos, conforme descrito por (Ribeiro et al., 2010), por “fitting” da JWL aos resultados Pressão-Volume obtidos a partir do cálculo da isentrópica de expansão com recurso ao código de cálculo termoquímico THOR.

A equação de estado (1), que associada a este modelo é dada por:

$$P = A \cdot e^{-R_1 \cdot V} + B \cdot e^{-R_2 \cdot V} + w \cdot c_v \cdot T / V. \quad (1)$$

Sendo  $P$  a pressão,  $V$  o volume relativo,  $T$  a temperatura,  $w$  o coeficiente de Gruneisen,  $C_v$  a capacidade térmica média,  $A$ ,  $B$ ,  $R_1$  e  $R_2$  são constantes. (tudo isto se refere aos produtos da detonação)

O modelo geométrico utilizado para a simulação numérica foi o descrito em (Ribeiro et al, 2010) e corresponde a uma carga cilíndrica de emulsão explosiva, com 10 cm de comprimento e confinada num tubo de PMMA (Brian et al, 2008) com 5 mm de espessura. No topo final dessa carga existem duas placas de PMMA, com dois e oito milímetros de espessura. Este modelo tenta replicar uma situação experimental usada como referência onde, entre as placas de PMMA, foi colocada uma sonda de manganina (piezoresistiva – cujo valor da resistência varia com a pressão) para monitorizar temporalmente a pressão induzida pela onda de detonação. A representação esquemática deste modelo pode ser vista na Figura 4.



**Figura 4.** Representação esquemática do modelo 3D.

As medidas deste modelo são apresentadas na Tabela 2.

A única alteração no modelo geométrico face ao setup experimental (com um comprimento total de 22 cm) foi no comprimento da carga explosiva, pois conclui-se através de simulações efectuadas que não seria necessário um comprimento tão longo.

Para a verificação desse facto realizaram-se simulações com cargas com 10 cm e 22 cm de comprimento total e compararam-se os perfis de pressão para elementos colocados, nos dois modelos, a distâncias idênticas do terminal da carga com as placas de PMMA.

Foram analisados quatro perfis de pressão ao longo do tubo obtidos para elementos, da zona correspondendo à emulsão explosiva, distanciados entre si de 1 centímetro; excepção feita para o último perfil que foi obtido para um elemento situado a 2 mm da superfície superior do PMMA (vd. Figura 5).

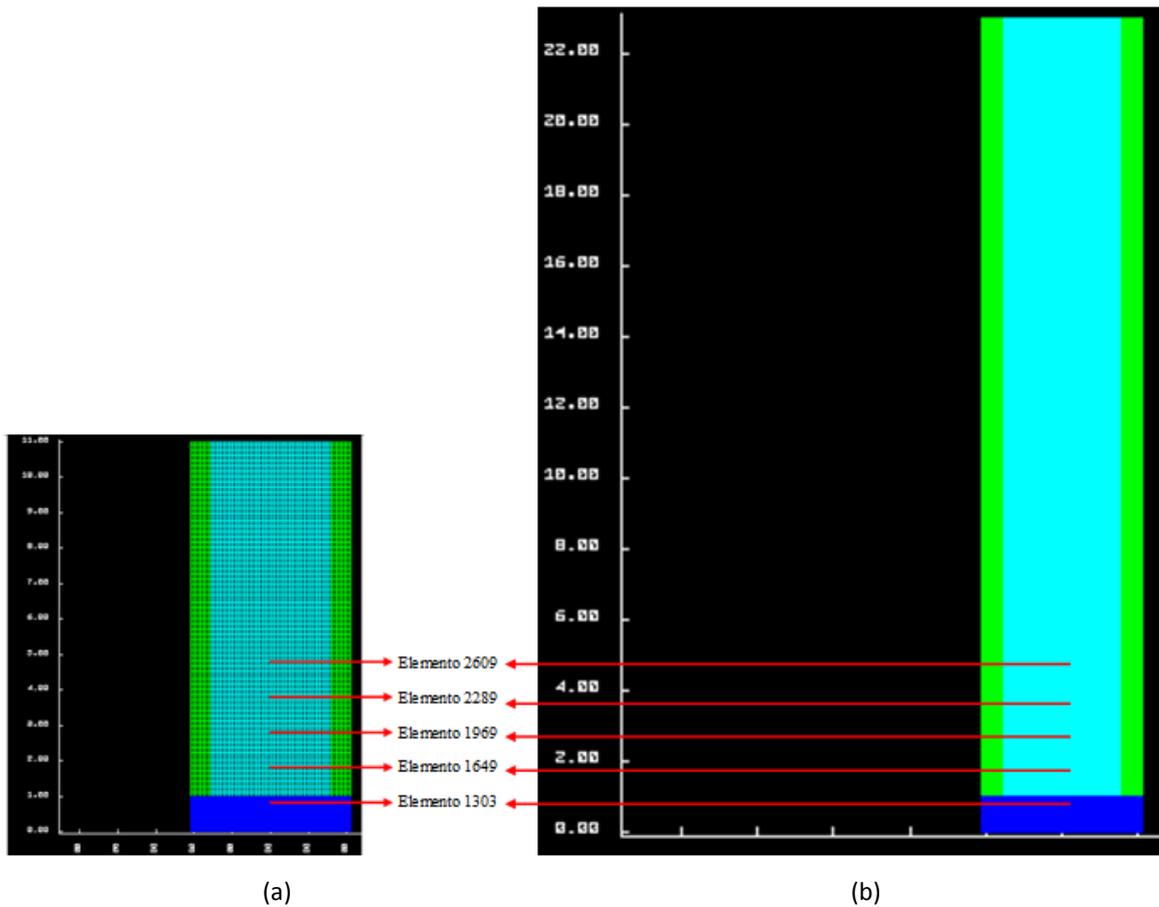


Figura 5. Visualização dos pontos medidos no modelo de detonação utilizado. (a) Tubo de 10 cm; (b) tubo de 22 cm.

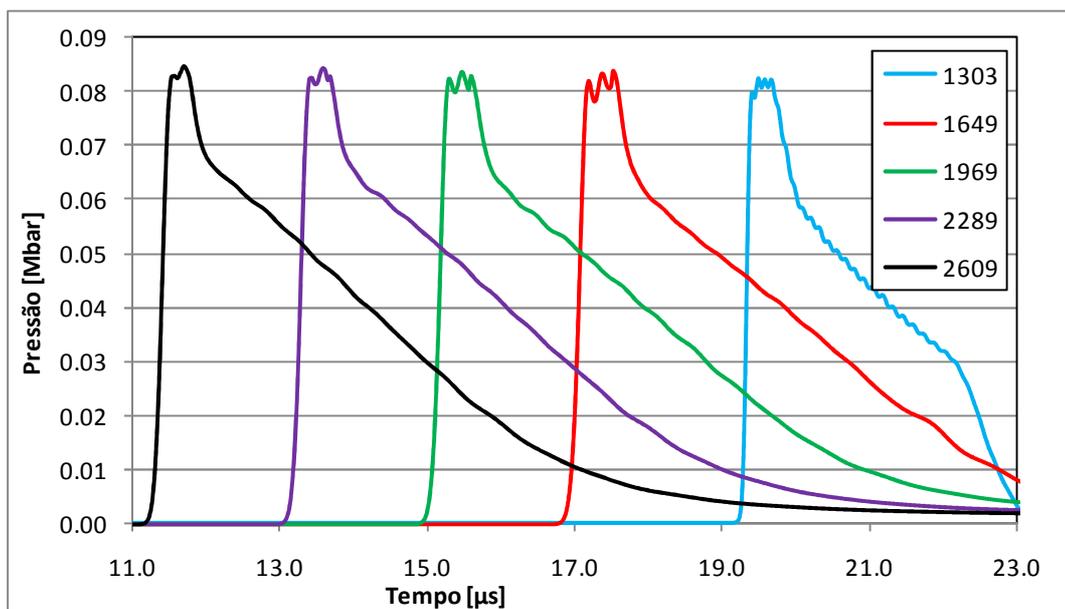


Figura 6. Medição de pressão dos quatro pontos, no tubo com 10 cm de comprimento.

