



## REDUÇÃO DO MECANISMO DE REAÇÕES PARA O MEIO REAGENTE “C+H+O+N”.<sup>1</sup>

Ângela Patricia Grajales Spilimbergo<sup>2</sup>, Viktor G. Krioukov<sup>3</sup>. UNIJUÍ

O meio reagente do tipo “C+H+O+N” é encontrado em instalações energéticas, em processos tecnológicos, em motores de automóveis, etc. O mecanismo de combustão desse meio reagente é bastante complexo e pode conter mais de 200 reações e de 50 espécies. A introdução direta deste mecanismo, em problemas bi ou tridimensionais, conduz a gigantescos volumes computacionais que só podem ser realizados em supercomputadores. Ao mesmo tempo é conhecido que a maioria das reações e espécies apresenta pouca influência nos processos de combustão e podem não serem levadas em conta. Por isso, foram desenvolvidos diferentes métodos para a redução dos mecanismos, onde entre eles pode-se destacar: o método de análise de velocidades; o método PCA; o “intrinsic low-dimensional manifold method”, etc. Em trabalhos anteriores foi apresentado o método de engajamento, cujo objetivo é formar mecanismos reduzidos e também foram desenvolvidas pesquisas numéricas para o meio “C+H+O+N” para um regime de combustão que considerou  $\alpha_{OX} = 1$ ,  $P = 1$  atm e  $T_0 = 1400, \dots, 2000$  K. No presente trabalho apresentam-se os resultados para este mesmo meio, mas dentro de uma ampla área de alteração de  $\alpha_{OX}$ ,  $P$  e  $T$ . A redução de qualquer mecanismo completo (C-mecanismo), neste trabalho, é realizada pelo esquema do reator de mistura ideal que se apresenta neste modelo pelas equações da cinética química na forma exponencial e da energia, aplicada no modelo na forma integral. O cálculo dos processos de combustão no reator inicia no estado de equilíbrio químico até o momento de estabelecimento do estado estacionário, que se caracteriza por desequilíbrio químico. No resultado da análise das velocidades das reações do mecanismo completo (C-mecanismo) pode-se dizer que no estado estacionário o método de engajamento forma um mecanismo reduzido somente com as reações mais notáveis. No método utiliza-se um indicador de redução do mecanismo, que se encontra no intervalo  $\zeta = 0, \dots, 1$  e é estabelecido pelo usuário. Em todos os casos do cálculo são fornecidos: o indicador do mecanismo  $\zeta$ , os símbolos dos reagentes, os símbolos dos principais produtos de combustão e das espécies que são interessantes para o pesquisador. Inicialmente todos os mecanismos são constituídos apenas por substâncias e nenhuma reação. Mas, no andamento do cálculo, os mecanismos reduzidos vão sendo preenchidos por reações. As simulações numéricas foram realizadas para o bipropelente “CH<sub>4</sub> + ar” na região  $\alpha_{OX}=1, \dots, 1.5$   $P=1, \dots, 16$  atm;  $T_0=1400, \dots, 2000$  K com o indicador de redução  $\zeta = 0.4$ . Foi gerado o mecanismo reduzido e em relação às reações houve redução em 4 vezes e em relação às espécies em 1.5 vezes. Este mecanismo permite computar (em comparação com o C-mecanismo) as principais características de combustão (temperatura, concentrações CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O e CO) com erros insignificantes. Mas na previsão do poluente NO observam-se erros consideráveis.



1 Pesquisa Institucional Docente

2 Professora do DeFEM - Departamento de Física, Estatística e Matemática da UNIJUÍ

3 Pesquisador Colaborador - Universidade Estatal Técnica de Kazan / UETK - Rússia



Para uma VIDA de CONQUISTAS