

# ANALISE COMPUTACIONAL DAS CONDIÇÕES DE IGNIÇÃO DE MISTURAS DE HIDROCARBONETOS COM AR EM REATORES PERFEITAMENTE MISTURADOS

## Leonel Rincón Cancino

Universidade Federal de Santa Catarina.  
Departamento de Engenharia Mecânica.  
Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos – labCET.  
Campus Universitário – Trindade CEP 88040900 – Florianópolis – SC.  
Brasil.  
leonel@cet.ufsc.br

## Amir Antônio Martins de Oliveira Junior, Ph.D.

Universidade Federal de Santa Catarina.  
Departamento de Engenharia Mecânica.  
Laboratório de Combustão e Engenharia de Sistemas Térmicos – labCET.  
Campus Universitário – Trindade CEP 88040900 – Florianópolis – SC.  
Brasil.  
amirol@emc.ufsc.br

**Resumo.** Neste trabalho, analisa-se numericamente a condição de ignição de misturas de hidrocarbonetos em ar em condições de reatores perfeitamente misturados. Três hidrocarbonetos, metano, propano e acetileno (dois alifáticos saturados e um não saturado, respectivamente) em combustão com ar seco padrão são considerados. Objetiva-se explicitar os mecanismos cinéticos de reação em cadeia levando à ignição para cada um dos sistemas reagentes e analisar o comportamento do período de indução para a ignição térmica da mistura como função da razão de estequiometria. Os resultados apontam para mecanismos bastante diferentes para estes três sistemas.

*Palavras chave:* combustão, ignição, mecanismos detalhados de reação, simulação numérica de combustão.

## 1. Introdução

Métodos computacionais têm sido usados extensivamente na análise de processos de combustão. Os programas computacionais desenvolvidos têm mostrado boa capacidade de reprodução de características de processos. Estes têm se transformados em ferramentas importantes de projetos de sistemas de combustão, por exemplo, através da simulação de condições de ignição, liberação de energia e formação de poluentes, e tem sido interfaceados com outros algoritmos, aumentando as possibilidades de outras análises, por exemplo, de análises de CFD. Estes trabalhos de simulação só são possíveis com o uso de mecanismos cinéticos detalhados. Considerando os hidrocarbonetos apenas, Warnatz (1999) apresenta o possível incremento no número de espécies e reações conforme aumenta o número de carbonos na molécula de um alcano na oxidação a baixa temperatura (fig. 1). Esta tendência aponta para a necessidade de computadores mais rápidos e de algoritmos mais eficientes à medida que os mecanismos cinéticos crescem.

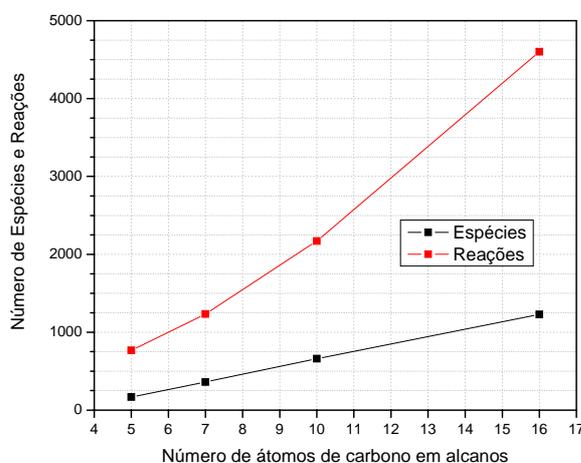


Figura 1 Número de espécies e reações químicas envolvidas na oxidação a baixa temperatura de um alcano (Warnatz, 1999).

Neste trabalho, os pacotes computacionais CHEMKIN (2003) e CANTERA (2001) são utilizados na análise das condições de ignição de misturas de hidrocarbonetos em ar em condições de reatores perfeitamente misturados a pressão constante. Três hidrocarbonetos, metano, acetileno e propano (alifáticos saturados e não saturados), em combustão com ar seco padrão são considerados. Pretende-se explicitar as condições necessárias de ignição para cada um dos sistemas reagentes e analisar o comportamento do período de indução para a ignição térmica da mistura como função da razão de estequiometria. A aplicação deste estudo está na combustão com carga homogênea em câmara de combustão de motores de combustão interna, sendo este trabalho um primeiro passo nesta direção. A escolha destes hidrocarbonetos está relacionada com a relativa facilidade em encontrar-se mecanismos detalhados de cinética química, com o fato de serem componentes básicos de combustíveis gasosos (GLP, gás natural) e como um primeiro passo na análise de hidrocarbonetos mais pesados, já que estes são produtos intermediários de reação de hidrocarbonetos mais pesados com ar. O uso de pacotes computacionais reconhecidamente testados (CHEMKIN e CANTERA) encurta o período de desenvolvimento do estudo.