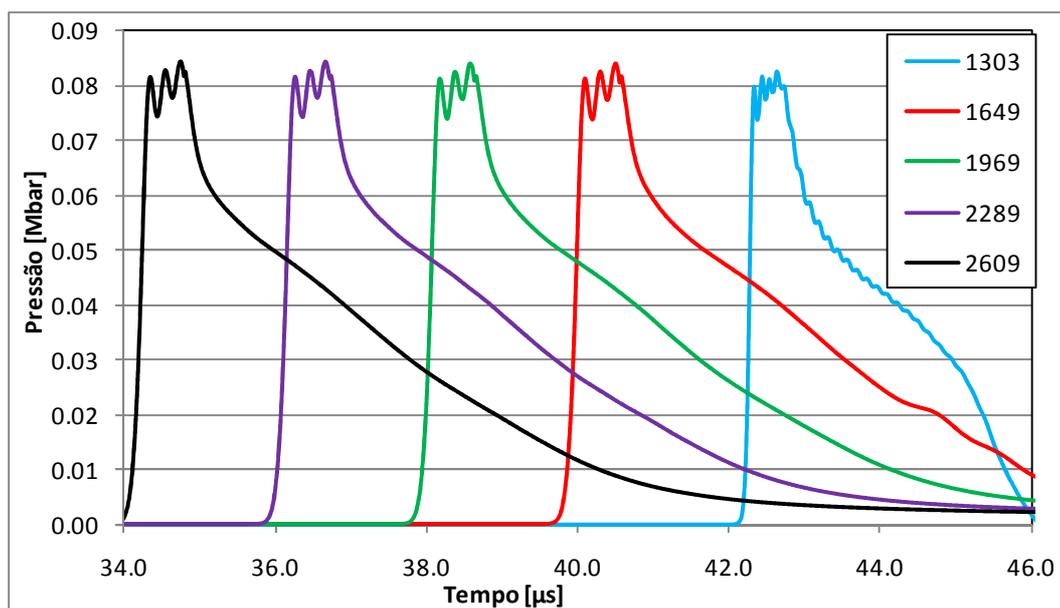


Figura 7. Medição de pressão dos quatro pontos, no tubo com 22 cm de comprimento.

Através da Figura 6 e Figura 7 conclui-se que a pressão tem o mesmo comportamento e um máximo em cerca de 0.083 Mbar, para pressões medidas em sítios comuns, seja com um tubo de 22 ou 10 cm. Portanto, para as seguintes simulações irá ser utilizado um tubo de 10 cm, visto que serão simulações mais rápidas e com resultados idênticos aos utilizados se fosse com um tubo de 22 cm de comprimento de carga explosiva.

Apesar de não ser uma diferença muito significativa nota-se um ligeiro decréscimo de pressão dos elementos que se encontram no explosivo para o ponto no PMMA, como seria de esperar, pois a densidade do PMMA é superior à densidade da emulsão explosiva, Figura 6 e Figura 7.

Os dados, nomeadamente os parâmetros da JWL dos produtos de detonação, utilizados para as simulações efectuadas com os dois comprimentos de tubo foram os publicados no artigo de referência (Ribeiro et al., 2010), os valores publicados apresentam-se na Tabela 3, estes foram os valores usados experimentalmente. Valores estes comparados em (Tarver et al., 1996) para melhor percepção dos resultados obtidos.

**Tabela 3.** Valores usados no ensaio experimental.

<b>Parâmetros</b>	<b>Valores</b>
$P_{CJ}$ [Mbar]	0.08
$D_{CJ}$ [cm/ $\mu$ s]	0.52
$\rho$ [g/cm <sup>3</sup> ]	1.05
A [Mbar]	75.39
B [Mbar]	0.4718
R1	11.95
R2	2.877
w	0.2
$E_0$ [Mbar]	0.0555
$v_0$ [m <sup>3</sup> /Kg]	1

Para a utilização do modelo Explosive Burn para além da equação de estado é também necessário a introdução de mais três variáveis. Em que duas delas são a Pressão Chapman-Jouget ( $P_{CJ}$  [Mbar]) e a Velocidade de Detonação Chapman-Jouget ( $D_{CJ}$  [cm/ $\mu$ s]) que serão necessárias calibrar. A terceira variável, a densidade ( $\rho$  [g/cm<sup>3</sup>]) da emulsão explosiva foi medida experimentalmente e publicada no artigo disponível na bibliografia (Ribeiro et al., 2010). Estas são as condições para a correcta utilização do modelo Explosive Burn.

#### 4. SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE DETONAÇÃO DE UMA EMULSÃO EXPLOSIVA UTILIZANDO O MODELO – EXPLOSIVE BURN

Como já referido anteriormente, na simulação numérica irá ser feita a calibração dos dois parâmetros não conhecidos a  $P_{CJ}$  e a  $D_{CJ}$ . Note-se que os valores de velocidade de detonação e pressão que são introduzidos são considerados para cargas de diâmetro infinito. O facto de estarmos a simular cargas com diâmetros finitos faz com que os valores simulados sejam inferiores aos dados de entrada e há que “calibrar” a velocidade de detonação e a pressão para a situação específica que estamos a analisar. Visto que não são conhecidos os efeitos de cada um dos parâmetros nos resultados finais, utilizaram-se para uma primeira abordagem os valores determinados experimentalmente Tabela 3. Os resultados desta simulação encontram-se disponíveis na Figura 8. Através desta figura, conclui-se que nas seguintes simulações será necessário aumentar o valor da  $P_{CJ}$ , visto que, a pressão máxima encontra-se abaixo dos 0.102 Mbar, valor este obtido experimentalmente.

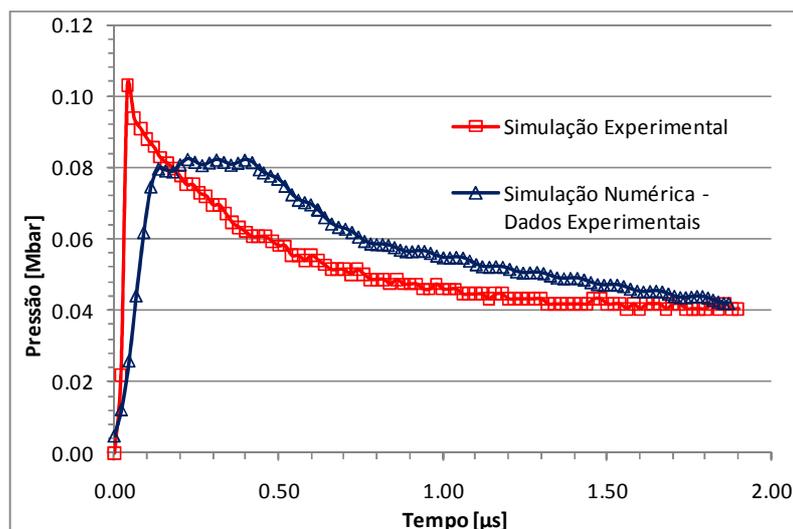


Figura 8. Simulação Numérica com dados experimentais.

#### 4.1. Simulação Numérica com Aumento de $P_{CJ}$ e Análise de Resultados

Nas seguintes simulações, ir-se-á manter constante a  $D_{CJ}$  e aumentar a  $P_{CJ}$  em 0.01 Mbar entre cada simulação.

Como se poderá verificar pela Figura 9, os resultados obtidos nas três simulações mostram um aumento de  $P_{CJ}$ , ficando a cada simulação mais próximo da Pressão obtida experimentalmente.

Para as próximas simulações numéricas ir-se-ão utilizar o valor de  $P_{CJ}$  de 0.11 Mbar, visto que se obteve bons resultados quanto a pressão pretendida que seria na casa dos 0.102Mbar. Quanto à  $D_{CJ}$ , será aumentada também, visto que, se aumenta a pressão e não se altera nada no modelo é esperado que a velocidade de detonação seja então superior também. Ou seja, estes dois parâmetros calibram-se em sintonia.

