

## Introdução

Um mecanismo cinético típico da combustão do biogás contém dezenas de espécies e centenas de reações químicas. Afim de reduzir a demanda computacional de simulação de chamas existem métodos de simplificação desses mecanismos. Neste trabalho avaliamos a técnica REDIM (*Reaction-Diffusion Manifold*) para a geração de mecanismos químicos reduzidos.

## Objetivo Geral

Geração de mecanismos químicos reduzidos para a simulação computacional de chamas biogás/ar.

## Objetivos Específicos

- Estudar a composição dos biogases da região da tríplice fronteira;
- Avaliar a aplicação de mecanismos de oxidação de metano para o caso biogás/ar;
- Utilizar e avaliar a técnica REDIM para chamas biogás/ar.

## Materiais e Métodos

- Código computacional INSFLA: simulação computacional de chamas *counterflow* unidimensionais;
- Código computacional HOMREA: inicialização dos cálculos REDIM;
- Método REDIM: 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.
- O método REDIM tem como principal vantagem o acoplamento entre cinética química e os fenômenos de transporte.

## Equação REDIM

Um escoamento reativo pode ser descrito pelo seguinte sistema de equações escrito na notação vetorial geral:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = F(\Psi) - u \cdot \text{grad}(\Psi) - \frac{1}{\rho} \text{div}(D \cdot \text{grad}(\Psi)) \equiv \Phi(\Psi)$$

Onde  $\Psi$  é o vetor dado por:

$$\Psi = (h, p, \phi_1, \dots, \phi_{(n_p)})$$

Aplicando o conceito de variáveis invariantes, e assumindo que a variedade é definida por:

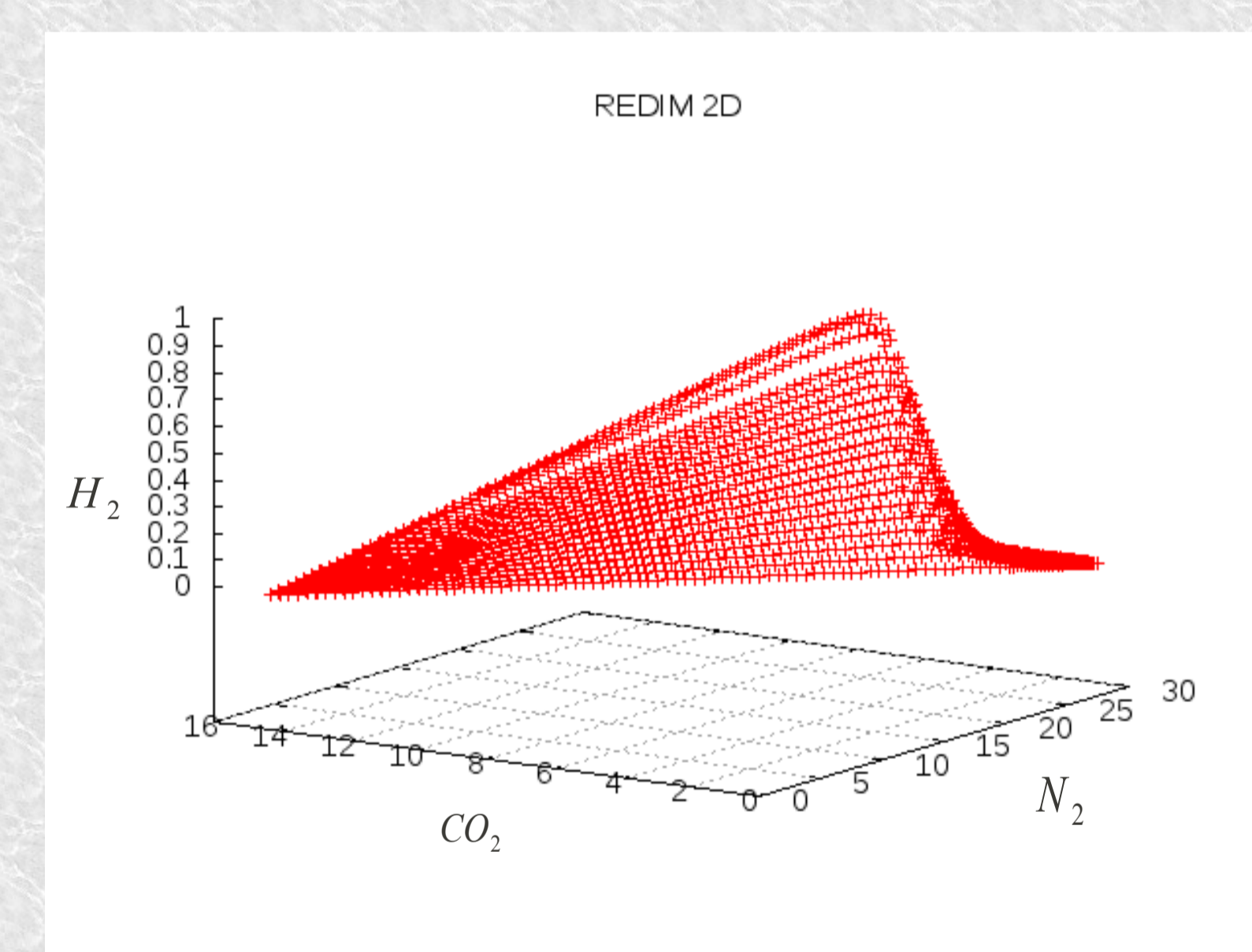
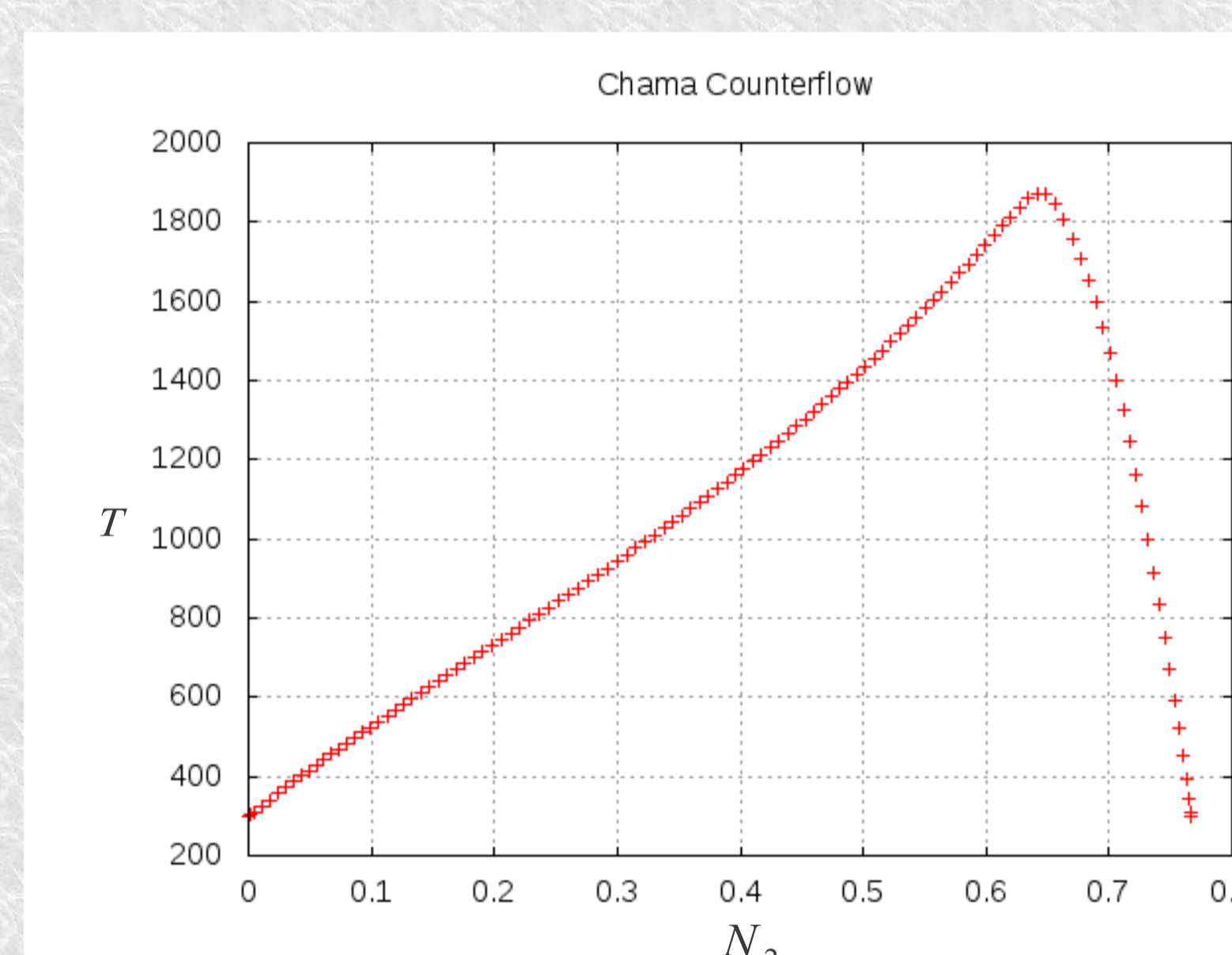
$$M = \{ \Psi : \Psi = \Psi(\theta), \Psi : \mathbb{R}^{m_s} \rightarrow \mathbb{R}^n \}$$

Onde  $\Psi(\theta)$  é uma função explícita e  $\theta$  é um vetor  $m_s$ -dimensional das coordenadas locais que parametrizam a variedade. Assim, obtêm-se a equação REDIM:

$$\frac{\partial \Psi(\theta)}{\partial t} = (I - \Psi_\theta \Psi_\theta^+) \cdot [F(\theta) - \frac{d}{dt} \Psi_{\theta\theta} \circ \text{grad}(\theta) \circ \text{grad}(\theta)]$$

$$\Psi^0 = \Psi^{ext}(\theta)$$

## Resultados e discussões



- O sucesso na geração dos mecanismos reduzidos nos permite concluir que o método REDIM é de alta aplicabilidade para a simulação da combustão de biogás/ar.

## Referências bibliográficas

- [1] KONZEN, P.H.A. *Simulação Numérica de Chama Laminar Axisimétrica de Metano/Ar usando REDIM*. Tese de doutorado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), 2010.
- [2] Bykov, V.; Maas, U. *The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds*. *Combustion Theory and Modelling* 11, 6 (2007), 839–862.