

# Análise dos coeficientes das taxas de reação para a redução de mecanismos cinéticos utilizando programação em Scilab

Eduardo Boff Ribeiro<sup>1</sup>, Greice da Silva Lorenzetti Andreis<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Bolsista de Iniciação Científica e/ou Tecnológica do Ensino Superior – BICTES – Licenciatura em Matemática, IFRS – Câmpus Caxias do Sul, eduardo.ribeiro@caxias.ifrs.edu.br

<sup>2</sup> Doutora em Engenharia Química, IFRS – Câmpus Caxias do Sul, greice.andreis@caxias.ifrs.edu.br

## Introdução

O projeto de pesquisa **Desenvolvimento de mecanismos cinéticos reduzidos para a simulação de chamas e a utilização de softwares matemáticos para sua interpretação** tem como objetivo obter mecanismos cinéticos reduzidos para diferentes combustíveis e também explorar softwares matemáticos. O estudo apresentado aqui consiste na utilização do Scilab para a análise da ordem de magnitude dos coeficientes das taxas de reação de mecanismos cinéticos detalhados, contribuindo na obtenção de mecanismos cinéticos reduzidos.

## Objetivos

- **Objetivo do projeto:** Obter mecanismos cinéticos reduzidos para diferentes combustíveis e também explorar softwares matemáticos.
- **Objetivo do trabalho:** Utilizar o software Scilab para a análise da ordem de magnitude dos coeficientes das taxas de reação de mecanismos cinéticos detalhados, contribuindo na obtenção de mecanismos cinéticos reduzidos.

## Redução de Mecanismos Cinéticos

A combustão é um processo de oxidação rápida, em que há liberação de luz, calor, normalmente de intensidades variáveis.



Um mecanismo cinético reduzido pode ser determinado obtendo inicialmente um mecanismo esqueleto, e depois aplicando, por exemplo, as hipóteses de equilíbrio parcial e regime permanente para obter um mecanismo cinético reduzido. Os mecanismos esqueleto são obtidos através de métodos que removem as espécies e reações de menor importância do mecanismo detalhado, como através das análises de sensibilidade, da componente principal, do Jacobiano e do método DRG (*Direct Relation Graph*).

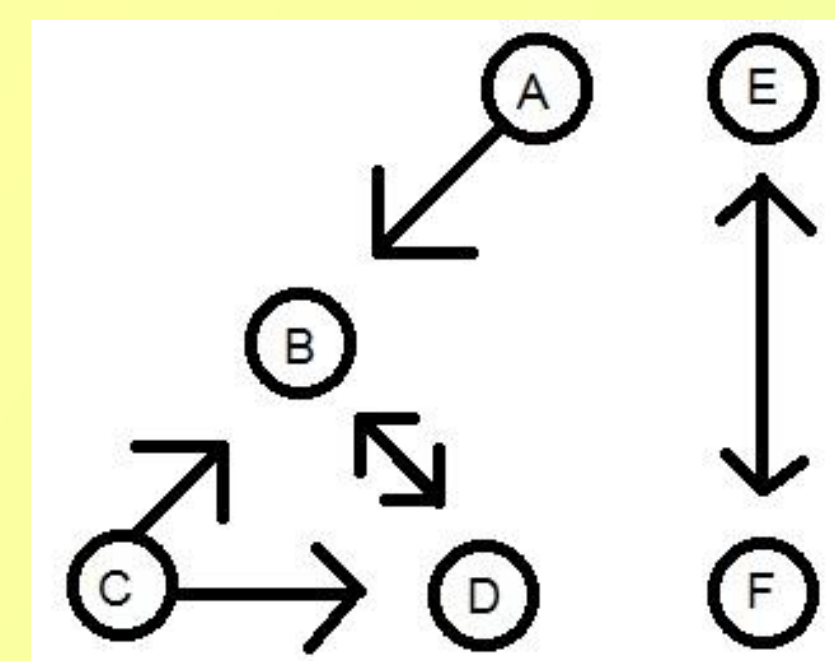
## DRG – Direct Relation Graph

- Método baseado na teoria dos grafos.
- Elimina as espécies menos importantes, com alto grau de precisão.
- Mapeia o acoplamento entre as espécies de um mecanismo, em um grafo direcionado.
- Grau de acoplamento

$$r_{AB} = \frac{\sum_{i=1,N} |v_{A,i} w_i \delta_{B,i}|}{\sum_{i=1,N} |v_{A,i} w_i|}$$

- Taxa de reação

$$w_i = k_i \prod_{j=1,n} [A_j]^{v_{j,i}}$$



- Equação Modificada de Arrhenius

$$k_i = AT^\beta e^{-Ea/(RT)}$$

## Resultados obtidos com o Scilab para o mecanismo do H<sub>2</sub>

```

parametros =
nr=10.0;Rg=1.98;T=1600.0;vmax=1.0e+15;
reacoes =

```

1	H + 1	O2 + 1	0 = 1.0	O + 1.0	OH + 1.0	0	2.00E+14	0.00	16800.0	9.953D+11	Permanece
1	H2 + 1	O + 1	0 = 1.0	H + 1.0	OH + 1.0	0	1.80E+10	1.00	8826.0	1.776D+12	Permanece
1	H2 + 1	OH + 1	0 = 1.0	H + 1.0	H2O + 1.0	0	1.17E+09	1.30	3626.0	5.451D+12	Permanece
1	OH + 1	OH + 1	0 = 1.0	O + 1.0	H2O + 1.0	0	6.00E+08	1.30	0.0	8.780D+12	Permanece
1	HO2 + 1	H + 1	0 = 1.0	OH + 1.0	OH + 1.0	0	1.50E+14	0.00	1004.0	1.093D+14	Permanece
1	HO2 + 1	H + 1	0 = 1.0	H2 + 1.0	O2 + 1.0	0	2.50E+13	0.00	700.0	2.004D+13	Permanece
1	OH + 1	HO2 + 1	0 = 1.0	2O + 1.0	O2 + 1.0	0	2.00E+13	0.00	1000.0	1.459D+13	Permanece
1	H + 1	O2 + 1	0 = 1.0	O2 + 1.0	O + 1.0	0	2.30E+18	-0.80	0.0	6.287D+15	Elimina
1	OH + 1	H + 1	0 = 1.0	2O + 1.0	O + 1.0	0	2.20E+22	-2.00	0.0	8.594D+15	Elimina
1	H + 1	H + 1	0 = 1.0	H2 + 1.0	O + 1.0	0	1.80E+18	-1.00	0.0	1.125D+15	Elimina

## Considerações Finais

- A pesquisa proporcionou um aprendizado na área da combustão e em programação.
- O Scilab é um software gratuito e de fácil programação.
- Foram calculados os coeficientes das taxas de reação para o mecanismo cinético do hidrogênio (eliminação de reações de menor importância).
- O processo da obtenção de mecanismos cinéticos reduzidos está sendo automatizado.

## Referências

- [1] HE, K.; IERAPETRITOU, M. G.; ANDROULAKIS, I. P. A graph-based approach to developing adaptive representations of complex reaction mechanisms. *Combustion and Flame*, v. 155, 585-604, 2008.
- [2] LACERDA, E. G. M. *Programando com Scilab*. UFRN, 2011.
- [3] PETERS, N.; ROGG, B. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1993.
- [4] RUSSELL, J. B. *Cinética Química*. In: Química Geral. 2. ed. São Paulo: Pearson, 1994.