

# Análise do grau de acoplamento entre as espécies químicas envolvidas na combustão do metano através do método DRG



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

<sup>1</sup> Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul – Campus Caxias do Sul

E-mail: eduardo.ribeiro@caxias.ifrs.edu.br

\* Orientadora: greice.andreis@caxias.ifrs.edu.br

## Introdução

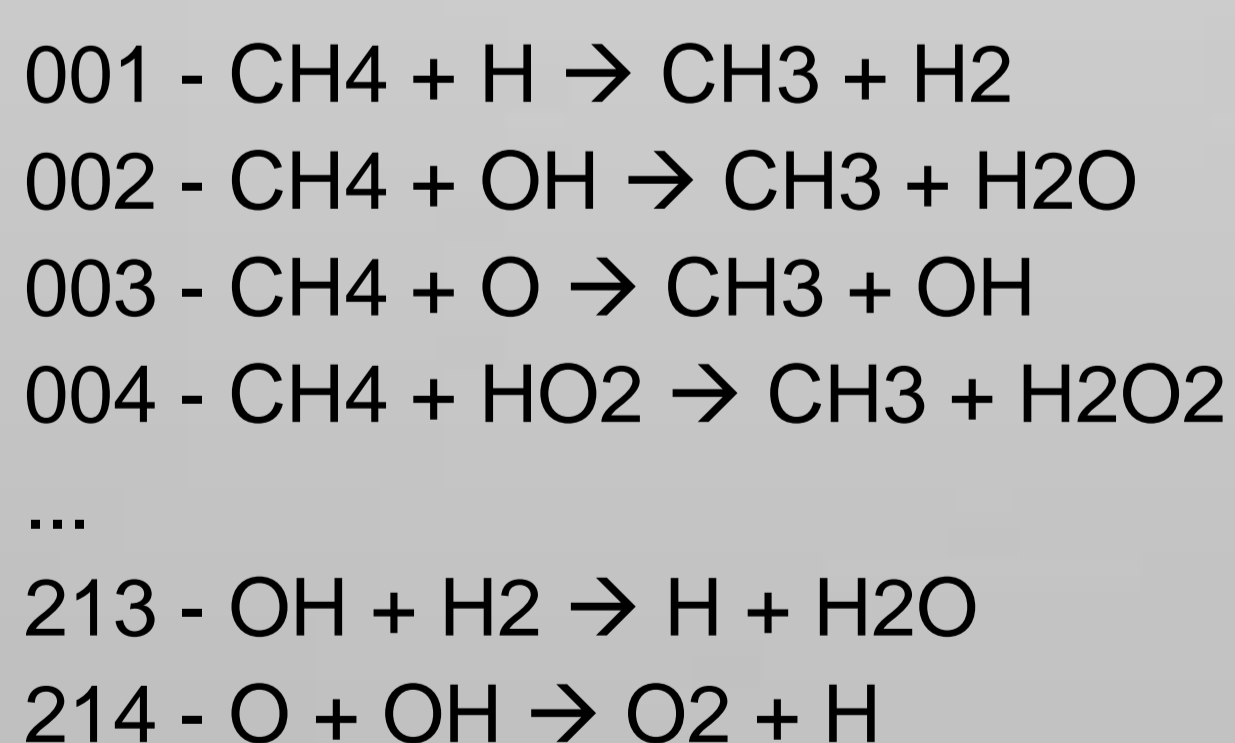
A modelagem computacional é uma parte essencial nas pesquisas em combustão, por envolver um grande número de espécies reagindo em inúmeras reações químicas. A combustão requer a resolução de  $n + 5$  variáveis para cada ponto do espaço, sendo uma variável para a massa específica, três para a velocidade, uma para a energia (pressão, entalpia ou temperatura) e  $n$  para as frações mássicas das espécies. A maioria dos mecanismos cinéticos detalhados envolve um grande número de espécies, sendo  $n$  maior que 50 para muitos combustíveis de hidrocarbonetos simples. Como a simulação numérica de tais mecanismos possui um alto custo, devido ao número de reações envolvidas, mecanismos cinéticos reduzidos são empregados para a simulação numérica.

**Objetivo do projeto de pesquisa “Desenvolvimento de mecanismos cinéticos reduzidos para a simulação de chamas e a utilização de softwares matemáticos para sua interpretação”:** Obter mecanismos cinéticos reduzidos para diferentes combustíveis e também explorar softwares matemáticos.

**Objetivo do trabalho:** Analisar o grau de acoplamento entre as espécies do mecanismo de 214 etapas para a combustão do metano através do método DRG (*Direct Relation Graph*), obtendo um mecanismo cinético reduzido.

