



MÉTODO DO ENGAJAMENTO: REDUÇÃO DO MECANISMO DE REAÇÕES PARA O MEIO REAGENTE C + H + O + N¹

Angela Patricia Grajales Spilimbergo²

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 tridimensional pode conduzir 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. Devido a isso pesquisadores, já há algum tempo, realizam a redução dos mecanismos de reações utilizando muitas vezes a intuição e a experiência. Mas com o aumento da complexidade dos esquemas cinéticos este tipo de procedimento torna-se menos seguro e cresce a probabilidade de erros. Assim, foram publicados numerosos trabalhos onde são propostos 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 proposto o método de engajamento para formar os mecanismos reduzidos para uma zona da alteração dos parâmetros considerados e também foram apresentados os mecanismos reduzidos para o meio reagente H+O+S+(N). No presente trabalho, para o meio reagente C+H+O+N foram desenvolvidas pesquisas análogas as já realizadas, além de serem calculados e analisados também os coeficientes de sensibilidade. A formação do mecanismo reduzido, para o meio C+H+O+N foi realizada no esquema do reator de mistura ideal e foi obtido um mecanismo reduzido para um amplo intervalo de excesso do oxidante, da temperatura e da pressão. O mecanismo original foi reduzido em três vezes sem perdas na precisão dos resultados.

¹ Pesquisa Institucional Docente

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