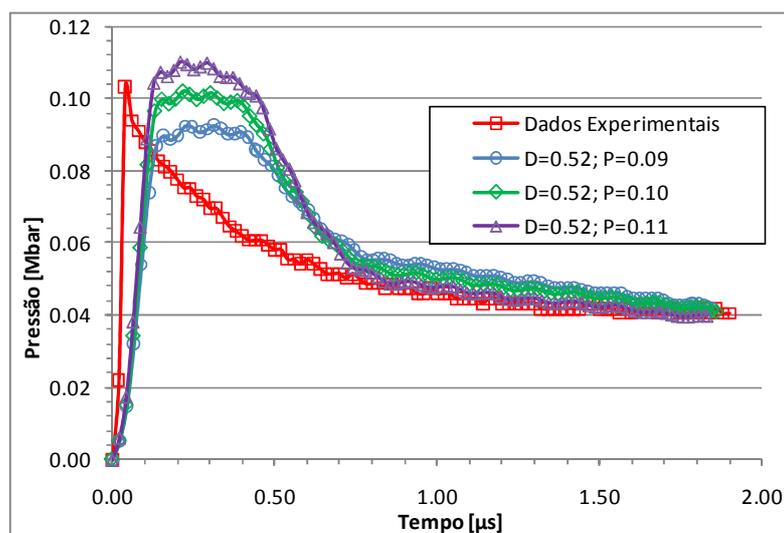


Figura 9. Simulação Numérica com aumento de  $P_{CJ}$  e  $D_{CJ}$  constante.

## 4.2. Simulação Numérica com Aumento de $D_{CJ}$ e Análise de Resultados

Para as seguintes simulações, aumentou-se a  $D_{CJ}$  não de uma forma tão "grosseira" visto que os explosivos não ideais divergem muito na variação deste parâmetro.

Através da Figura 10 conclui-se que com o aumento da  $D_{CJ}$  aproximou-se o pico da  $P_{CJ}$  ao eixo de Pressão. O valor de  $0.534 \text{ cm}/\mu\text{s}$  é o valor máximo da  $D_{CJ}$  que obtém resultados aceitáveis. Para valores superiores os resultados seriam piores, como se pode verificar pela Figura 11.

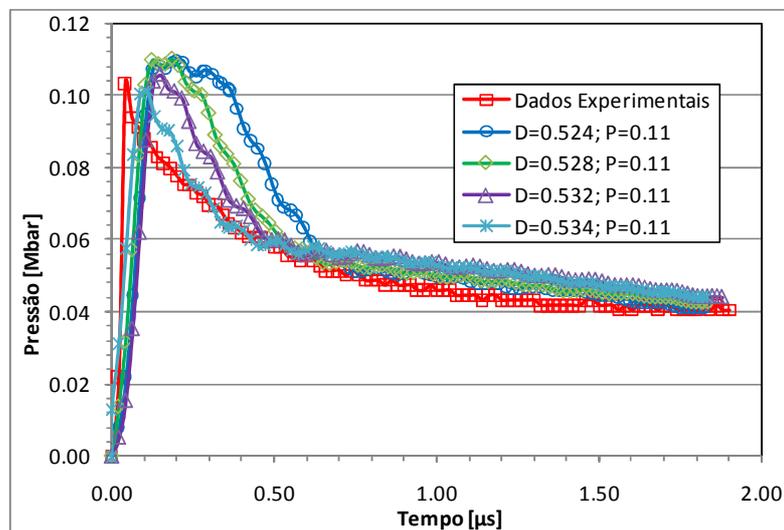


Figura 10. Simulação Numérica com aumento de  $D_{CJ}$  e  $P_{CJ}$  constante.

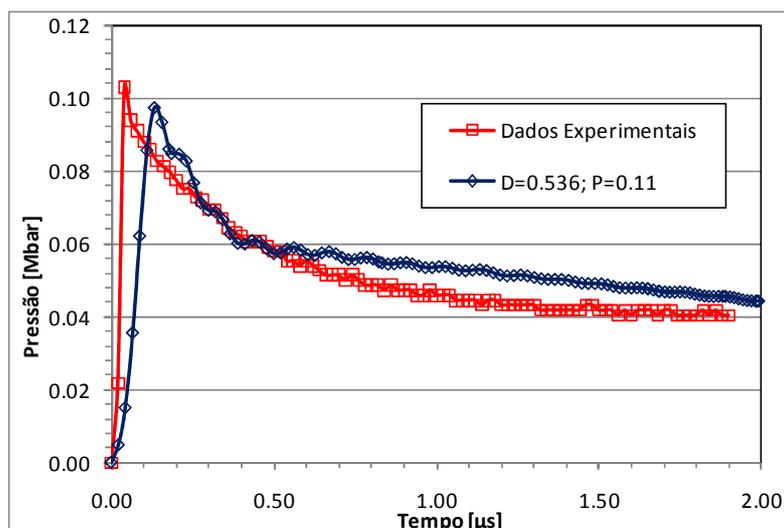


Figura 11. Simulação Numérica com  $D_{CJ} = 0.536 \text{ cm}/\mu\text{s}$ .

### 4.3. Comparação de Resultados – Experimentais com um $\Delta T$ de 0.02 e Numéricos

Com as simulações efectuadas, tudo leva a querer que os valores óptimos foram os utilizados na simulação da Figura 10. Ou seja, uma  $P_{CJ}$  de 0.11 Mbar e uma  $D_{CJ}$  de 0.534 cm/ $\mu$ s, com valores superiores os resultados começam a divergir.

Através da Figura 12, pode-se concluir que os modelos em comparação, Lee-Tarver Model e Explosive Burn não diferem de uma forma muito notória. Por isso, como o modelo Explosive Burn é um modelo mais simples e de mais fácil calibração à partida poderá ser utilizado na simulação numérica e experimental para emulsões explosivas.

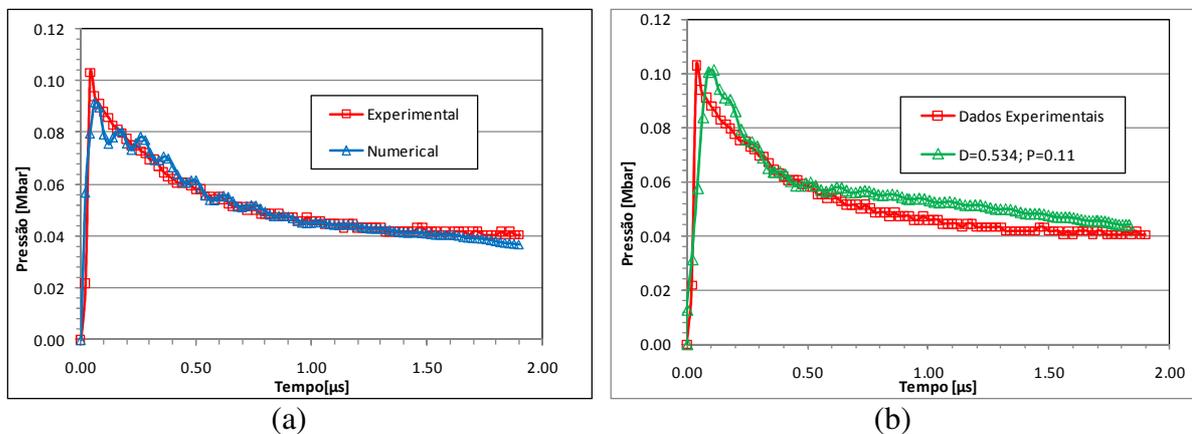


Figura 12. (a) Modelo Lee-Tarver Model; (b) Modelo Explosive Burn.

O valor de todos os parâmetros utilizados para a melhor solução encontrada e apresentada na Figura 12 (b) são descritos na Tabela 4.

Tabela 4. Valores encontrados para a melhor solução utilizando o modelo Explosive Burn.

Parâmetros	Valores
$P_{CJ}$ [Mbar]	0.11
$D_{CJ}$ [cm/ $\mu$ s]	0.534

#### 4.4. Resultados experimentais com um $\Delta T$ de 0.01

Já concluídos os resultados das simulações e comparados com os resultados numéricos, surgiram novos resultados experimentais. Para comprovar a valência deste modelo, Explosive Burn, foram efectuadas novas simulações numéricas e comparadas novamente.

