



REMAT

Revista Eletrônica da Matemática

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul



Desenvolvimento de mecanismos cinéticos reduzidos para a simulação de chamas e a utilização de softwares matemáticos para sua interpretação

Eduardo Boff Ribeiro

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul, Campus Caxias do Sul, RS
eduardo.ribeiro@caxias.ifrs.edu.br

Greice da Silva Lorenzetti Andreis

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul, Campus Caxias do Sul, RS
greice.andreis@caxias.ifrs.edu.br

Este trabalho é resultado do projeto de pesquisa “Desenvolvimento de mecanismos cinéticos reduzidos para a simulação de chamas e a utilização de softwares matemáticos para sua interpretação”, que visa obter mecanismos cinéticos reduzidos para diferentes combustíveis e explorar softwares matemáticos. A combustão é um processo de oxidação rápida, normalmente de intensidades variáveis. Sendo assim, as simulações numéricas são complicadas pois existem grandes diferenças nas escalas de tempo das conversões entre espécies. Enquanto a combustão do hidrogênio pode ser modelada com 17 reações (PETERS, ROGG, 1993), o biodiesel possui mais de 7000 reações (CRECK MODELING GROUP, 2012). Assim, existe a necessidade de desenvolver mecanismos cinéticos reduzidos que possuam menos variáveis, rigidez moderada e boa precisão. Os mecanismos detalhados podem ser reduzidos utilizando hipóteses de equilíbrio parcial, regime permanente, e métodos de redução que buscam remover espécies e reações de menor importância como a análise de sensibilidade e o método “Direct Relation Graph”. Cada reação possui uma taxa que é dada em função das concentrações das espécies e envolve um coeficiente dado pela equação modificada de Arrhenius: $k_i = AT^n \exp(-E/(RT))$, onde A é o fator de frequência, T a temperatura, E a energia de ativação e R a constante dos gases. A pesquisa consistiu na automatização do processo de análise do grau de magnitude do coeficiente da taxa de reação desenvolvida por Andreis (2011). Ao mesmo tempo em que o algoritmo desenvolvido em Scilab elimina as reações mais rápidas, ele garante que não sejam eliminadas reações importantes na queda hierárquica das espécies do mecanismo.

Palavras-chave: Combustão. Mecanismos Cinéticos. Scilab.

Referências

ANDREIS, G. S. L. **Solução via LES de chamas difusivas de metano, metanol e etanol**. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Porto Alegre: UFRGS, 2011.

CRECK MODELING GROUP. **Complete mechanism (low and high temperature)**. Version 1201. Disponível em: <<http://creckmodeling.chem.polimi.it/kinetic.html>>. Acesso em: 10 ago. 2012.

PETERS, N.; ROGG, B. (Ed.). **Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems**. Berlin: Springer, 1993. (Lecture Notes in Physics, 15).