



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Análise do grau de acoplamento entre as espécies químicas envolvidas na combustão do metano através do método DRG
<b>Autor</b>	EDUARDO BOFF RIBEIRO
<b>Orientador</b>	GREICE DA SILVA LORENZZETTI ANDREIS
<b>Instituição</b>	INSTITUTO FED EDUCACAO, CIENCIA E TECNOL DO RIO GRANDE DO SUL - CAXIAS DO SUL

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

Eduardo Boff Ribeiro, Greice da Silva Lorenzetti Andreis  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul  
Câmpus Caxias do Sul

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.

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 (*Directed Relation Graph*) 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.

Após a análise deste grafo, que inicia em certas espécies pré-selecionadas (combustível, oxidante e principais poluentes), espécies não alcançadas pela análise são consideradas não importantes e removidas do mecanismo, gerando um mecanismo esqueleto.

O grau de acoplamento é obtido pela expressão  $r_{AB} = \frac{\sum_{i=1,N} |v_{A,i} w_i \delta_{Bi}|}{\sum_{i=1,N} |v_{A,i} w_i|}$ , onde  $r_{AB}$  é o coeficiente de contribuição normalizado,  $N$  o número de reações no sistema,  $v_{A,i}$  o coeficiente estequiométrico da espécie  $A$  na reação  $i$ ,  $w_i$  a taxa de reação da reação  $i$ , e  $\delta_{Bi}$  vale 1 se a espécie  $B$  é um reagente na reação  $i$ , e zero em caso contrário. O coeficiente de contribuição normalizado entre cada par de espécies é um elemento de uma matriz. Cada elemento satisfaz a relação  $0 \leq r_{AB} \leq 1$ . Se  $r_{AB}$  e  $r_{BA}$  possuem valores altos, significa que as espécies  $A$  e  $B$  são acopladas. Nesse caso, essas espécies devem ser mantidas no mecanismo.

A taxa de reação  $w_i$  é dada pela expressão  $w_i = k_i \prod_{j=1,n} [A_j]^{v_{j,i}}$ , onde  $[A_j]$  representa a concentração da espécie  $A_j$ ,  $n$  é o número de espécies, e o coeficiente da taxa de reação é obtido através da equação modificada de Arrhenius  $k = AT^\beta e^{-E_a/RT}$ , onde  $A$  é o fator de frequência,  $T$  a temperatura,  $\beta$  o expoente da temperatura,  $E_a$  a energia de ativação, e  $R$  a constante dos gases ideais.

Este trabalho consiste na implementação do método DRG para a análise do acoplamento entre as espécies presentes no mecanismo de combustão do metano, propondo um mecanismo cinético esqueleto para este combustível. A automatização deste processo vem sendo desenvolvida em Scilab, que é um software gratuito e de fácil programação. Os resultados serão comparados com resultados encontrados na literatura.

O trabalho faz parte 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 também explorar softwares matemáticos.