



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	Análise de autovalores e autovetores para a obtenção de um mecanismo cinético reduzido para a combustão do metano através da análise de sensibilidade
Autor	MARIANE DE MACEDO MASCARELLO
Orientador	GREICE DA SILVA LORENZZETTI ANDREIS
Instituição	INSTITUTO FED EDUCACAO, CIENCIA E TECNOL DO RIO GRANDE DO SUL - CAXIAS DO SUL

Análise de autovalores e autovetores para a obtenção de um mecanismo cinético reduzido para a combustão do metano através da análise de sensibilidade

Mariane de Macedo Mascarello, Greice da Silva Lorenzetti Andreis
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul
Câmpus Caxias do Sul

A Cinética Química estuda a velocidade das reações químicas e os fatores que a influenciam. Medir a velocidade de uma reação significa medir a quantidade de reagentes que são consumidos ou a quantidade de produtos que se forma, por unidade de tempo. Para que as reações ocorram é necessário que os reagentes tenham afinidade química, que é uma tendência natural, e contato. Quanto maior o contato entre os reagentes, mais rápida é a reação. Outros fatores também influenciam a velocidade de uma reação, como a concentração de reagentes, a variação de temperatura, a pressão e a presença de catalisadores.

Uma reação química passa por várias etapas até que seus reagentes sejam consumidos, sendo chamadas de reações elementares. Um mecanismo de reação é um conjunto de reações elementares, que também pode ser representado por uma reação global. A combustão perfeita do metano, por exemplo, é representada pela reação global $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$. Uma reação de combustão é uma reação entre combustível (material oxidável) e comburente (geralmente O_2) acompanhados de uma fonte de ignição. Toda reação de combustão é um reação exotérmica, ou seja, libera energia em forma de calor e/ou luz.

Como os mecanismos cinéticos que descrevem a combustão são formados por inúmeras etapas elementares, mecanismos de reação simplificados são adotados para descrevê-la. A redução de mecanismos cinéticos é realizada utilizando o conceito de sensibilidade ou o conceito de taxa de reação. Dentre os métodos desenvolvidos na literatura para remover reações menos importantes de mecanismos cinéticos destaca-se a análise de sensibilidade, que avalia a resposta do modelo devido a alterações em um ou mais parâmetros.

Um processo químico pode ser descrito pelo sistema de equações diferenciais cinéticas $d\mathbf{c}/dt = \mathbf{f}(\mathbf{c}, \mathbf{p})$, com $\mathbf{c}(0) = \mathbf{c}_0$, onde $\mathbf{c}(t)$ representa o vetor das concentrações, t o tempo, $f_i(\mathbf{c}, \mathbf{p}) = \sum_j (v_{ij}w_j)$, v_{ij} o coeficiente estequiométrico da espécie i na reação j , w_j a taxa de reação da reação j , \mathbf{p} o vetor dos parâmetros cinéticos (coeficientes das taxas de reação, parâmetros de Arrhenius, temperatura, pressão, etc.), e \mathbf{c}_0 o vetor das concentrações iniciais. As equações diferenciais para os coeficientes de sensibilidade local da concentração são obtidos pela diferenciação das equações cinéticas com respeito aos parâmetros, ou seja, $d\mathbf{S}/dt = \mathbf{J} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{F}$ com $(\partial \mathbf{c} / \partial \mathbf{p})(0) = 0$, onde o coeficiente de sensibilidade local $\mathbf{S} = dc_i/dp_i$ é a aproximação linear da variação da concentração da espécie i no tempo t_2 causada pela variação do parâmetro j no tempo t_1 , $\mathbf{F} = \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{p}_j$, e \mathbf{J} é a matriz Jacobiana. Uma melhor descrição para a interdependência entre os parâmetros e as concentrações consiste na identificação dos grupos de parâmetros que têm influência sobre um grupo de concentrações. Esse tipo de informação é dado pela análise da matriz de sensibilidade normalizada da concentração. A matriz de sensibilidade normalizada é escrita como $\tilde{\mathbf{S}} = (\partial \ln c_i) / (\partial \ln p_i)$. Estes coeficientes representam a variação percentual na concentração c_i causada por uma variação percentual de p_i . Os autovetores da matriz $\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$ identificam os grupos de parâmetros cujos autovalores informam-nos sobre a eficácia desses grupos de parâmetros para a variação das concentrações das espécies.

Este trabalho consiste no estudo dos autovalores e autovetores para a obtenção de um mecanismo cinético reduzido para a combustão do metano a partir da análise de sensibilidade. A implementação numérica vem sendo desenvolvida em Scilab. 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.