

ONDAS DE DETONAÇÃO EM MISTURAS GASOSAS REATIVAS

Luan Nogueira Vilkevicios¹, Adriano Willian da Silva²

¹Instituto Federal do Paraná IFPR- Campus Curitiba/ Técnico em Petróleo e Gás/
luan_nogueira_vilkevicios@hotmail.com

²Professor de Física do Instituto Federal do Paraná- Campus Curitiba/adriano.silva@ifpr.edu.br

Resumo: As ondas de detonação quando geradas liberam uma grande energia que desencadeia uma série de reações químicas que são responsáveis por alimentar a propagação da própria onda, definindo o comportamento da onda ao longo do seu percurso. A análise das ondas de detonação, depende de algumas variáveis físicas como concentração, temperatura, pressão e velocidade inicial da onda. O objetivo do trabalho é fazer uma análise da influência de reações químicas exotérmicas e endotérmicas sobre a propagação de uma onda, principalmente, sobre as variações na pressão e temperatura do sistema gasoso reativo. Para que uma onda consiga atingir velocidades supersônicas e ser caracterizada como onda de detonação, é necessário que ela ganhe uma certa quantidade de energia, que em geral decorre das reações que sua própria propagação desencadeia. Os resultados encontrados indicam que a temperatura aumenta na zona de reação para reações exotérmicas e diminui para reações endotérmicas, enquanto que a pressão diminui na zona de reação para reações exotérmicas e aumenta para reações endotérmicas.

Palavras chave: Ondas de Detonação, Propagação, Reações Químicas, Equações de Euler

1 INTRODUÇÃO

Detonação é um processo de combustão supersônica em que a energia liberada na zona inicial de reação propaga-se através do material na forma de uma onda de choque. Esta onda de choque comprime as moléculas do material, elevando sua temperatura até o ponto de ignição. A detonação difere da deflagração, que se propaga a uma velocidade subsônica e não gera onda de choque ou grandes variações de pressão. Devido às altas pressões desenvolvidas, detonações costumam ser muito mais destrutivas que deflagrações.

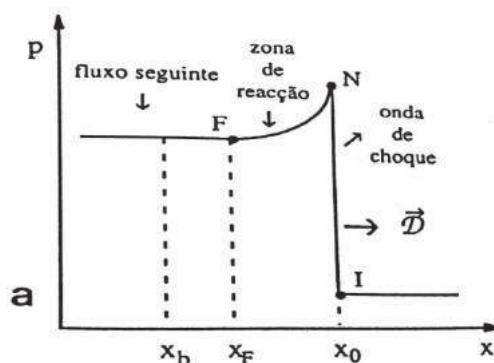
As ondas de detonação são essencialmente um choque alimentado por exotérmicas. Trata-se de uma onda que se propaga através de um meio altamente combustível ou quimicamente instáveis, como uma mistura de oxigênio - metano ou um alto explosivo. Uma onda de detonação segue regras ligeiramente diferentes de uma onda de choque normal, uma vez que é conduzido através de reação química que ocorre por trás da frente de onda de choque. Há duas formas de se obter uma onda de detonação, o primeiro método é pela aceleração de uma onda de deflagração onde se fornece mais energia a uma onda de deflagração dando assim um caráter volátil para essa onda, fazendo com que haja variações de pressão e auto ignição dessa onda fazendo com que ela vira uma onda de detonação. O outro método é uma forma induzida onde se obtêm através de uma forte onda de choque gerada através de uma fonte externa.

Matematicamente se descreve uma onda de detonação através de um modelo construída por equações de evolução para as principais propriedades de um gás, modelo esse que negligencia os efeitos de transporte e privilegia a química da reação. O modelo mais utilizado é o desenvolvido pelo matemático Leonhard Paul Euler, que tem como base as equações conservativas de Euler. O objetivo desse artigo é realizar uma análise nos gráficos, produzido por meio de um software computacional, que simulam a propagação de uma onda e ver qual a influência da energia de ativação da reação sobre um sistema gasoso binário e como a propagação interfere em variáveis como as concentrações de reagentes e produtos do meio quimicamente ativo, temperatura e pressão.