Uma vez conhecida a forma como variam os resultados com a alteração dos parâmetros  $P_{CJ}$  e  $D_{CJ}$  as simulações efectuadas consistiram no mesmo critério definido anteriormente, primeiro aumento de  $P_{CJ}$  e  $D_{CJ}$  constante, segundo aumento de  $D_{CJ}$  e  $P_{CJ}$  constante. Visto que esta calibração é feita de forma iterada, existe a possibilidade de os valores encontrados não serem os óptimos, isto porque seria necessário algum tempo para uma busca mais alargada de valores, o que implicaria um maior leque de simulações efectuadas. Os melhores resultados encontrados apresentam-se na Figura 13(b), que são para uma  $P_{CJ}$  de 0.14 Mbar e  $D_{CJ}$  de 0.5361 cm/ $\mu$ s. O valor de todos os parâmetros utilizados para a melhor solução encontrada e apresentada na Figura 13 encontra-se apresentado na Tabela 5.

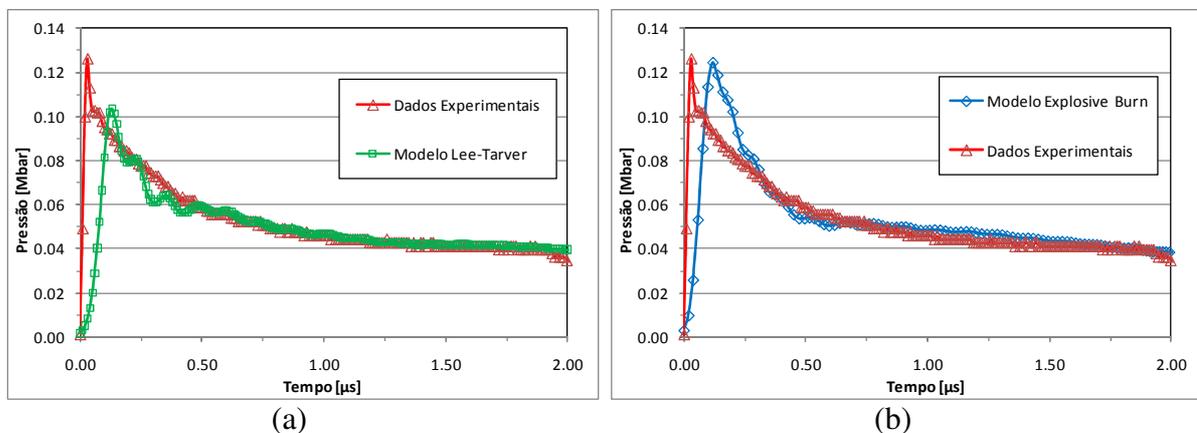


Figura 13. (a) Modelo Lee-Tarver; (b) Modelo Explosive Burn.

Comparando os novos resultados obtidos numericamente com os dois modelos através da Figura 13, Explosive Burn e Lee-Tarver conclui-se que o modelo Explosive Burn obtém melhores resultados. Sendo um modelo claramente de mais fácil calibração e obtendo melhores resultados seria relevante um estudo ainda mais aprofundado para determinar a exactidão da utilização do Explosive Burn.

**Tabela 5.** Valores encontrados para a melhor solução utilizando o modelo Explosive Burn tendo como referência os segundos resultados experimentais apresentados.

<b>Parâmetros</b>	<b>Valores</b>
$P_{CJ}$ [Mbar]	0.14
$D_{CJ}$ [cm/ $\mu$ s]	0.5361

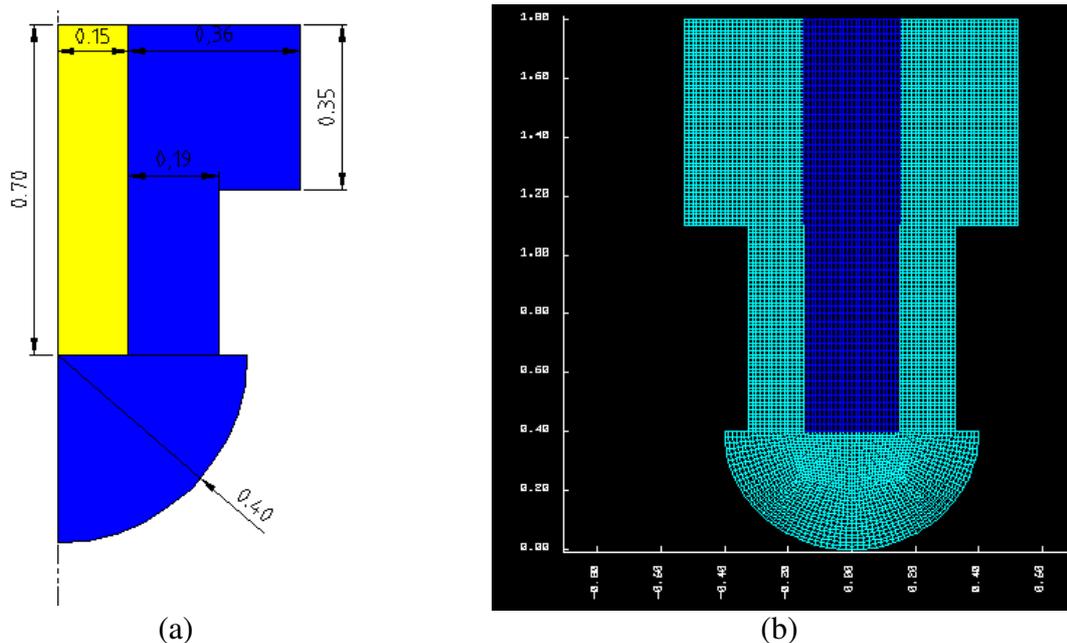
## 5. CORNER TURNING TEST

Neste capítulo será abordada a simulação numérica envolvendo o Corner Turning Test (Hill et al, 1998). Foi tido como referência o estudo feito e publicado em (Plaksin, I. 2009), serão feitos os três modelos o mais próximo possível dos publicados e serão analisados e comparados os resultados. Estes esquemas variam em geometria e nos materiais. Os resultados experimentais entretanto obtidos mostram que a onda de detonação se propaga mais rápido nas zonas periféricas da zona esférica. A ideia da realização das simulações numéricas é verificar se o mesmo no caso numérico e tentar encontrar uma justificação para esse comportamento.

Os modelos construídos apresentam uma zona esférica, deste modo, foi estudado o modo de construção para este caso em concreto, apresentado no estudo (Bernardino, H. 2008)

### 5.1. Modelo 1

O primeiro esquema consiste em dois tipos de materiais, PMMA nas periferias e explosivo LX-10 ao centro (Ricardo et al., 2004). A detonação iniciar-se-á na zona superior do explosivo. Construído o modelo parte-se para a simulação e interpretação de resultados.

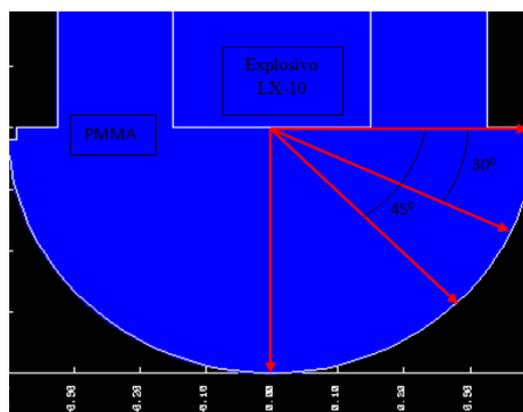


**Figura 14.** (a) Modelo introduzido no pré-processador MAZE axissimétrico, LX-10, PMMA; (b) Modelo com visualização de malha retirado do processador Orion, vista 2D.

Na Figura 14 (a) é apresentado o esquema introduzido no pré-processador MAZE, na Figura 14 (b) é apresentado o esquema utilizado para a detonação.

### 5.1.1. Resultados Obtidos

Para a análise de resultados foi utilizada a variação da pressão ao longo de uma “linha” vertical, horizontal, a 30° e a 45°. O esquema das linhas segue-se em exemplo na Figura 15. Estas linhas têm todas o mesmo tamanho, ou seja o raio da zona esférica, no caso 0.4 cm.