## **2. Implementação Computacional.**

Os códigos computacionais CHEMKIN e CANTERA estão entre os mais utilizados mundialmente em estudos de combustão. Eles oferecem, entre outras opções, a possibilidade de simular processos cinéticos em reatores perfeitamente misturados (PSR), os quais assumem a ausência de variações espaciais de temperatura e concentração na mistura. Ainda, assumiu-se condições adiabáticas, isobáricas, ausência de escoamentos de entrada e saída e ausência de reações catalíticas nas paredes do reator. Porém, ressalta-se que estes códigos permitam a remoção destas hipóteses quando necessário.

## **3. Mecanismos Cinéticos de Reação.**

Para a execução deste trabalho, usou-se cinco mecanismos cinéticos: Mecanismo de Reação GRIMech 3.0 (2000) (53 espécies químicas, 5 elementos e 323 reações elementares), Mecanismo de Reação para a Oxidação do Acetileno de Laskin e Wang (1999) (52 espécies químicas, 5 elementos e 349 reações elementares), Mecanismo de Reação simplificado para o Acetileno de Williams (2001) (17 espécies químicas, 4 elementos e 25 reações elementares), Mecanismo de Reação de Konnov (2000) (127 espécies químicas, 5 elementos e 1205 reações elementares) e o Mecanismo de Reação para o n-Butano do Laboratório Livermore – LLNL (1999) (155 espécies químicas, 5 elementos e 689 reações elementares). Aqui, por uma questão de espaço, apenas os resultados mais significativos gerados pelos mecanismos GRIMech 3.0 e Konnov serão apresentados.

## **4. Metodologia.**

Em processos cinéticos de ignição simulados por computador, a inicialização do campo de variáveis é feita via temperatura inicial do sistema, com a qual o programa gera os gradientes iniciais de espécies, e a seguir, a evolução térmica do sistema. Outro parâmetro importante é o avanço temporal do sistema, pois se precisa de um intervalo de tempo suficientemente pequeno para captar a evolução das espécies e temperatura do sistema, e ao mesmo tempo suficientemente grande para que seja superior à escala de tempo do processo químico (reação), ou seja, a escala de tempo definida como o produto do número médio de colisões experimentadas pela molécula reagente e o tempo médio de colisão.

Inicialmente foram feitos testes com o mecanismo GRIMech 3.0 nos dois programas, empregando a mistura metano-ar em condições estequiométricas e partindo de 1450 K, para comparar a evolução da temperatura prevista com os dois programas (fig. 2). A temperatura prevista é praticamente idêntica (máxima diferença em T da ordem de 0,014 K), mostrando o grau de compatibilidade entre os dois códigos numéricos. As análises posteriores foram basicamente realizadas com o CHEMKIN e eventualmente comparadas com o CANTERA. Em todos os casos comparados os resultados calculados foram praticamente idênticos.

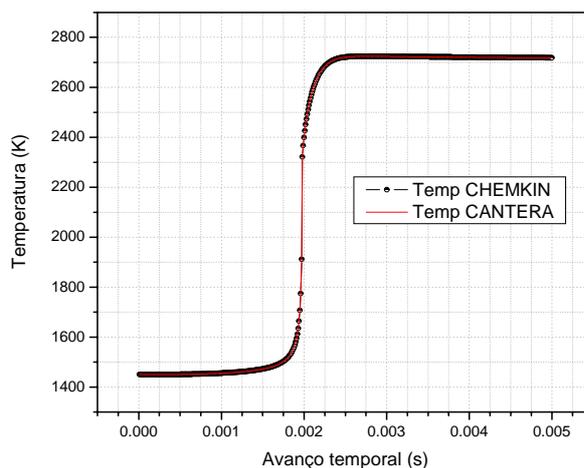


Figura 2 Comparação da distribuição de temperatura previstas pelo CHEMKIN e pelo CANTERA para metano-ar em condições estequiométricas.

Em vista da grande quantidade de espécies químicas envolvidas em cada um dos mecanismos cinéticos, foi escolhido um grupo seletivo de espécies cuja evolução temporal das concentrações foi observada. A escolha deste “grupo seletivo de espécies” baseou-se em um critério de relevância, sendo estas as espécies químicas mais importantes na ignição e também são rastreadas por outros autores. Os resultados serão apresentados em função da razão de estequiometria ( $\Phi$ ) definida em base volumétrica como:

$$\Phi = \frac{(Ar / Combustível)}{(Ar / Combustível)_{Estq.}} \quad (1)$$

Neste trabalho, mantém-se fixa em 1 mol a quantidade de combustível e altera-se a quantidade de ar para obter diferentes valores de  $\Phi$ .

## 5. Resultados.

A seguir são apresentados e analisados os resultados para o metano, o acetileno e o propano. Para o metano a temperatura inicial foi 1450 K, para o acetileno foi 1050 K e para o propano foi 1200 K. Estes valores foram escolhidos de forma a evidenciar os mecanismos de cinética química de ignição. Temperaturas mais elevadas tenderiam a reduzir substancialmente o tempo de indução, mascarando alguns dos mecanismos intermediários.

### 5.1 Ignição do Metano.

A figura 3 mostra a evolução da temperatura como uma função do tempo e da razão de estequiometria, que varia desde  $\Phi = 0,6$  até  $\Phi = 2,0$ . O eixo de estequiometria é dividido em 9 pontos sendo que o ponto 4 no eixo estequiométrico representa  $\Phi = 1$ . Cada incremento no eixo de avanço temporal representa  $10^{-5}$  segundos.

