SIMULAÇÃO NUMÉRICA E OTIMIZAÇÃO DO MECANISMO DE REAÇÕES DO SISTEMA REAGENTE "S + O + H + (N)"[1]

Ângela Patricia Spilimbergo[2], Gilmar de Oliveira Veloso[3]. UNIJUÍ

À modelagem matemática da combustão no meio "S + O + H + (N)" são dedicadas diferentes publicações, pois, atualmente o carvão é utilizado com muita freqüência como combustível. É conhecido que os produtos de combustão do carvão contêm poluentes, entre os quais os mais nocivos são as espécies com o enxofre (SO_x, H_2S, etc.). Para prever as concentrações dos poluentes é necessário utilizar algum mecanismo de reações. Mas, estes mecanismos, são sem dúvida nenhuma, bastantes complexos, sendo constituídos de até 30 espécies e 130 reações. Portanto, pode-se colocar que existe o problema de otimização do mecanismo da combustão. No trabalho a ser apresentado são considerados alguns aspectos da resolução deste problema, a saber:
- a simulação numérica da combustão no meio "S + O + H + (N)," por mecanismos completos de reações (em condições de mistura ideal), em amplos intervalos da temperatura e da composição;
- uma abordagem que inclui a técnica de eliminação dos caminhos de pouca importância e a análise de sensibilidade. No resultado é formado o mecanismo otimizado;
- a simulação numérica com o mecanismo otimizado e a comparação dos resultados com os resultados calculados pelo mecanismo completo.
No trabalho é mostrado que o mecanismo de reações do meio "S + O + H + (N)", pode ser reduzido essencialmente nos intervalos da temperatura e da composição pesquisados.

[1]Projeto de Pesquisa Institucional - DeFEM
[2]Coordenadora do Projeto de Pesquisa, Professora Mestre do DeFEM
[3]Professor Doutor do DeFEM