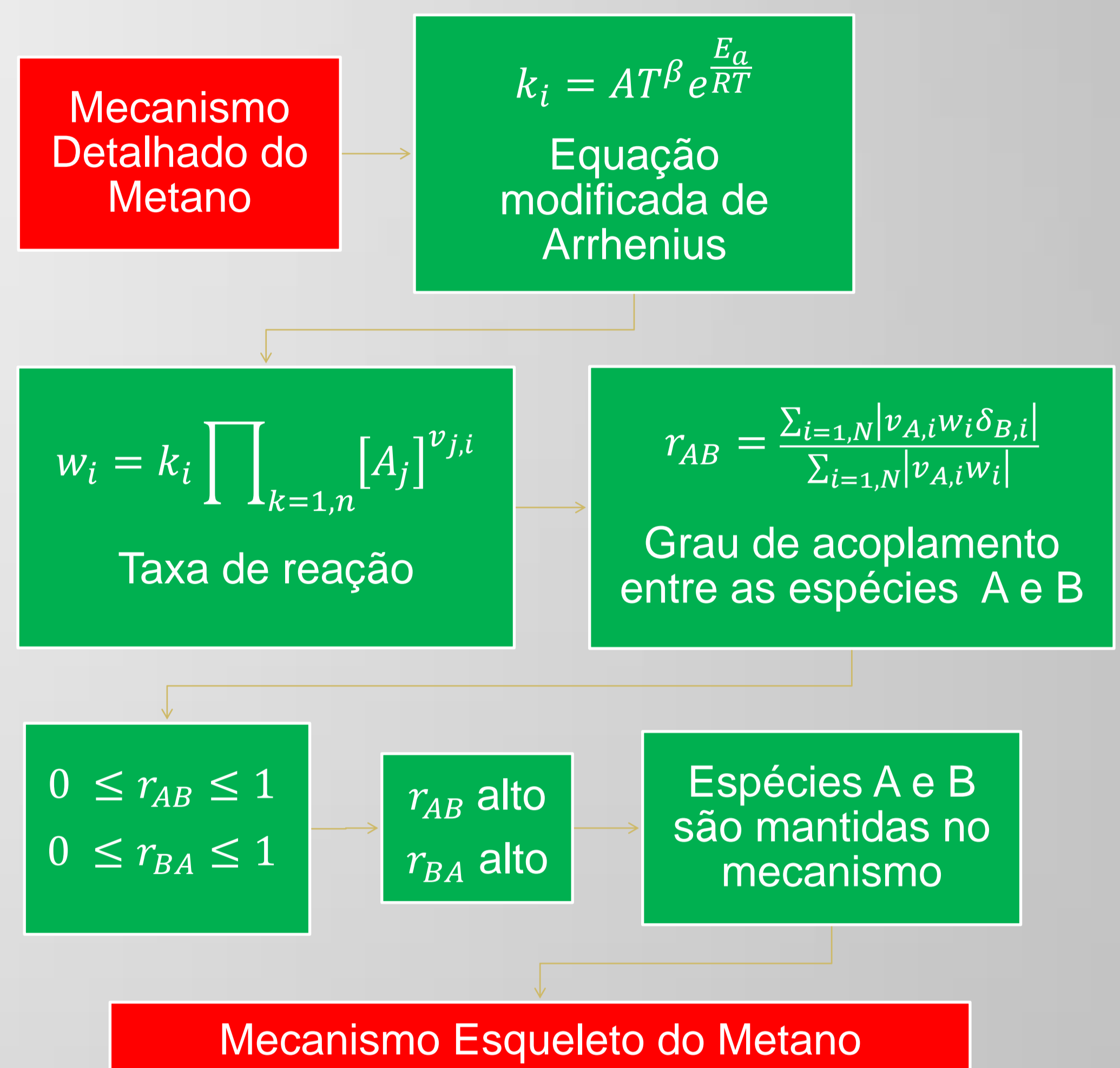
## Metodologia

O mecanismo cinético detalhado utilizado nessa pesquisa para a combustão do metano é composto por 214 etapas elementares [2].



A redução de mecanismos cinéticos detalhados geralmente é realizada utilizando o conceito de sensibilidade ou o conceito de taxa de reação. Dentre os métodos desenvolvidos na literatura para remover espécies e reações menos importantes de mecanismos cinéticos detalhados, destaca-se o DRG que identifica e elimina as espécies menos importantes com alto grau de precisão através do mapeamento do acoplamento entre as espécies de um mecanismo cinético em um grafo direcionado, a

partir do cálculo das taxas de reação [1]. Um esquema da técnica é apresentado a seguir.



$A$  – Fator de frequência

$T$  – Temperatura

$\beta$  – Fator de frequência

$E_a$  – Energia de ativação

$R$  – Constante dos gases ideais

$[A_j]$  – Concentração da espécie  $A$  na reação  $j$

$n$  – Número de espécies

$N$  – Número de reações

$v_{j,i}$  – Coeficiente da espécie  $j$  na reação  $i$

$\delta_{B,i}$  – Vale 1 se a espécie  $B$  é um reagente na reação  $i$  e zero em caso contrário

## Resultados

- Análise da ordem de magnitude dos coeficientes das taxas de reação (resultados 2014);
- Implementação do método DRG (Scilab);
- Mecanismo reduzido para o metano (em processo de obtenção).

## Referências Bibliográficas

[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] PETERS, N.; ROGG, B. *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Berlin: Springer, 1993.