

1 Introdução

A combustão é um processo de extrema importância para a indústria no que diz respeito à produção de energia e à indesejável e inevitável produção de poluentes. O engenheiro tem como principal objetivo otimizar os processos que utilizam a combustão, maximizando a transformação da energia contida nas ligações químicas do combustível em energia interna e minimizando a poluição gerada; neste âmbito, a simulação numérica de processos de combustão torna-se de suma importância.

Por esse motivo, nos últimos 30 anos, a simulação numérica dos processos de combustão tem sido objeto de grande desenvolvimento. Em particular, é de grande importância que modelos capazes de escrever a cinética química detalhada e realista sejam incorporados em cálculos para a obtenção de previsões confiáveis de quantidades termoquímicas, especialmente no que diz respeito à formação de poluentes como NO_x , CO e particulados e, também, situações críticas de extinção de chama e de ignição.

No entanto, um modelo de combustão que descreve fielmente os processos físico-químicos apresenta, como principal dificuldade, o enorme esforço computacional necessário para a solução das equações não lineares, envolvendo um grande número de variáveis e escalas espaço-temporais, que descrevem transporte de energia, massa e momento. Na maioria das vezes, a grande parte dessa carga computacional está associada às leis de Arrhenius contidas nos termos fontes.

Como o custo computacional associado ao uso de mecanismos detalhados para descrever a cinética química da combustão é inerentemente elevado, o propósito desta dissertação é reduzir estes custos mediante ao uso de uma técnica automática (*In Situ Adaptive Tabulation* – ISAT (Pope, 1997)) de tabulação de mecanismos de cinética química da combustão. Em particular, objetiva-se reduzir os custos de armazenamento associados à técnica, o tempo de simulação e melhorar a acurácia das respostas obtidas. Para tanto, uma nova estratégia de

tabulação é proposta e testada para os sistemas reativos CO/O₂ e CH₄/ar, utilizando um modelo de reator do tipo PMSR (*pairwise-mixing stirred reactor*). Os resultados obtidos visam caracterizar os ganhos no desempenho obtido com o uso de uma nova estratégia de tabulação no algoritmo.

1.1. Objetivo

O objetivo desta dissertação é apresentar e caracterizar, de modo sistemático através de diversos testes realizados para a combustão do monóxido de carbono com oxigênio, uma modificação da estratégia de tabulação *in situ* (ISAT). Esta estratégia foi implementada em um programa desenvolvido na PUC-Rio (Cunha, 2010) (Cunha e Figueira da Silva, 2010), e tem com foco a redução dos custos de armazenamento, de tempo de simulação e a melhora na acurácia das respostas. O estudo da nova estratégia em alguns casos de combustão do metano com ar visa exemplificar os benefícios trazidos pela modificação do algoritmo, em um sistema termoquímico de interesse para diversas aplicações.

1.2. Estrutura da Dissertação

Esta dissertação é dividida em 5 capítulos, é abordada da seguinte maneira, além do presente capítulo de introdução:

Capítulo 2 - Apresentação do estado da arte de técnicas de redução, este capítulo é subdividido em 4 seções, as quais apresentam trabalhos referentes à técnica ISAT, a algumas técnicas que consideram a estrutura da chama de combustão e outras que não fazem nenhuma hipótese a respeito de tal estrutura. A última subseção apresenta a conclusão parcial da revisão bibliográfica.

Capítulo 3 - Fundamentação teórica dos elementos que descrevem a técnica ISAT implementada, as modificações realizadas no algoritmo original, visando um melhor desempenho do mesmo, os dados de entrada e os cuidados na escolha de cada um deles.

Capítulo 4 - Discussão dos resultados obtidos com a modificação no algoritmo. Apresenta-se o estudo da influência na simulação da escolha da semente dos processos estatísticos quando o algoritmo original é utilizado. Os

resultados e discussões são apresentados para duas diferentes situações: uma em que a árvore de busca binária fica saturada com as entradas e outra em que isso não ocorre. Em cada um desses casos, dois tipos de reatores são utilizados na simulação da combustão.

Capítulo 5 - Descrição das conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.