HAL open science

Estudo de mecanismos de cinética química detalhados via tabulação adaptativa in situ

Americo Cunha Jr, Luís Fernando Figueira da Silva

To cite this version:

Americo Cunha Jr, Luís Fernando Figueira da Silva. Estudo de mecanismos de cinética química detalhados via tabulação adaptativa in situ. XIV Congresso Nacional de Estudantes de Engenharia Mecânica (CREEM 2007), Aug 2007, Uberlândia, Brazil. ⟨hal-01487369⟩

HAL Id: hal-01487369

https://hal.science/hal-01487369v1

Submitted on 11 Mar 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Copyright

Copyright - All rights reserved

ESTUDO DE MECANISMOS DE CINÉTICA QUÍMICA DETALHADOS VIA TABULAÇÃO ADAPTATIVA *IN SITU*

Americo Barbosa da Cunha Junior, Luís Fernando Figueira da Silva
Departamento de Engenharia Mecânica
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC-Rio
Rua Marques de São Vicente, 225, Gávea - Rio de Janeiro, RJ - Brasil - 22453-900.
{americojunior, luisfer}@mec.puc-rio.br

RESUMO

Neste trabalho é descrita uma nova metodologia computacional para o tratamento de mecanismos detalhados de cinética química. Esta técnica permite uma redução de até três ordens de grandeza no tempo de cálculo necessário para solução de problemas utilizando mecanismos cinéticos detalhados. Um código para implementação da metodologia encontra-se em desenvolvimento.

Palavras-chave: combustão, cinética química.

INTRODUÇÃO

O estudo da combustão requer a descrição dos mecanismos cinéticos das reações químicas elementares envolvidas no processo. Tipicamente um mecanismo detalhado de cinética química para a descrição da reação de hidrocarbonetos com ar envolve algumas dezenas de espécies, centenas de reações elementares e escalas de tempo que variam em até nove ordens de grandeza. A solução de um mecanismo detalhado de cinética química é demasiadamente custosa, do ponto de vista computacional, o que leva a necessidade de desenvolver técnicas que permitiam a redução do custo computacional do problema. Uma metodologia que vem sendo utilizada com sucesso, permitindo a redução do tempo de computação em até três ordens de grandeza, é a tabulação adaptativa *in situ* (ISAT), (Pope, S. B., 1997), objeto deste estudo

OBJETIVOS

Este trabalho tem por objetivo estudar, implementar e validar a técnica de tabulação ISAT. Posteriormente pretende-se utilizar esta técnica em um código computacional existente para solução de problemas de combustão. Os testes de verificação e validação do funcionamento serão realizados mediante comparação com resultados experimentais e numéricos existentes na literatura.

METODOLOGIA

A técnica ISAT de redução de custo computacional consiste num procedimento de armazenamento e recuperação, via tabela, dos resultados obtidos por integração direta da evolução dinâmica do sistema. No contexto de cinética química, esta informação é a composição química da mistura, cuja taxa de evolução é dada lei de Arrhenius.

Uma particularidade deste método é a construção da tabela de dados durante a execução do algoritmo, *i.e.*, não se conhece o caminho percorrido *a priori*. Assim, o método ISAT se torna mais eficiente quando a informação armazenada é necessária varias vezes ao longo do tempo.

O armazenamento das informações é feito numa árvore binária. Cada folha da árvore binária guarda as seguintes informações: composição química inicial, sua taxa de reação química integrada, o gradiente da taxa, uma matriz unitária associada à região de precisão, que tem a forma de um hiper-elipsóide e um vetor com os semi-eixos deste hiper-elipsóide.

A medida que as taxas de reação dos reagentes presentes no escoamento reativo são integradas, composições "próximas" à composição inicial são armazenadas na árvore binária. A árvore é iniciada como uma simples folha, quando a primeira composição é calculada. Para as entradas seguintes o algoritmo busca na árvore até que uma folha é alcançada. Se a composição estiver na região de precisão, uma interpolação linear é utilizada para aproximar a taxa de reação. A segunda situação que pode ocorrer é a composição não estar situada na região de precisão, caso em que a taxa de reação é integrada diretamente. Após a integração o erro é medido, duas situações são possíveis:

1. O erro é menor do que o critério de tolerância estabelecido, neste caso a região de precisão aumenta;
2. O erro é maior do que o critério de tolerância estabelecido, neste caso uma nova entrada é gerada e armazenada na árvore binária. Esta nova entrada é baseada na composição determinada nesta etapa. Além desta entrada um plano de corte é definido, e a folha original é substituída por um nó que contém o plano de corte. A folha esquerda deste nó tem a composição correspondente à composição original desta etapa e a folha direita contém a nova composição armazenada.

RESULTADOS

Uma compreensão da técnica ISAT foi alcançada ao longo do trabalho pelo estudo de (Pope, S. B., 1997).

Se encontra em fase de validação um código computacional que implementa o método ISAT para tabulação de mecanismos detalhados de cinética química.

CONCLUSÕES

O estudo teórico permitiu uma maior compreensão da metodologia empregada.

A técnica descrita oferece uma elevada relação custo/benefício no tratamento de problemas complexos de combustão, pois fornece resultados de acurácia satisfatória em tempo viável de computação.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Guenther Carlos Krieger Filho e a equipe do Laboratório de Engenharia Térmica e Energia da USP, pelo código que serviu de base ao que se encontra em desenvolvimento e pela hospitalidade. Ao CNPq/PIBIC pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

Pope, S. B., 1997, "Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation", Combustion Theory Modelling, Vol. 1, pp 41-63.