Verifica-se que o período de indução para a ignição térmica da mistura vai diminuindo continuamente conforme aumenta a quantidade de ar na mistura. A formação de intermediários do tipo aldeído ( $CH_2O$ ,  $CH_3CHO$ ) se dá mais rapidamente em misturas ricas em ar, desta forma explicando o adiantamento na ignição para as misturas ricas em ar quando comparadas com as misturas pobres. Comparando a diminuição da fração molar de oxigênio para misturas ricas e pobres em combustível (não mostrado na figura), notou-se que para misturas pobres em combustível o decréscimo se dá com maior intensidade do que para as misturas ricas. Isto se pode explicar pela fácil oxidação dos aldeídos, reduzindo rapidamente a concentração de oxigênio.

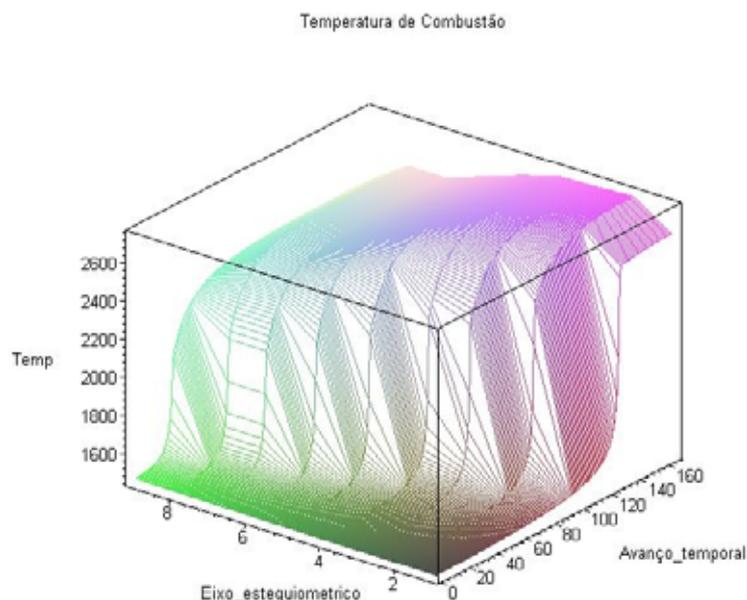


Figura 3 Evolução da temperatura de combustão adiabática do metano em função da razão de estequiometria e do avanço temporal.

A figura 4 mostra as frações molares e a temperatura previstas pelo mecanismo GRIMech 3.0 para condições ricas em combustível. Inicialmente, a concentração de aldeídos cresce até um máximo, acompanhando a temperatura, e então decresce rapidamente quando o aumento da temperatura favorece a reação com o oxigênio. Esta só se interrompe quando a concentração de oxigênio atinge zero. Os valores plotados no eixo vertical do gráfico da figura 4 foram adimensionalizados em relação ao valor máximo das frações molares das diferentes espécies.

A análise dos resultados previstos pelo mecanismo GRIMech 3.0 permite verificar o desenvolvimento de algumas cadeias de reações químicas.

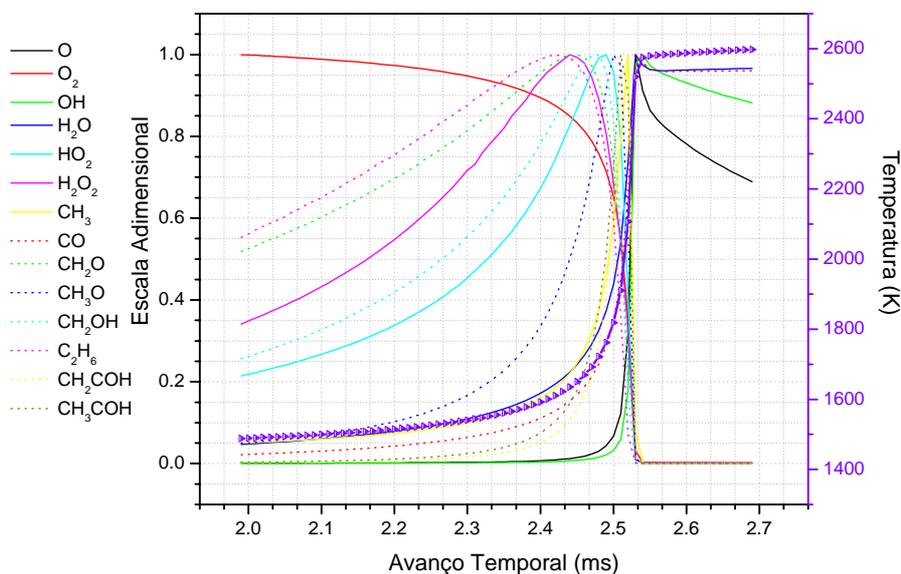
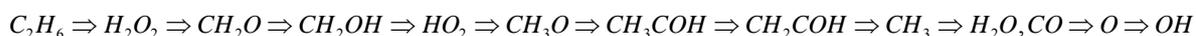
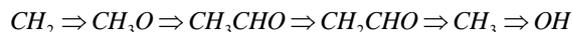


Figura 4 Evolução das frações molares de algumas espécies e da temperatura na ignição do metano para uma mistura rica em combustível.