2 TEORIA DE ZELDOVICH, VON NEUMANN EDOERING

O modelo ZND afirma que uma onda de choque que se propaga em um gás com caráter explosivo, desencadeia uma série de reações químicas irreversíveis e exotérmicas. Nesse modelo é considerada uma detonação que libera uma grande quantidade de energia em forma de calor em uma pequena quantidade de tempo, ou seja, uma detonação extremamente energética, onde após essa imensa liberação de energia ainda contém energia suficiente para propagar a onda. (SOARES, 1997, p. 199).

Depois de detonada a onda começa a se deslocar e os gases do meio começam a passar pela onda, esse processo é meramente mecânico, ou seja, não há reações químicas ao longo dessa passagem, o que ocorre são saltos violentos de temperatura e pressão e esses fenômenos são os responsáveis por desencadear as reações químicas. Esses princípios levam a formação de uma classificação para as ondas de detonação que as divide em dois grupos, as detonações suportadas e não suportadas.



Fonte: (SOARES, 1997, p. 129).

A detonação pode ser dividida em três momentos, momento inicial R1 onde, o gás está em repouso até o ponto I, nesse ponto inicia-se um segundo momento denominado de R2 que é a zona de reação, onde ocorrem às reações químicas, e esse setor se estende até o ponto F onde as reações entram em equilíbrio dinâmico e inicia o setor R3 do gráfico. A passagem de R1 a R2 (de I a N) é considerado a problema, visto do ponto físico e matemático, da onda de choque e é possível, com justificações físicas e matemáticas, obter as equações conservativas de Euler (SOARES, 1997, p. 129).

2.1 Zona de Reação

No gráfico é definida a região R2, que é a área imediatamente a montante da onda de choque, a qual evolui o gás desencadeando as reações químicas de forma abrupta. A amplitude dessa zona é diretamente proporcional ao tempo em que o gás leva para atingir o estado de equilíbrio e o regime se torne linear, formando o chamado fluxo seguinte. Em suma, a zona de reação é o estado maxwelliano de desequilíbrio químico associados à mistura ativa.

Destaca-se a transição do gás da zona R1 para R2, caracterizada por variação brusca em variáveis como a pressão, densidade e temperatura, provocadas pela passagem do gás através da onda. Já a evolução de R2 para R3 é marcada por um fluxo contínuo da onda dando origem ao fluxo seguinte.

3 METODOLOGIA

Para a resolução dos cálculos que envolvem o problema da onda de detonação utilizamos o software computacional, [MATHEMATICA](#) 10.4, software esse que resolve equações diferenciais para densidade de partículas, momentum linear e energia e permite a resolução do problema da onda detonação.

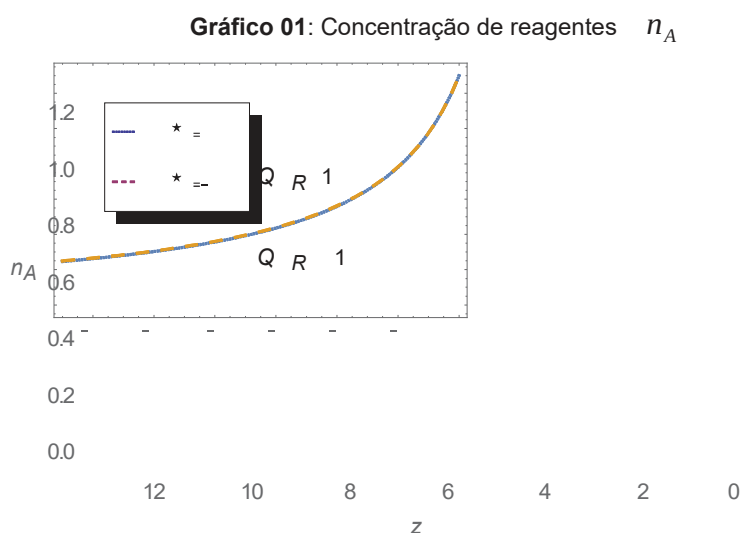
Além disso foi realizado um trabalho de revisão bibliográfica de propagação de ondas de detonação num fluido não viscoso, não difuso, não condutor de calor, mas onde ocorrem reações químicas.