**Figura 15.** Representação das linhas de pressão.

Posto isto, retiraram-se os resultados da pressão da onda de choque resultantes na zona esférica do PMMA para as linhas marcadas, esta situação ocorre sensivelmente para um tempo de detonação de 1.658  $\mu$ s. Foram retirados quatro estados de ondas de choque com um intervalo entre cada de 50.

**Tabela 6.** Tempo de detonação com referência ao estado utilizado.

<b>Estado</b>	<b>Tempo [<math>\mu</math>s]</b>
250	1.658
300	1.888
350	2.065
400	2.216

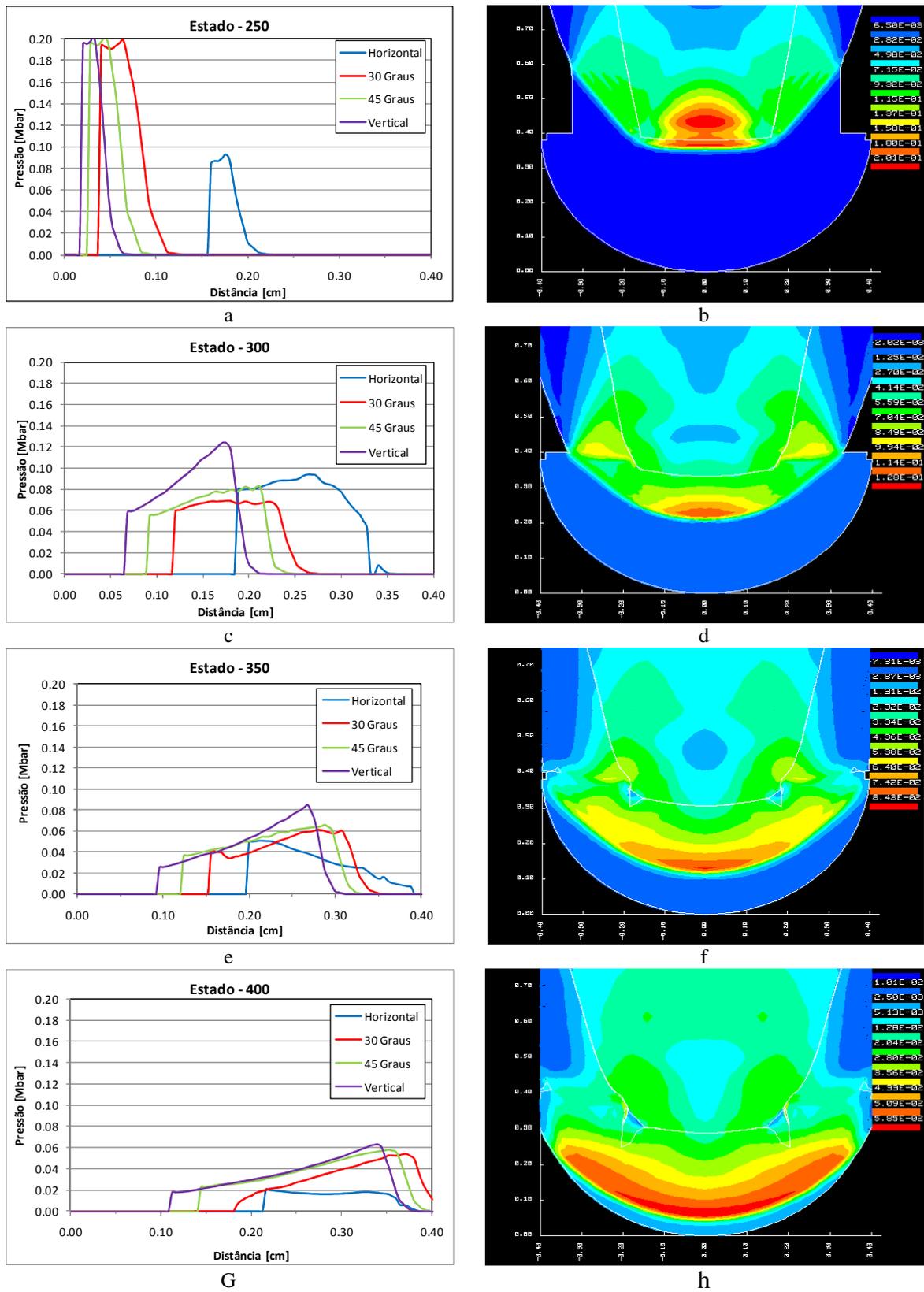
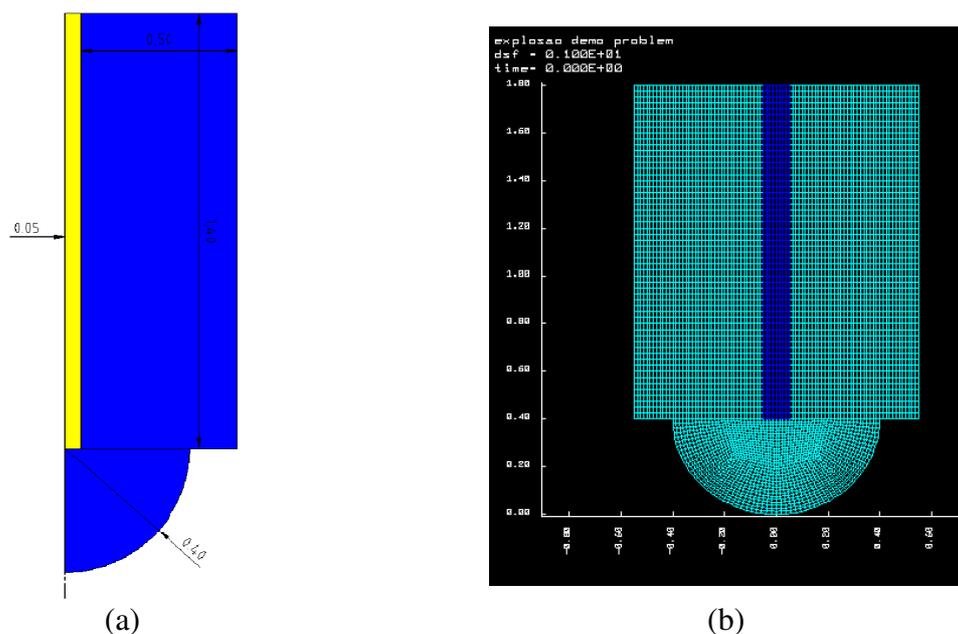


Figura 16. Detonação e respectivos resultados com iteração de 50 estados, resultados desde o estado 250 a 400.

Nos resultados apresentados na Figura 16 para os quatro estados retirados, é apresentado um gráfico pressão versus distância. Como se pode concluir ao longo dos estados a curva de pressão encontra-se mais distante nas linhas para zonas das periféricas, ou seja, a onda de choque propaga-se mais rápido nas zonas periféricas. Isto deve-se ao facto da onda de choque do PMMA superior “ajudar” a propagação da onda no PMMA na zona inferior, se fosse escolhido outro tipo de material mais inerte há propagação de ondas de choque possivelmente a onda de propagação teria uma forma mais esférica.

## 5.2. Modelo 2

Para o segundo modelo alteraram-se as dimensões e a geometria relativamente ao modelo 1 de acordo com o que é apresentado na Figura 17.



**Figura 17.** (a) Modelo introduzido no pré-processador MAZE axissimetrico, LX-10, PMMA; (b) Modelo com visualização de malha retirado do processador Orion, vista 2D.

### 5.2.1. Resultados Obtidos

Para a análise de resultados usou-se o mesmo critério que no modelo 1, ou seja, foi utilizada a variação da pressão ao longo de “linha” vertical, horizontal, a 30° e a 45° para determinados instantes temporais. Estas linhas têm todas o mesmo tamanho, ou seja o raio da zona esférica, no caso 0.4 cm.

Posto isto, retiraram-se os resultados da pressão da onda de choque resultantes na zona esférica do PMMA para as linhas marcadas, esta situação ocorre sensivelmente para um tempo de detonação de 1.775  $\mu$ s, este instante ocorre à chegada da onda à semi-esfera. Foram retirados quatro estados de detonação com um intervalo entre cada de 25.