Uma delas inclui a formação e destruição das espécies a seguir:



Pode-se verificar na figura 4 que o radical hidroxila ( $OH$ ) é a última espécie a se formar, após a destruição do acetaldeído e do radical hidroximetil ( $CH_3O$ ). Verifica-se que a taxa de formação do radical metil ( $CH_3$ ) depende fortemente da taxa de destruição das espécies reagentes, neste caso especificamente, do hidrocarboneto e do oxigênio. Verifica-se também a ocorrência do mecanismo de reação em cadeia:



Na análise da figura, verifica-se também a diferença de energia de ativação necessária para a formação e destruição de cada uma das diferentes espécies. O nível térmico aumenta da esquerda para a direita conforme a evolução da temperatura, o que quer dizer que, por exemplo, o radical metoxila ( $CH_3O$ ) (que difere da hidroximetil devido a configuração que expõe o radical  $OH$ , ao invés do  $O$ ) precisa de um nível térmico inferior para reagir do que o radical metila. Também, pode-se dizer que a formação do aldeído e do radical acetila ( $CH_2CHO$ ) depende da destruição do formaldeído e por último, pode se apreciar a forte dependência do nível térmico para a formação do radical hidroxila.

A figura 5 mostra as frações molares e a temperatura previstas pelo mecanismo GRIMech 3.0 para condições pobres em combustível. A ignição também ocorre por um mecanismo de reação em cadeia. Pode se apreciar que de novo o etano é uma das primeiras espécies a se formar, e como consequência poder-se-ia dizer que a concentração de oxigênio não afeta a seqüência inicial do mecanismo de reação em cadeia. O mecanismo em cadeia sugerido pela análise da figura 5 é o seguinte:



Comparando a seqüência de formação e destruição de espécies em processos de ignição do metano em misturas reagentes ricas e pobres em oxigênio, verifica-se que as seqüências não são iguais, por exemplo, para misturas pobres em ar, a formação de dióxido de hidrogênio é retardada, é adiantada a formação do radical hidroximetil, e também é retardada a formação do radical metil. Estes adiantamentos e retardos influenciam a formação de radicais hidroxilas (que são as últimas espécies a se formar para ambos os tipos de misturas), o que por sua vez afeta o período de indução para a ignição da mistura.

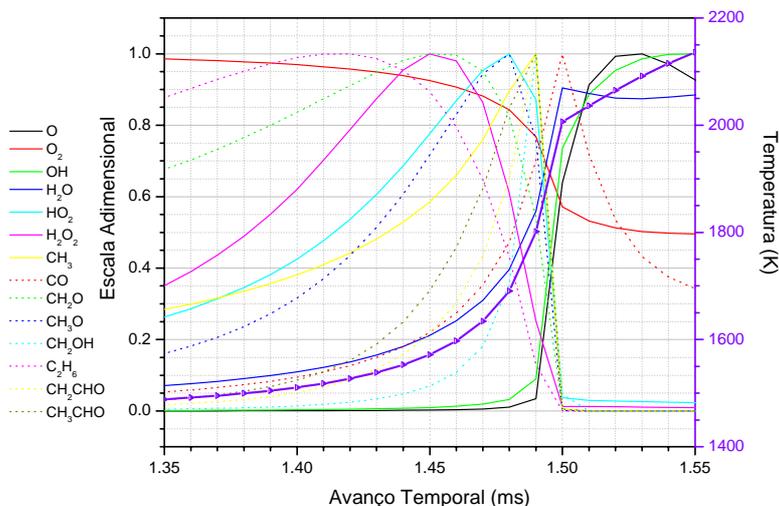


Figura 5 Evolução das frações molares de algumas espécies e da temperatura na ignição do metano para uma mistura pobre em combustível.

Em resumo, conclui-se que a formação de radicais hidroxilas em misturas pobres em ar depende em grande parte da destruição de quatro espécies: radical metoxila, radical acetil, acetaldeído e radical metil, enquanto que para misturas ricas em combustível a formação de radicais hidroxilas depende primordialmente da destruição de três espécies: radical acetil, acetaldeído e radical metil. Desta forma, poder-se-ia pensar que em misturas pobres em ar o radical metoxila estaria ajudando a formação de oxigênios livres para que estes possam se unir aos hidrogênios livres formando radicais hidroxilas, por exemplo, segundo a reação:



Outra possibilidade seria que na ausência de oxigênio o radical metoxila esteja fornecendo diretamente os radicais hidroxilas segundo a reação:



A reação anterior está contemplada no mecanismo de reação GRIMEch 3.0 (é a reação no. 66).