4 RESULTADOS

Quando uma onda se propaga em um meio quimicamente reativo essa altera algumas características dos gases que ali se encontram, tais como, temperatura, pressão,

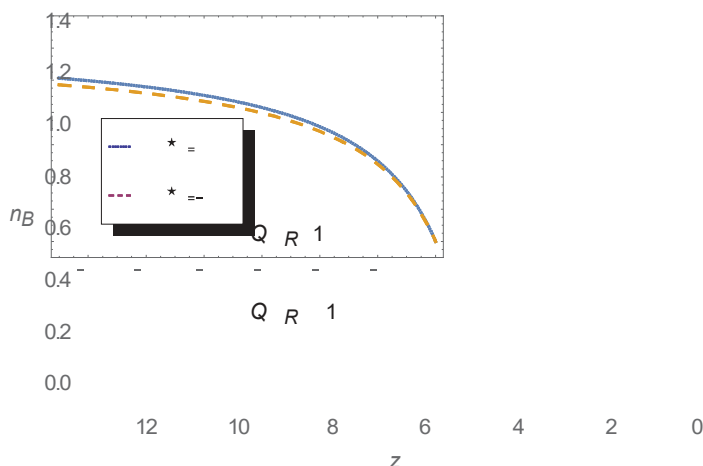
densidade, e concentração dos reagentes e produtos, separando os gases do meio em duas porções (SOARES, 1997, p. 111) distintas, uma a frente da onda que se propaga onde se encontram os gases ainda em estado de repouso e inertes, e a outra porção imediatamente atrás da onda composta pelos gases que já sofreram as alterações respectivas a onda e agora se encontram em um estado de equilíbrio porém com valores diferentes do seu estado inicial.

Para os gráficos a seguir consideramos a energia de ativação das reações zero, o que implica em uma situação onde toda e qualquer colisão molecular desencadeia reações químicas, e todos os gráficos estão em função do deslocamento espacial da onda (Z). Para analisar a influência da ondas no meio gasoso reativo, são consideradas reações endotérmicas ($Q^*r=1$) e exotérmicas ($Q^*r=-1$).



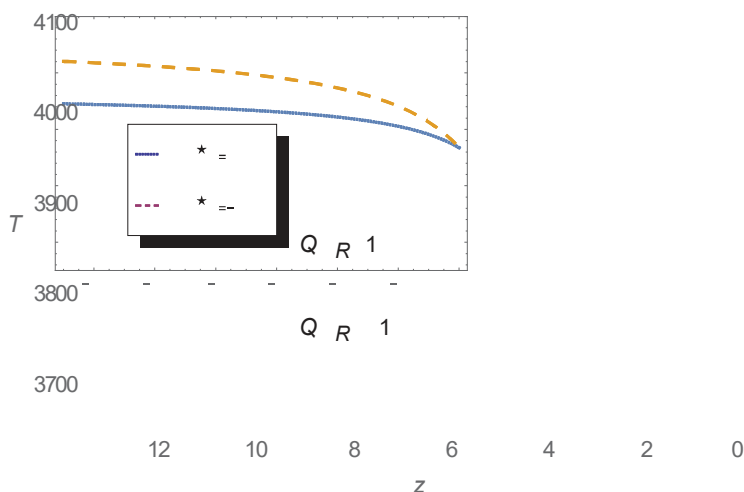
Ao se propagar, uma onda desencadeia uma série de reações químicas e tais reações tendem ao equilíbrio químico (CONFORTO, p. 35). Dessa forma, há o consumo de reagentes para a formação de produtos, e conforme a reação se processa e os reagentes são consumidos, a concentração n_A desses reagentes tende a diminuir como mostra no gráfico acima.

Gráfico 02: Concentração de produtos n_B



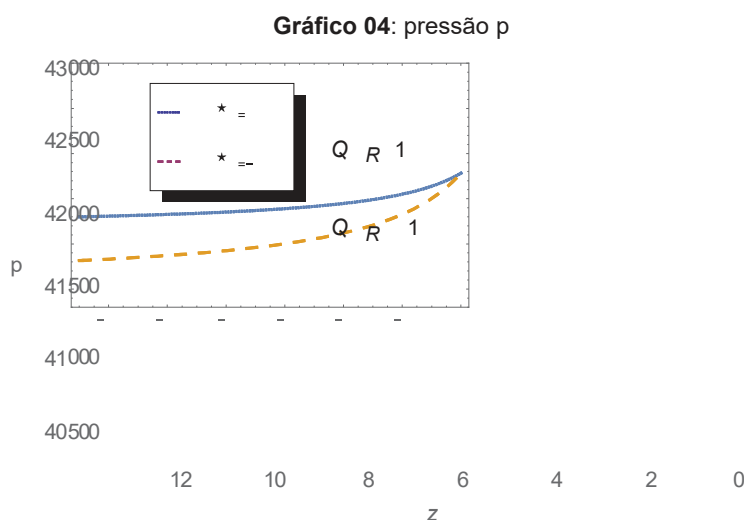
Como supracitado, em uma reação química há o consumo de reagentes para a formação de produtos, e isso é retratado no gráfico acima que mostra que conforme a onda se propaga e a reação se processa, a concentração n_B de reagentes aumenta. Nota-se que para a reação endotérmica este efeito é maior.