**Tabela 7.** Tempo de detonação com referência ao estado utilizado.

Estado	Tempo [ $\mu$ s]
195	1.775
220	1.956
245	2.138
270	2.319

Nos resultados apresentados na Figura 18 conclui-se que ao longo dos estados a curva de pressão encontra-se mais distante nas linhas das zonas de periferia e é onde ocorre a pressão máxima, ou seja, a onda de choque propaga-se mais rápido nas zonas periféricas. Isto deve-se ao facto da onda de choque do PMMA superior “ajudar” a propagação da onda no PMMA na zona esférica, da mesma forma que no esquema 1, se fosse escolhido outro tipo de material mais inerte há propagação de ondas de choque possivelmente a onda de propagação teria uma forma mais esférica. Neste esquema em estudo nota-se em todos os estados uma pressão máxima sempre nas zonas laterais devido á zona superior ter um PMMA mais largo que a zona esférica.

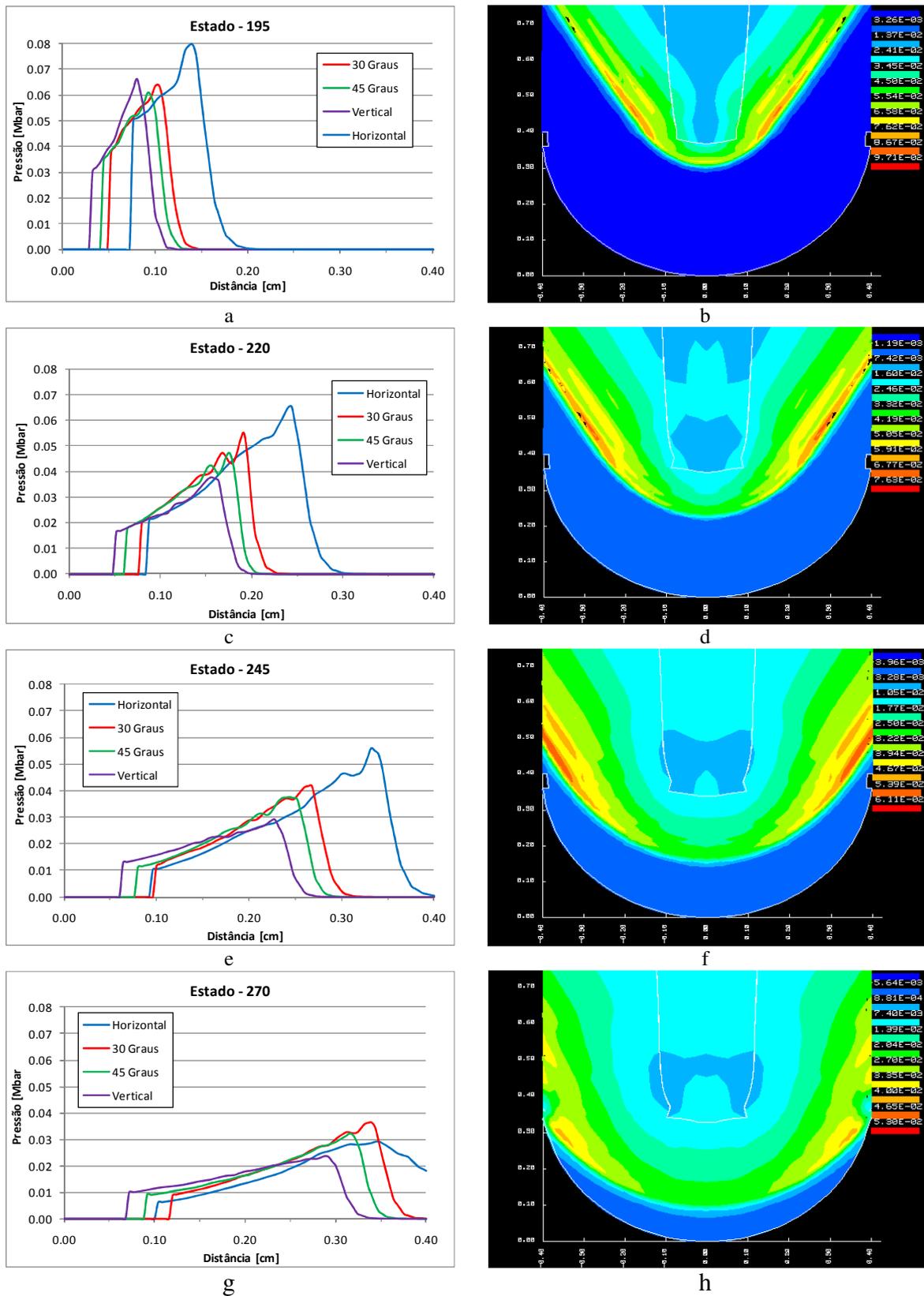


Figura 18. Detonação e respectivos resultados com iteração de 25 estados, resultados desde o estado 195 a 270.

### 5.3. Modelo 3

O terceiro e último modelo têm como característica mais relevante o facto de a hemisfera final de PMMA ser substituída por uma hemisfera de explosivo. O Explosivo seleccionado foi o Rf-04, existente na base de dados do HY-DYNA modelado com o Lee-Tarver model e que corresponde ao explosivo LX-10. Desta vez o raio da zona esférica terá o mesmo tamanho que a largura do PMMA. A detonação iniciar-se-á também na zona superior do explosivo LX-10. Construído o modelo parte-se para a simulação e interpretação de resultados.

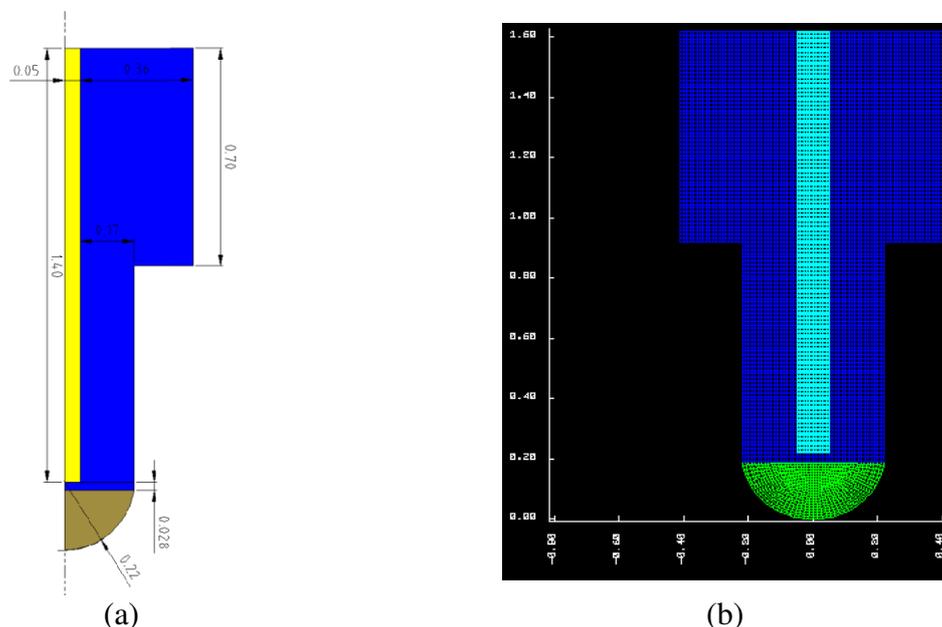


Figura 19. (a) Modelo introduzido no pré-processador MAZE axissimetrico, LX-10, PMMA, RF-04; (b) Modelo com visualização de malha retirado do processador Orion, vista 2D.

#### 5.3.1. Resultados Obtidos

Para a análise de resultados foi usado, como nos esquemas anteriores a variação de pressão ao longo de uma “linha” vertical, a 30° e a 45°. Estas linhas têm todas o mesmo tamanho, ou seja o raio da zona esférica, no caso 0.22 cm.

Posto isto, retiraram-se os resultados da pressão da onda de detonação resultantes na zona esférica do explosivo Rf-04 para as linhas marcadas, esta situação ocorre sensivelmente para um tempo de detonação de 1.664  $\mu$ s. Foram retirados quatro estados de detonação com um intervalo entre cada de 50.