## 5.2 Ignição do Acetileno.

O processo de combustão do acetileno difere um pouco dos outros hidrocarbonetos analisados no presente trabalho, pois o acetileno é um alqueno, definido como um hidrocarboneto alifático não saturado, o qual contém um enlace duplo entre os átomos de carbono. São vários os motivos que induzem ao estudo da cinética do acetileno, entre vários, o fato de ser um dos subprodutos da combustão em condições de misturas ricas em oxigênio da maioria de hidrocarbonetos incluindo do metano. Desta forma pode-se pensar na cinética do acetileno como um caminho forçado pelo qual passam a maioria de hidrocarbonetos no processo de combustão. O anterior tem conduzido a vários investigadores (Wang, 1999; Laskin, 1999) a realizarem vários e extensos estudos em aplicações específicas da cinética do acetileno. Por exemplo, Wang (1999) desenvolveu um trabalho sobre reações da iniciação da oxidação do acetileno em tubos de choque, o trabalho tratou-se de um estudo modelando a cinética do hidrocarboneto apoiado na mecânica quântica. O estudo de Wang (1999) enfoca com grande intensidade nas reações de isomerização do acetileno no processo de ignição.

No presente trabalho empregou-se o mecanismo de Konnov (2000), o qual apresenta um esquema bastante robusto pra processos cinéticos de hidrocarbonetos com até três átomos de carbono na molécula. A evolução temporal da temperatura gerada com o mecanismo de Konnov (2000) para o acetileno é mostrada na figura 6 cujos eixos tem a mesma lógica que a adotada para o metano. Entretanto, o avanço temporal utilizado foi de  $6,5 \times 10^{-7}$  segundos.

Verifica-se na figura 6 que o mecanismo de Konnov (2000) reproduz o aspecto de que a temperatura máxima ocorre próxima a estequiométrica. Para o mecanismo de Wang e Laskin (1999) este comportamento não é observado e a temperatura cresce continuamente com a redução da quantidade de ar. No sistema acetileno-ar as simulações mostraram também que, em condições estequiométricas, a quantidade de radical hidroxila no momento da ignição térmica da mistura é muito maior do que a prevista no sistema metano-ar nas mesmas condições de composição.

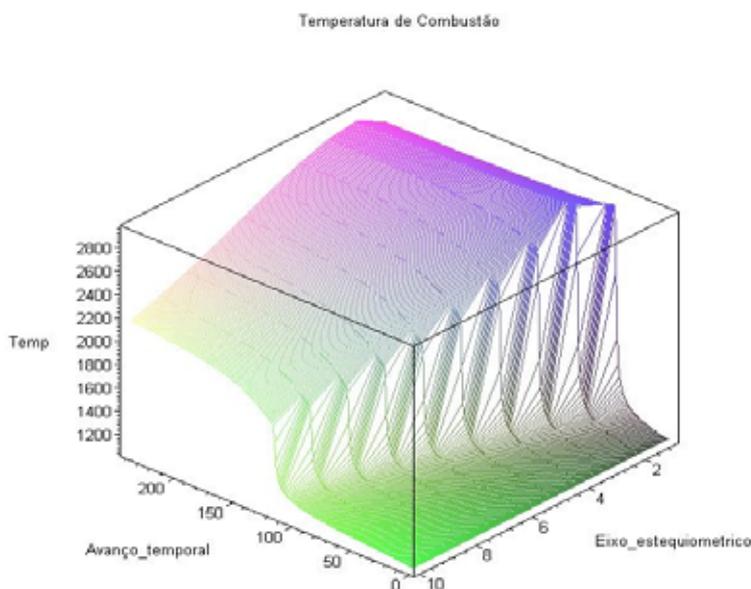
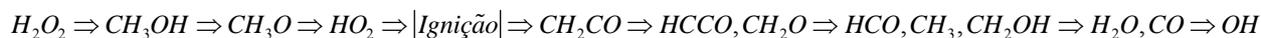


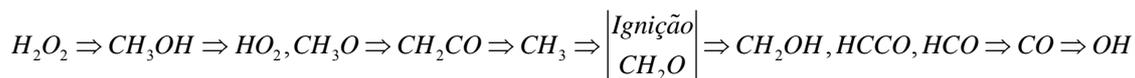
Figura 6 Evolução da temperatura em função do avanço temporal e da razão de estequiometria para o processo de combustão do acetileno segundo o mecanismo de Konnov.

Da mesma forma que no sistema metano-ar, a análise será feita para misturas ricas  $\Phi = 2,2$  e pobres  $\Phi = 0,4$  em combustível. Das cento e vinte e sete espécies contempladas no mecanismo de Konnov (2000) foram escolhidas catorze espécies pra a análise da evolução no tempo em ambos casos de composição de mistura.

Para misturas ricas em combustível observou-se o seguinte mecanismo de reação em cadeia:



Para misturas pobres em combustível, a ignição ocorre de acordo com a seguinte reação em cadeia:



Comparando os dois mecanismos de reação em cadeia, verifica-se que a formação e/ou posterior destruição de algumas espécies adianta-se ou se atrasa com respeito à ignição térmica da mistura. Por exemplo, o radical metil tem a sua destruição adiantada com respeito à ignição na mistura rica em comburente, ou seja, não tem mais formação deste radical após a ignição. O mesmo acontece com a cetona ( $CH_2CO$ ), a qual tem a sua destruição antes da ignição.

