

Estudo da formação de poluentes via simulação numérica de modelos cinéticos de frações da gasolina.

Rodrigo do Patrocínio Maia¹(PG). Leonardo Baptista* (PQ)

¹rodrigopmaia@outlook.com

¹ Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Rua São Francisco Xavier 524, Rio de Janeiro

*Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Tecnologia, Departamento de Química e Ambiental, Rodovia Presidente Dutra Km 298, Resende - RJ

Palavras Chave: Emissões, Fuligem, Material Particulado, modelo cinético, Combustão etanol-gasolina.

Abstract

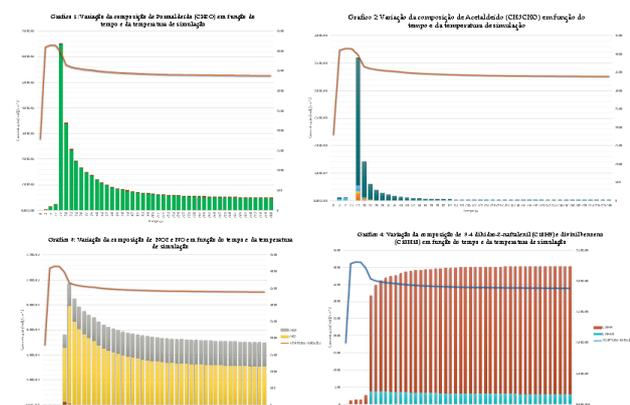
Study of pollutant formation using numerical simulations of kinetic models of gasoline fractions. In this study the formation of pollutants during gasoline combustion will be simulate using kinetic models.

Introdução

Já é conhecido que o processo de combustão emite, além de outros poluentes, material particulado (PM). Este inclui espécies como Carbono Negro, hidrocarboneto policíclicos aromáticos (HPA) e Nitro-HPA ^{1, 2, 3, 4}, todos perigosos para saúde humana. Por este motivo, este estudo pretende prever a formação de poluentes, por meio de simulação do modelo cinético que descreve a combustão da gasolina. A integração numérica das equações de velocidade, obtidas a partir de cada reação química que descreve o modelo de combustão, será realizada utilizando o programa Kintecus[®]. O modelo cinético escolhido foi o proposto por Marinov ⁵ associado ao modelo de Mehl ⁸, resultando em um mecanismo de reações composto por 1208 espécies e 8728 reações químicas.

Resultados e Discussão

Os Gráficos 1,2,3 e 4 apresentam as variações das composições em função da temperatura ao longo do tempo de simulação, para temperatura inicial de 1800 K e condições estequiométricas de combustível e comburente. A temperatura de ignição (inflexão da curva) é 3526 K e é atingida em 3,47 μ s.



Foi considerado como combustível a mistura etanol-gasolina de 125 cm³ de volume total contendo 27%v/v de etanol. Pode-se observar o aparecimento das seguintes espécies no intervalo de 16,7 μ s: acetileno (C₂H₂) e etileno (C₂H₄). No Gráfico 1 observamos a variação da composição do formaldeído (CH₂O) onde a concentração final encontrada é de 20,37 ppm. No Gráfico 2 está representado a variação da composição do acetaldeído (CH₃CHO) onde encontrou-se uma concentração final de 325 ppb. O Gráfico 3 representa as variações das composições de NO e NO₂ em função do tempo de reação. No gráfico 4 a variação da composição de divinilbenzeno (C₁₀H₁₀) e a concentração máxima estimada é de 132,15 ppb e 3-4 dihidro-2-naftalenil (C₁₀H₈) na concentração de 1,51 ppb. O máximo de concentrações é o obtido em 181 μ s de simulação.

Conclusões

A partir da simulação foi possível estimar a concentração de algumas espécies formadas em diferentes condições de combustão. Como era de se esperar uma grande parte dos produtos gerados foi CO₂, CO, formaldeído. No entanto também foram encontrados outros produtos como acetileno, etileno, metanol, NO, NO₂ e compostos aromáticos como divinilbenzeno(C₁₀H₁₀) e o 3-4 dihidro-2-naftalenil.

Agradecimentos

CAPES, FAPERJ, CNPq e UERJ.

1. Tang, N. *et al. Atmos. Environ.*, 2005, 5817–5826.
2. Silva, L. F. O. *et al. Sci. of The Total Environ.*, 2009, 4972–4974.
3. Oliveira, M. L. S. *et al. Sci. of The Total Envir.*, 2014, 1128–1137.
4. Ribeiro, J. *et al. Sci. of The Total Envir.*, 2010, 6032–6041.
5. Marinov, N. M. *et al. Comb. and Fla.*, 1998, 192–213.
6. Mehl, M. *et al. J. Proc. Comb. Inst.*, 2012, 193–200.