**Tabela 8.** Tempo de detonação com referência ao estado utilizado.

<b>Estado</b>	<b>Tempo [<math>\mu</math>s]</b>
450	1.664
500	1.746
550	1.855
600	1.942

Nos resultados apresentados na Figura 20 para os quatro estados retirados, é apresentado um gráfico pressão versus distância. Como se pode concluir ao longo dos estados a curva de pressão encontra-se mais distante nas linhas para zonas da periferia, ou seja, a onda de detonação propaga-se mais rápido nas zonas periféricas. Isto deve-se ao facto da onda de choque do PMMA “ajudar” a propagação da onda de detonação no explosivo Rf-04, mais uma vez a escolha do tipo de material é essencial para a influência da propagação das ondas.

Na Figura 20 (a) e (c) pode-se constatar que o comportamento da pressão na zona esférica é diferente em alguns aspectos dos resultados obtidos na Figura 20 (e) e (g), a ocorrência da pressão máxima altera-se, devendo-se ao facto do PMMA existente entre os explosivos. Nos dois primeiros casos a pressão é máxima ao centro enquanto que nos dois últimos casos a pressão é superior nas zonas de periferia.

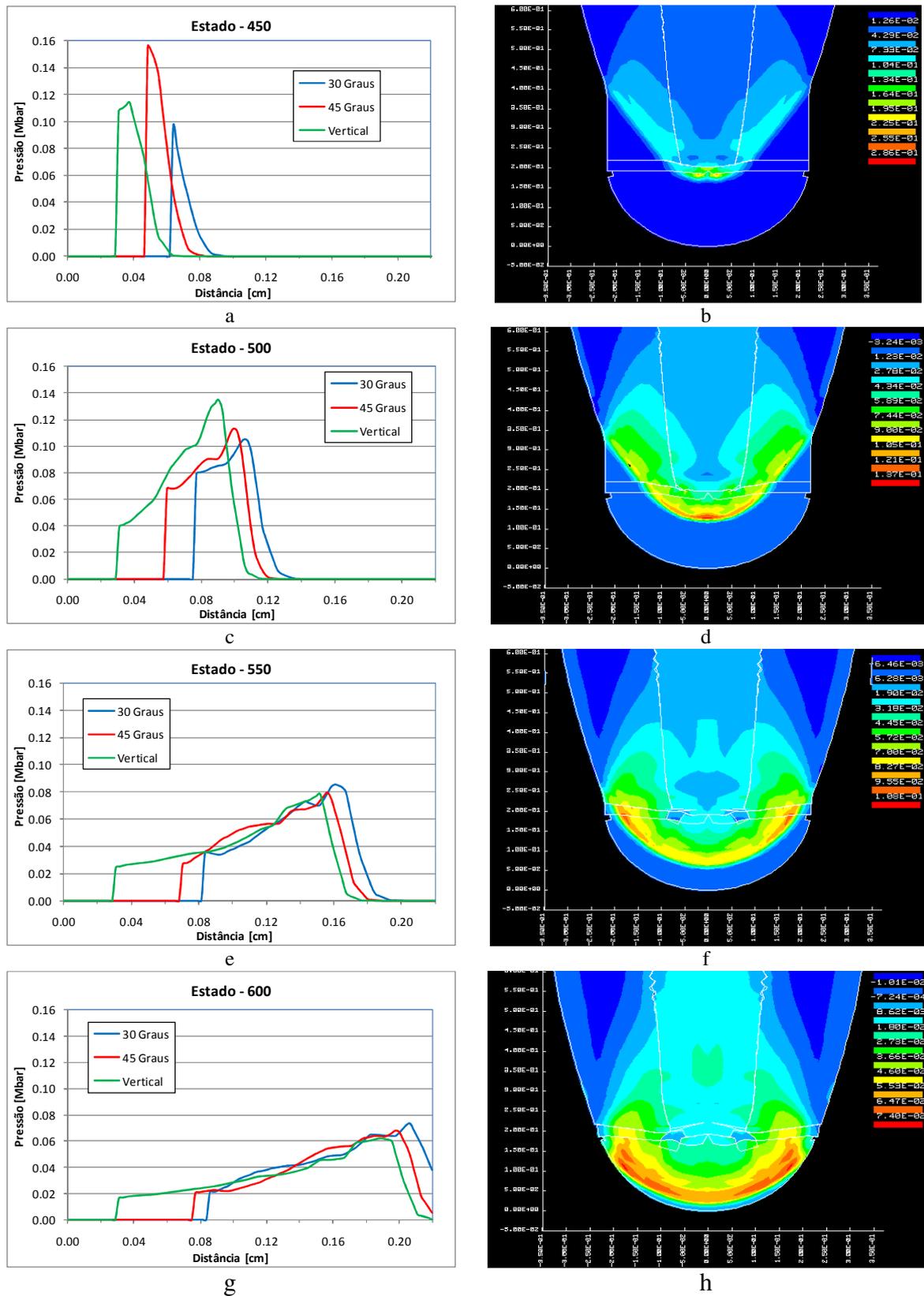


Figura 20. Detonação e respectivos resultados com iteração de 50 estados, resultados desde o estado 195 a 270.

## 6. CONCLUSÕES

Os resultados obtidos usando o modelo Explosive Burn foram alvo de grande estudo e interpretação de resultados, para que desta forma fossem apresentados na tese. Foi abrangido um grande leque de simulações iniciais para que se pudesse fazer um estudo sobre o comportamento de cada parâmetro e quais as suas influências. Foram apresentadas as simulações que nos levariam aos resultados mais próximos possíveis dos pretendidos, ou seja, as simulações apresentadas foram aquelas em que os resultados se aproximavam mais dos resultados experimentais. No modelo de estudo em causa, Explosive Burn, poderá dizer-se que se obteve bons resultados quando comparados com os apresentados em (Ribeiro et al., 2010). Ou seja a utilização de modelo de estudo, será uma mais-valia na sua utilização devido a uma maior simplicidade na sua utilização quando comparado com o Lee-Tarver Model.

Outra conclusão importante que se retira deste estudo efectuado, será no comprimento da carga de detonação, visto que nas simulações numéricas para comprimentos de carga de 22 e 10 cm se conseguiram resultados semelhantes.

No Corner Turning Test pode-se tirar algumas conclusões, quanto a tipo de geometrias e materiais a usar. O estudo em causa seria para uma compreensão e uma verificação das ondas de detonação/choque, dependendo do caso, ocorrerem primeiro nas zonas periféricas. De facto, os resultados obtidos mostram que ao longo das simulações, nos três casos, as ondas ocorrem em primeiro nas zonas periféricas, isto deve-se à propagação da onda de choque através do PMMA superior (lateral), nos três casos. O tipo de material também tem uma grande influência na propagação desta onda. Pode-se retirar conclusões separadamente dos três modelos. No primeiro modelo a semi-esfera tem um raio superior à largura total da zona superior (explosivo e PMMA), esse factor tem influência na direcção da pressão máxima, ou seja, apesar da onda se propagar inicialmente nas zonas periféricas, a pressão máxima tende a ocorrer na parte central, ao longo da linha vertical. No modelo 2, a semi-esfera, ao contrário do que acontece no modelo 1, é menor que a zona superior (explosivo e PMMA), o que irá incutir que a pressão máxima ocorra