Da mesma forma que na reação com o metano, o formaldeído tem a sua destruição adiantada em relação à ignição na mistura rica em oxigênio, conforme mostra a figura 7. Nesta figura, verifica-se que a destruição do formaldeído para mistura pobre em combustível começa antes do que para a mistura rica. Porém, ao contrário do metano, este adiantamento não produz o mesmo efeito de redução do período de indução. Especula-se que o efeito da facilidade de oxidação dos formaldeídos não tem um efeito forte para o período de indução na oxidação de hidrocarbonetos alifáticos não saturados como tem nos hidrocarbonetos alifáticos saturados.

### 5.3 Ignição do Propano.

Para a análise do propano, utilizou-se também o mecanismo de Konnov (2000). A figura 8 mostra a evolução da temperatura para o sistema propano-ar como função da razão de estequiometria e do avanço temporal. Os eixos da figura 8 seguem a mesma lógica que a utilizada para o metano.

Das diferentes espécies analisadas, os radicais isopropil ( $i-C_3H_7$ ) e n-propil ( $n-C_3H_7$ ) apresentam um comportamento peculiar. A figura 9 mostra a evolução destes dois radicais para misturas pobre e rica em combustível.

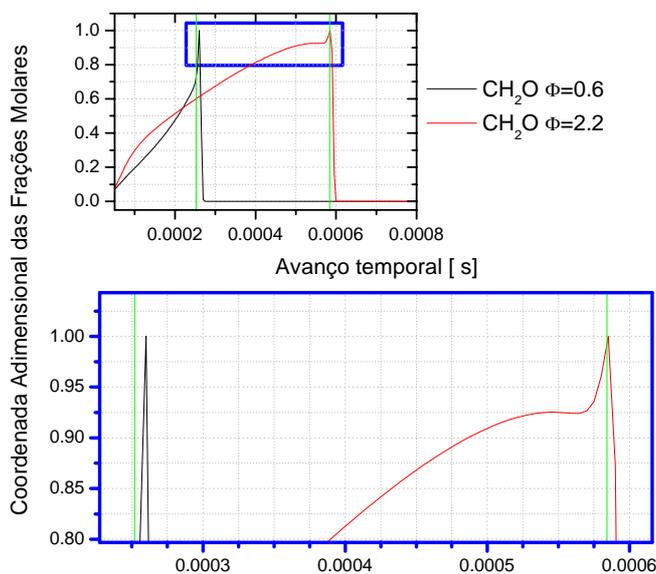


Figura 7 Evolução de formaldeído com para dois valores da razão estequiométrica no processo de ignição do acetileno.

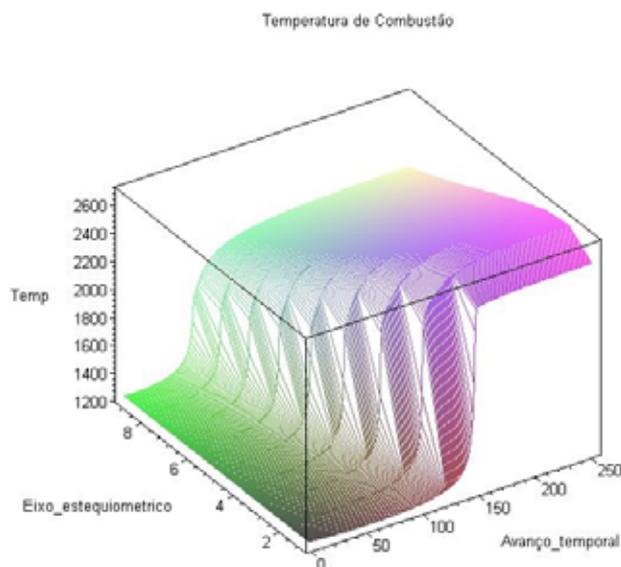


Figura 8 Evolução da temperatura de combustão adiabática para o sistema propano–ar segundo o mecanismo de Konnov.

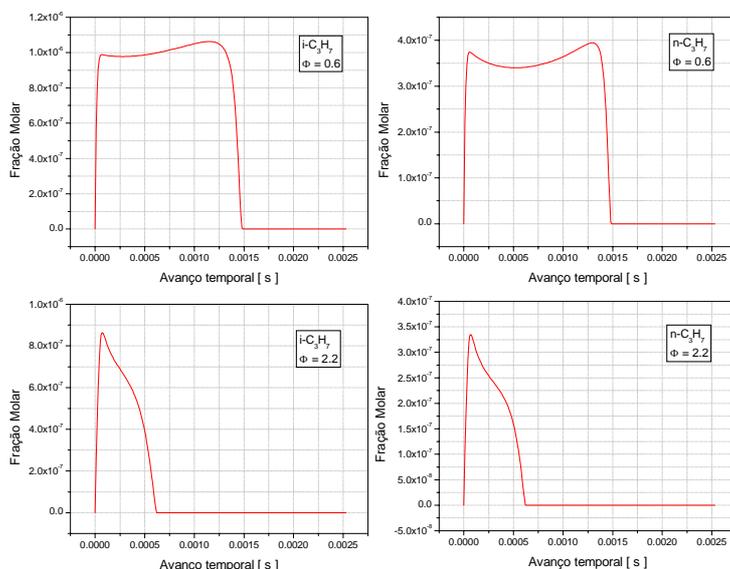


Figura 9 Evolução dos radicais isopropil e n-propil para dois valores da razão de estequiometria no sistema propano-ar segundo o mecanismo de Konnov.

