



MÉTODO DE ENGAJAMENTO APLICADO NUMA REGIÃO DE ALTERAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MEIO REAGENTE ¹

Angela Patricia Grajales Spilimbergo²

Este trabalho refere-se ao problema da redução dos mecanismos de reações envolvidas no processo de combustão. À modelagem matemática da combustão de meios reagentes que contém enxofre em sua constituição são dedicadas diferentes publicações, pois atualmente o carvão é utilizado com muita frequência como combustível. É conhecido que os produtos de combustão do carvão contêm poluentes entre os quais os mais nocivos são as espécies com enxofre (SO_x , H_2S , etc.). Para prever as concentrações dos poluentes é necessário utilizar algum mecanismo de reações (conjunto de substâncias que constituem o meio reagente, mais as reações químicas que ocorrem nesse meio). Mas, estes mecanismos, são sem dúvida nenhuma, bastantes complexos pois são constituídos por dezenas de espécies e centenas de reações. A simulação numérica destes meios reagentes para fluxos unidimensionais não é uma tarefa difícil, mas a modelagem dos fluxos bi e tri-dimensionais, destes meios reagentes, consistem em um problema considerável, devido ao grande número de espécies e reações envolvidas na simulação. Devido a isso surgiu uma abordagem para reduzir o número de reações deixando no mecanismo somente as reações importantes, que realmente influem nas características dos fluxos. Esta abordagem foi realizada através de várias técnicas, como por exemplo: método das perturbações, análise dos principais componentes, etc. Portanto, pode-se colocar que existe o problema de otimização do mecanismo da combustão. O método de “engajamento”, apresentado em trabalhos anteriores, que visa realizar a otimização do mecanismo da combustão, neste trabalho, é desenvolvido para uma zona de alterações dos parâmetros do meio reagente. A formação do mecanismo reduzido é realizada no esquema do reator de mistura ideal. Foram realizadas simulações numéricas para o meio reagente “S + H + O + (N)”. Foi obtido um mecanismo reduzido para a zona dos intervalos de excesso do oxidante, da temperatura e da pressão. O mecanismo original foi reduzido em três vezes, sem perda na precisão dos resultados.

¹ Projeto de Pesquisa Institucional

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