nas zonas periféricas devido à propagação da onda no PMMA da zona superior (lateral). No modelo 3, com a inserção de explosivo na semi-esfera, e com o raio igual à largura total da zona superior a onda de detonação para além de ocorrer na zona periférica, esta ocorre também com maior pressão no mesmo local. Nos três modelos, conclui-se que a ajuda da onda de choque do PMMA tem maior influência no modelo 2 e 3 visto que a zona esférica é inferior ou igual à parte superior.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bernardino, H. J. F., *Optimização dos Parâmetros da Equação de Estado de um Explosivo*
- Brian G. Burke, Timothy J. Herlihy Jr., Andrew B. Spisak and Keith A. Williams, 2008, *Deep UV pattern definition in PMMA*
- Craig M. Tarver,\* Paul A. Urtiew, and William C. Tao, 1996, *Shock Initiation of a Heated Ammonium Perchlorate-Based Propellant.*
- Hill L.G., W.L. Seitz, C.A. Forest, & H.H. Harry, *High Explosive Corner Turning Performance and the Lanl Mushroom Test.*
- John O. Hallquist, 1983, *MAZE – Na Input Generator for DYNA2D and NIKE2D*
- John O. Hallquist, JoAnne L. Levatin, 1985, *ORION: An interactive color post-processor for two dimensional finite element codes.*
- Mohammad Hossein Keshavarz, *Simple correlation for predicting detonation velocity of ideal and non-ideal explosives.*
- Peter J. Haskins and Malcolm D. Cook, *Detonation Failure in Ideal and Non-Ideal Explosives*
- Plaksin, I. 2009. *Relatório privado*
- Ribeiro J. B.; C. Silva; R. Mendes, 2010, *Estimation of the Reactive Flow Model Parameters for an Ammonium Nitrate-Based Emulsion Explosive Using Genetic Algorithms.*
- Ricardo A. L. Mendes\*, Jose L. S. de A. Campos, Igor Y. Plaksin and Jose M. B. M. Ribeiro, *Divergent Detonation Wave Processes in PBX Based on RDX.*



```

parameter z10 [%p4+%p9];
n

c definigco de linhas
ld 1
lp 2 [%r1] [%z1] [%r2] [%z2]
lv

ld 2
lp 2 [%r2] [%z2] [%r6] [%z6]
lv

ld 3
lp 2 [%r6] [%z6] [%r8] [%z8]
lv

ld 4
lp 2 [%r8] [%z8] [%r1] [%z1]
lv

ld 5
lp 2 [%r4] [%z4] [%r3] [%z3]
lv

ld 6
lp 2 [%r5] [%z5] [%r7] [%z7]
lv

ld 7
lp 2 [%r9] [%z9] [%r10] [%z10]
lv

c definigco de Parts
c part 1
part 1 2 5 4 1 [20*%p3] [40*%p4] yes
c tty

c part 2
part 7 6 3 4 2 [10*%p2] [20*%p5] yes
c tty

c part 3
part 7 2 3 6 3 [10*(%p3-%p2)] [20*%p5] yes
c tty

c part 4
part 5 2 7 4 1 [20*%p3] [40*%p9] yes

c tty

c lv c line view
c pv c part view

c fim da primeira parte

assn
c tty

```

```

igm 0 c geometria axissimetrica
c uniao de partes
c nco ha necessidade de juntar partes ao contrario do trabalho do Gongalo
c este tinha que unir as partes do explosivo
c verificar porque penso que existem erros nos comentarios

c definicao de fronteiras com recurso a slidelines
c o relatsrio diz que sco as linhas do tipo 1, 2 e 3 sco indicadas
c começo por por tudo a tipo 3

c sln (nome da linha) (tipo)
c p (part master) b
c p (part slave) b
c slbp (parte slave) (part master)

sln 1 3
p 4
p 1
slbp 1 4

c tty

sln 2 3
p 2
p 4
slbp 4 2

c tty

sln 3 3
p 3
p 4
slbp 4 3

sln 4 3
p 2
p 3
slbp 3 2

c tty

c limitagco do deslocamento radial para r = 0
rcon 0

vstop 4 4 3 2 1 c apaga elementos c/ vol=0 ou vol<0
tstop 4 4 3 2 1 c apaga elementos que chegam a RFMTS "minimum
time step"

c define dyna2d control cards

p 2 b
sdet 3
c tty

c vou manter o mesmo tempo de paragem
term 28.00 c instante de paragem [micro s]

```

Página 3

```
plti 0.02          c intervalo entre os instantes de armazenamento
de dados (n: passos no ORION)

c prt1 100.02      c intervalo entre os instantes de armazenamento
de dados

rftms 0.0001      c minimum time steps (passo nos intervalos de
calculo no DYNA)
c tty

title
explosao demo problem

wbcd d295

c fim da segunda parte

c definigco de materiais

c material 1 - PMMA

rmat 1 plex
dtmin 0.001
rvmin 0.01
rvmax 10

endmat

c material 2 - explosivo

mat 2 8

dtmin 0.001
rvmin 0.01
rvmax 10

ro 1.05
d 0.5361
pcj 0.14

endmat

eos 2 2
a 75.39
b 0.4718
r1 11.95
r2 2.877
omega 0.2
e0 0.0555
v0 1

endeos

c PVC
rmat 3 plex
dtmin 0.001
rvmin 0.01
rvmax 10

endmat

end
```



```

parameter r10 [%p1];
parameter z10 [%p6+%p5+%p5];

parameter r11 [%p2];
parameter z11 [%p5+%p6];

parameter r12 [%p6];
parameter z12 [%p6-%p7];

parameter r13 [%p1];
parameter z13 [%p6-%p7];

parameter r14 [%p1];
parameter z14 [%p6+%p5];

c definigco de linhas
c tty

ld 1
lp 1 [%r1] [%z1]
lar [%r12] [%z12] [%p6]
lv

c tty

ld 2
lp 2 [%r2] [%z2] [%r5] [%z5]
lv

c tty

ld 3
lp 2 [%r7] [%z7] [%r8] [%z8]
lv

c tty

ld 4
lp 2 [%r4] [%z4] [%r6] [%z6]
lv

ld 5
lp 2 [%r3] [%z3] [%r9] [%z9]
lv

ld 6
lp 2 [%r1] [%z1] [%r10] [%z10]
lv

ld 7
lp 2 [%r8] [%z8] [%r10] [%z10]
lv

ld 8
lp 2 [%r14] [%z14] [%r7] [%z7]
lv

ld 9
lp 2 [%r5] [%z5] [%r12] [%z12]
lv

ld 10
lp 2 [%r12] [%z12] [%r13] [%z13]
lv

c tty

c definigco de Parts

```

n

```

n

c part 1
part 10 6 1 1 3 11 11 yes

c tty

c part 2
part 8 3 7 5 1 [100*%p3] [80*%p5] yes

c tty

c part 3
part 8 5 7 6 2 [100*%p2] [160*%p5] yes

c tty

c part 4
part 2 4 8 5 1 [100*%p4] [80*%p5] yes

c tty

c part 5
part 2 6 10 9 1 [100*%p6] [80*%p7] yes

c part 6
part 2 5 8 6 2 [100*%p2] [160*%p5] yes
c tty

c lv c line view
c pv c part view

c fim da primeira parte

assm

c tty

n 2 4
n 3 6

c tty

igm 1 c geometria plana

c tty

c uniao de partes

c nco ha necessidade de juntar partes ao contrario do trabalho do Gongalo
c este tinha que unir as partes do explosivo
c verificar porque penso que existem erros nos comentarios

c definicao de fronteiras com recurso a slidelines
c o relatsrio diz que sco as linhas do tipo 1, 2 e 3 sco indicadas
c começo por por tudo a tipo 3

c sln (nome da linha) (tipo)
c p (part master) b
c p (part slave) b
c slbp (parte slave) (part master)

sln 1 3
p 3
p 2
slbp 2 3

c tty

```

```

                                "
sln 2 3
p 2
p 4
slbp 4 2

sln 3 3
p 4
p 5
slbp 5 4

sln 4 2
p 5
p 1
slbp 1 5

sln 5 3
p 6
p 4
slbp 4 6

sln 6 3
p 6
p 5
slbp 5 6

sln 7 3
p 3
p 6
slbp 6 3

c limitagco do deslocamento radial para r = 0
rcon 0

vstop 7 7 6 5 4 3 2 1      c apaga elementos c/ vol=0 ou vol<0
tstop 7 7 6 5 4 3 2 1      c apaga elementos que chegam a RFMTS "minimum
time step"

c define dyna2d control cards

p 3 b
sdet 3

c tty

c vou manter o mesmo tempo de paragem
term 12.00                  c instante de paragem [micro s]
plti 0.001                  c intervalo entre os instantes de
armazenamento de dados (n: passos no ORION)

c prtj 100.                  c intervalo entre os instantes de armazenamento
de dados

rfmts .0001                  c minimum time steps (passo nos intervalos de
calculo no DYNA)

c tty

title
explosao demo problem

wbcd d295

c fim da segunda parte

```