Verifica-se que, para os dois valores extremos da razão de estequiometria, estas duas espécies atingem em um tempo muito pequeno valores máximos no caso de mistura rica em oxigênio ou quase os máximos (perto do 95%) no caso de misturas ricas em combustível. Pode-se dizer que as primeiras espécies a se formar na oxidação do propano em ar são estes dois radicais, o isopropil e o n-propil. Outras duas espécies, a etil ( $C_2H_3$ ) e a metil ( $CH_3$ ), também apresentam valores significativos no início do processo de oxidação, conforme mostrado na figura 10.

Assim como observado na figura 9, na figura 10 verifica-se que no início do processo, para ambos valores da razão de estequiometria, os radicais metil e etil formam-se rapidamente atingindo valores que podem oscilar entre 10% e 60 % do maior valor total de cada espécie.

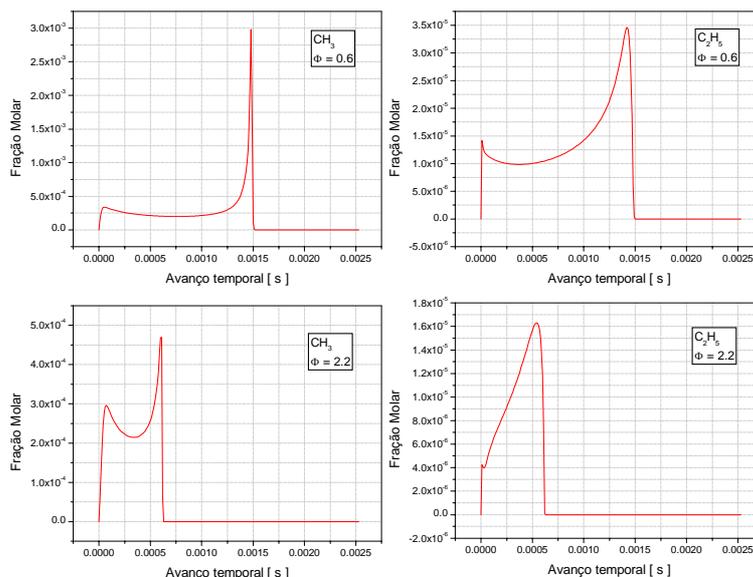
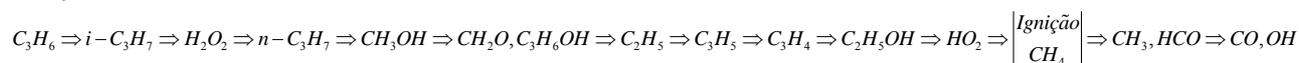


Figura 10 Evolução dos radicais metil e etil para dois valores da razão de estequiometria no sistema propano-ar segundo o mecanismo de Konnov.

Desta forma, o mecanismo cinético de Konnov (2000) prediz a formação das quatro seguintes espécies químicas principais no processo de oxidação do propano em ar, sob condição de pressão atmosférica e temperatura inicial de 1250 K:  $n-C_3H_7$  [radical n-propil],  $i-C_3H_7$  [radical isopropil],  $CH_3$  [radical metil] e  $C_2H_5$  [radical etil].

Dois valores de estequiometria foram analisados para discutir o processo de combustão do propano,  $\phi = 0,6$  e  $\phi = 2,2$ . No primeiro caso, para misturas ricas em combustível, a simulação evidencia a seguinte reação em cadeia:



Verifica-se que os radicais isopropil e n-propil estão nos primeiros lugares nas posições de formação e destruição de espécies químicas, mas uma boa quantidade do total, perto do 95%, destas duas espécies forma-se no início do processo, conforme ilustrado na figura 9. O momento da ignição se dá justamente quando a fração molar do metano atinge o valor máximo.

Para misturas ricas em ar, verifica-se a ocorrência da seguinte reação em cadeia:



Observa-se que os radicais formil ( $CHO$ ) e metil ( $CH_3$ ) continuam se formando ainda após a ignição para misturas ricas em oxigênio. Porém, para misturas ricas em combustível, estas se formam e começam a ser destruídas antes da ignição térmica da mistura. Outro aspecto a observar é a diferença de posição na seqüência de formação e posterior destruição do propene ( $C_3H_4$ ). Nota-se que mecanismo de Konnov possui dezenove reações que têm o propene junto com espécies como oxigênio diatômico, oxigênio monoatômico, radicais hidroxilas e dióxidos de hidrogênio como reagentes principais. Assim, uma maior concentração de oxigênio poderia levar ao adiantamento da ignição da mistura. O mecanismo também possui dezessete reações elementares que contem o propene como produto, provindo do radical alil ( $C_3H_5$ ) e seus isômeros. Em quase todas as dezessete reações o propano aparece como que perdendo sequencialmente um átomo de hidrogênio, transformando-se em isopropil e n-propil, alil e propene. Pode-se imaginar que esta perda sequencial de átomos de hidrogênio da molécula de propano está associada de alguma forma à concentração de oxigênio na mistura.

