



Sessão de Ciência da Computação e Matemática
Dia 05/06/12 - 08h00 às 12h00
Unila-Centro - Sala 15 - 3º Piso



Aplicação do método REDIM para a simulação computacional da combustão do biogás

Alexandre Marcondes

Bolsista do Programa de Bolsas de Iniciação Científica da UNILA (PROBIC)

Contato: alexandre.marcondes@unila.edu.br

Pedro Henrique de Almeida Konzen

Orientador

Juan de Dios Garrido Arrate

Coorientador

RESUMO

O biogás é uma fonte de energia renovável obtida através da biodigestão anaeróbia de dejetos animais ou vegetais, ou também obtido através da decomposição dos dejetos depositados em aterros sanitários. Através da combustão computacional podemos analisar a cinética química da combustão do biogás e buscar formas de otimizar seu rendimento, aumentar seu potencial calorífico e também reduzir a emissão de poluidores. Um mecanismo cinético típico da combustão do biogás contém dezenas de espécies e centenas de reações químicas, o que torna cara a simulação computacional deste processo para muitas aplicações práticas. Afim de reduzir a demanda computacional, existem métodos de simplificação desses mecanismos. Neste trabalho, investigamos a construção de mecanismos químicos reduzidos para a combustão biogás/ar através do método REDIM (*Reaction-Diffusion Manifold*). Este é um método de redução automática de mecanismos químicos baseado na estrutura multi-escalar dos fluxos reativos e na hipótese da decomposição do sistema dinâmico em modos rápidos e lentos. Uma grande vantagem desse método é o tratamento do acoplamento entre a cinética química e os fenômenos de transporte. O primeiro passo de nosso trabalho foi a escolha da composição do biogás para ser usado como mistura combustível em nossos cálculos. Para tanto, trabalhamos com a mistura de 60% de metano (CH_4), 39% de dióxido de carbono (CO_2) e 1% de nitrogênio (N_2), a qual é típica dos biogases produzidos no oeste do Paraná a partir de dejetos de suínos. Como oxidante consideramos o ar puro (79% N_2 + 21% O_2). Em seguida, uma série de chamas unidimensionais *counterflow* foram simuladas empregando mecanismo químico detalhado. Aqui, o programa computacional INSFLA foi utilizado. Tais chamas foram utilizadas para construir condições iniciais para a inicialização dos cálculos REDIM. Estes foram feitos com o programa computacional HOMREA. Por fim, dois mecanismos reduzidos foram gerados, um unidimensional e outro bidimensional. O sucesso na obtenção de tais mecanismos simplificados nos permite concluir a alta aplicabilidade da técnica REDIM na geração de mecanismos reduzidos para a combustão de biogás/ar. Entre os objetivos futuros deste trabalho está o tratamento das tabelas REDIM geradas para a simulação de chamas laminares biogás/ar, podendo comparar as chamas com outros mecanismos de redução química e até realizar a comparação com mecanismos reais de combustão.

Palavras-chave: combustão, *counteflow*, REDIM, biogás, mecanismo reduzido.