

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

**Aluno: Americo Barbosa da Cunha Junior**  
**Orientador: Luís Fernando Figueira da Silva**

## 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 permitam 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), [1], 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, [2].

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 várias 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 [1].

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**

- 1 - POPE, S. B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using *in situ* adaptive tabulation. **Combustion Theory Modelling**, v.1, p. 41-63, 1997.
- 2 - WILLIAMS, F. A. **Combustion theory: the fundamental theory of chemically reacting flow systems**. 2nd ed. Cambridge: Perseus books, 1985. 680 p.