## 6. Conclusões

As principais conclusões deste trabalho são:

1. O desempenho dos programas CHEMKIN e CANTERA é basicamente equivalente para a solução dos mecanismos testados.
2. Dentre os vários mecanismos testados, para o metano o mecanismo GRIMECH, com 53 espécies químicas e 323 reações, forneceu o mesmo desenvolvimento térmico do que o mecanismo Konnov, o qual possui 127 espécies químicas e 1205 reações elementares.

3. Para o acetileno, houve discrepâncias entre as previsões com o mecanismo Konnov e com os mecanismos reduzido para o acetileno (Williams) e de Laskin. Estes últimos previram valores de temperatura continuamente aumentando com a diminuição da razão estequiométrica. O mecanismo de Wang e Laskin, em particular, apresenta um pico na curva de desenvolvimento de temperatura, impossibilitando análises de sensibilidade.
4. Para o propano, o mecanismo de Konnov apresentou maior sensibilidade para o período de indução do que o mecanismo de Livermore, para o mesmo nível térmico. O mecanismo de Livermore pode não ser apropriado para a análise de ignição térmica.
5. Quanto ao mecanismo de ignição do metano, o período de indução diminui continuamente conforme aumenta a quantidade de ar na mistura. O primeiro passo consiste na perda de um átomo de hidrogênio, é então oxidado para formar aldeídos e é a oxidação destes que aumentará significativamente o nível térmico do sistema.
6. Quanto ao mecanismo de ignição do acetileno, o período de indução diminui conforme diminui a razão de estequiometria, sendo este comportamento contrário ao do metano e do propano. A oxidação do acetileno este se inicia com a isomerização deste (Wang e Laskin, 1999). Este processo não está modelado adequadamente no mecanismo de Konnov. A quantidade de radical OH no momento da ignição é muito maior do que a observada para o metano.
7. Quanto ao mecanismo de ignição do propano, este aparece como que perdendo sequencialmente um átomo de hidrogênio, transformando-se sequencialmente em isopropil e n-propil, alil e propene. Esta perda sequencial de átomos de hidrogênio da molécula de propano está associada de alguma forma à concentração de oxigênio na mistura.

## 7. Agradecimentos.

Agradece-se o suporte financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, e ao Programa de Formação de Recursos Humanos da ANP através do Programa PRH 09 – MECPETRO.

## 8. Referências.

- CANTERA. Object-Oriented Software for Reaction Flows. GOODWIN D. G. Division of Engineering and Applied Science. California Institute of Technology. 2001.
- CHEMKIN, Reaction Design, Chemical engineering Software and Services. Release 3.7.1. 2003.
- GRIMech 3.0. Gas Research Institute. < [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/) > 2000. acesso em: março do 2003.
- KONNOV, A. Faculty of Applied Sciences, Free University of Brussels. 2002.
- LLNL, Lawrence Livermore National Laboratories. < [http://www-cms.llnl.gov/combustion/combustion\\_home.html](http://www-cms.llnl.gov/combustion/combustion_home.html) > . acesso em: março do 2003.
- WANG, H; LASKIN A. On initiation reactions of acetylene oxidation in shock tubes: A quantum mechanical and kinetic modeling study. Chemical Physics Letters 303 (1999) 43-49.
- WARNATZ, J; MASS, U; DIBBLE, W.R. Combustion, Physical and Chemicals Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. 2<sup>nd</sup> ed. Berlin: Springer. 1999. 299 p.
- WILLIAMS, F. A; VARATHARAJAN, B. Chemical-Kinetic descriptions of high temperature ignition and detonation of Acetylene-Oxygen-Diluent System. COMBUSTION AND FLAME 125:624-645, 2001

## COMPUTATIONAL ANALYSIS OF THE CONDITIONS LEADING TO IGNITION OF HYDROCARBON - AIR MIXTURES IN PERFECTLY SITIRRED REACTORS

Leonel Rincón Cancino  
Federal University of Santa Catarina - Brazil  
leonel@cet.ufsc.br

Amir Antônio Martins de Oliveira Junior, Ph.D.  
Federal University of Santa Catarina – Brazil  
amirol@emc.ufsc.br

### Abstract

Here we analyze numerically the conditions for ignition of hydrocarbon-air mixtures in perfectly stirred reactors. The fuels used are methane, propane and acetylene, two saturated and one unsaturated aliphatic hydrocarbon. The objectives are to describe the reaction paths leading to the ignition and to analyze the behavior of the induction period as a function of the stoichiometric ratio. The results indicate markedly different mechanisms for these three systems.

**Keywords:** Combustion, ignition, detailed reaction mechanisms, numerical simulation.