Gráfico 03: Temperatura T



No gráfico 3 fica evidenciada as diferenças já apresentadas entre reações exotérmicas e endotérmicas, com significativas diferenças de temperatura. Essa temperatura influi diretamente na velocidade com que a onda irá se deslocar, sendo que quanto maior for a temperatura, maior será a velocidade da onda. Isto se dá pelo fato de que a temperatura é que uma fonte de energia utilizada pela onda para se auto alimentar, de forma que as reações que são o meio para a propagação da onda continuem

ocorrendo. CARVALHO (Carvalho, 2016, p.7) mostrou que a temperatura aumenta para uma reação química exotérmica e diminui para uma reação endotérmica e que a extensão da zona de reação diminui quando o calor da reação aumenta.



Quando é iniciada a propagação há um pico de pressão devido a grande quantidade de energia liberada por esse evento (SOARES, 1997, p.118), a partir desse momento a pressão tende a cair a medida que essa energia vai se dissipando ou sendo consumida. O gráfico 04 mostra o decaimento da pressão e evidencia a diferença nesses valores de decaimento, onde o decaimento da pressão com reações endotérmicas é menor do que com reações exotérmicas. Este comportamento acontece pois as reações endotérmicas consomem energia, fazendo com que os valores de pressão diminuam mais acentuadamente do que nas reações exotérmicas.

Os resultados acima também foram obtidos por CONFORTO et al (Conforto et al, p. 8) em um trabalho no qual eles analisaram uma explosão em uma mistura gasosa metaestável e com reações químicas.

5 CONCLUSÃO

A propagação da onda influencia na pressão, temperatura, concentração de produtos e reagentes presentes no ambiente quimicamente ativo. Com a passagem da onda, desencadeia-se uma série de reações químicas fazendo com que ocorra o consumo de reagentes para a formação de produtos e provoca alterações na pressão e temperatura da mistura. Tais comportamentos são vastamente discutidos na literatura científica e aqui

são demonstrados por meio das simulações matemáticas e computacionais aqui realizadas.

Os resultados encontrados nas misturas gasosas analisadas desconsideram os coeficientes de transporte como viscosidade, condutividade e difusão. Porém é sabido que tais coeficientes exercem forte influência sobre a propagação da onda.

A análise das contribuições dos coeficientes de transporte sobre a propagação da onda de detonação tornam o trabalho computacional mais trabalhoso, porém podem levar a resultados mais realísticos deste tipo de fenômeno e constituem importante campo de pesquisa na área de ondas de detonação.

REFERÊNCIAS

CONFORTO, F.; GROPPPI, M.; MONACO, R.; SPIGA, G. Kinetic approach to Deflagration Processes in a Recombination Reaction. **American Institute of Mathematical Sciences** v.4, n.1, Março de 2011

CONFORTO, F.; GROPPPI, M.; MONACO, R.; SPIGA, G. Steady detonation waves for gases undergoing dissociation/recombination and bimolecular reactions. **Continuum Mech. Thermodyn**, 2004

CONFORTO, F.; GROPPPI, M.; MONACO, R.; SPIGA, G. **Steady detonation problem for slow and fast chemical reactions**. Politecnico di Torino. Dipartimento di Matematica, Università di Messina, 2004.

CONFORTO, F.; MONACO, R.; SCHÜRERER; I. Z. “Steady detonation waves via the Boltzmann equation for a reacting mixture” **Institute of Physics Publishing Journal of Physics a: Mathematical and General** 2003.

SOARES J. A., **Teoria Cinética Discreta de Gases Quimicamente Activos- Ondas de Detonação**. Universidade do Minho. Departamento de Matemática. 1997.

CARVALHO F., **“A kinetic approach to steady detonation waves and their linear stability”**. Universidade do Minho. Departamento de Matemática. 2016.