



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	Análise dos coeficientes das taxas de reação para a redução de mecanismos cinéticos utilizando programação em Scilab
Autor	EDUARDO BOFF RIBEIRO
Orientador	GREICE DA SILVA LORENZZETTI ANDREIS
Instituição	Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul-IFRS- Câmpus Caxias do Sul

O projeto de pesquisa “Desenvolvimento de mecanismos cinéticos reduzidos para a simulação de chamas e a utilização de softwares matemáticos para sua interpretação” tem como objetivo obter mecanismos cinéticos reduzidos para diferentes combustíveis e também explorar softwares matemáticos. O estudo apresentado aqui consiste na utilização do Scilab para a análise da ordem de magnitude dos coeficientes das taxas de reação de mecanismos cinéticos detalhados, contribuindo na obtenção de mecanismos cinéticos reduzidos.

As simulações computacionais com mecanismos cinéticos detalhados são complicadas pela existência de radicais altamente reativos que induz a uma rigidez significativa para o sistema de equações governantes, devido às diferenças nas escalas de tempo das conversões entre espécies. Consequentemente, existe a necessidade de desenvolver, a partir desses mecanismos detalhados, os correspondentes mecanismos reduzidos com menos variáveis e rigidez moderada, mantendo a precisão e a abrangência dos mecanismos cinéticos detalhados.

Os mecanismos cinéticos são formados por inúmeras etapas elementares. Para a oxidação do hidrogênio são usadas frequentemente 9 espécies e 19 reações elementares, enquanto que para a oxidação do iso-octano são utilizadas 3600 reações elementares entre 800 espécies químicas, aumentando drasticamente o número de equações a serem resolvidas. Dessa forma, mecanismos de reação simplificados são frequentemente adotados para descrever o processo de combustão.

Um mecanismo cinético reduzido pode ser determinado obtendo inicialmente um mecanismo esqueleto, e depois aplicando, por exemplo, as hipóteses de equilíbrio parcial e regime permanente para obter um mecanismo cinético reduzido. Os mecanismos esqueleto são obtidos através de métodos que removem as espécies e reações de menor importância do mecanismo detalhado, como através das análises de sensibilidade, da componente principal, do Jacobiano e do método DRG (*Direct Relation Graph*).

O DRG, que é um método baseado na teoria dos grafos, é capaz de identificar e eliminar, rapidamente e automaticamente, as espécies menos importantes com alto grau de precisão. O método DRG mapeia o acoplamento entre as espécies de um mecanismo cinético em um grafo direcionado. Após a análise desse 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 $r_{AB} = \frac{\sum_{i=1,N} |v_{A,i} w_i \delta_{B,i}|}{\sum_{i=1,N} |v_{A,i} w_i|}$, 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 $\delta_{B,i}$ 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.

O cálculo da taxa de reação w_i é obtido 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, β o expoente da temperatura, E_a a energia de ativação, e R a constante dos gases ideais.

O trabalho consiste em determinar a ordem de magnitude dos coeficientes das taxas de reação através da equação modificada de Arrhenius, para posteriormente incluir esses resultados na análise realizada pelo método DRG. No momento, o projeto apresenta-se em fase inicial. A automatização do processo está sendo realizada com a utilização de programação em Scilab, por esse ser um software gratuito e de fácil programação.