

5

Resultados e Discussões

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos com os modelos de mistura para o caso de escalares inertes e reativos submetidos a flutuações turbulentas. Para este fim, foi necessária a implementação de um código computacional desenvolvido na linguagem de programação MATLAB versão R2006a. Aquele código implementado é composto de 40 rotinas, as quais resolvem diversos requerimentos divididos em duas seções:

A primeira seção corresponde aos resultados obtidos da simulação com diferentes modelos de mistura. Inicialmente são estudados os modelos clássicos, isto é, o modelo de Curl (CM), o modelo de Curl modificado (MCM) e o modelo de interação pela troca com a média (IEM). Em seguida, são discutidos os resultados obtidos com os modelos de mistura propostos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001), isto é, o modelo IEM Estendido (EIEM), o modelo de Langevin (LM) e o modelo de Langevin Estendido (ELM). Estes três últimos modelos foram implementados utilizando-se a abordagem estocástica pelo método de Monte-Carlo e considerando o esquema de discretização que resolve as SDE não lineares pelo o método de Milstein Taylor Implícito.

A segunda seção apresenta a análise da influência dos modelos de mistura no caso de combustão turbulenta pré-misturada. Para este fim foi realizada a modelagem de um Reator Parcialmente Agitado (PaSR), mediante a utilização da técnica de Monte-Carlo. O termo que descreve o transporte difusivo da PDF do PaSR foi modelado por diversos modelos de mistura, mais especificamente os modelos IEM, EIEM, LM e ELM.

Para a rodagem do código computacional, utilizou-se um computador INTEL Pentium IV com 3.20 GHz e 1.00 GB de memória RAM.

5.1

Simulação de um Caso Inerte

Nesta seção apresenta-se a evolução da PDF para um campo escalar simples o qual é submetido uma turbulência homogênea. O objetivo desta seção é validar a implementação destes modelos de mistura, a qual foi realizada utilizando-se o método de Monte-Carlo para o caso de uma mistura binária.

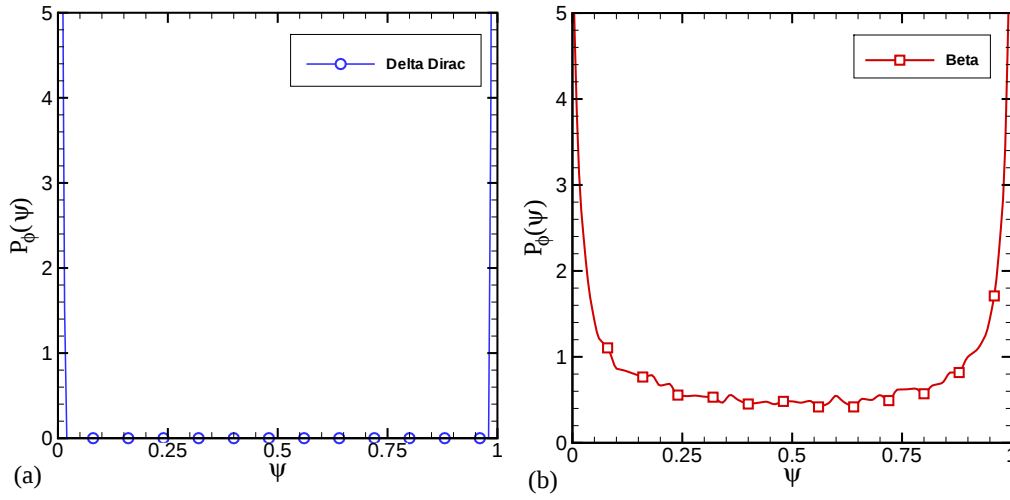


Figura 5.1: *PDF iniciais consideradas na simulação de uma mistura binária. (a) distribuição delta de Dirac discretizada com $\langle \phi \rangle = 0,5$ e $\langle \phi'^2 \rangle = 0,25$; (b) distribuição Beta com $\langle \phi \rangle = 0,5$ e $\langle \phi'^2 \rangle = 0,15$. Estas PDFs foram construídas utilizando-se 4^7 partículas.*

5.1.1

Condições Iniciais Impostas

Para o estudo dos modelos de mistura, considerou-se um conjunto de $N_p = 4^7$ partículas que evoluem no tempo com uma frequência de mistura igual a $\langle \omega_\phi \rangle = 100 \text{ Hz}$. Este número de partículas foi escolhido com base em testes preliminares, visando reduzir o erro estatístico e manter um valor aceitável do tempo computacional. Para os modelos de mistura considerados nesta seção, utilizou-se um passo de tempo de $\Delta t = 100 \mu\text{s}$, de tal forma que $\langle \omega_\phi \rangle \Delta t = 0,01 \ll 1$.

Inicialmente foi investigado o efeito da escolha da condição inicial sobre a evolução da PDF. Em particular, foram empregadas (i) uma PDF do tipo duplo delta de Dirac, descrita pela Eq. (4-17), e (ii) uma PDF do tipo Beta, cuja formulação é definida nas Eqs. (4-20) e (4-23). A primeira escolha é caracterizada por uma média e variância inicial de $\langle \phi \rangle = 0,5$ e $\langle \phi'^2 \rangle = 0,25$. Esta PDF inicial é a mais frequentemente utilizada na avaliação dos modelos de mistura, pois representa o caso mais trivial e comum de condição inicial, onde os fluidos encontram-se completamente segregados.

A PDF Beta inicial cuja distribuição é resultado de um sorteio, possui média e variância iniciais $\langle \phi \rangle = 0,5$ e $\langle \phi'^2 \rangle = 0,15$. Esta distribuição foi escolhida por ser amplamente utilizada para a descrição de processos de combustão. A figura 5.1 apresenta estas distribuições iniciais.

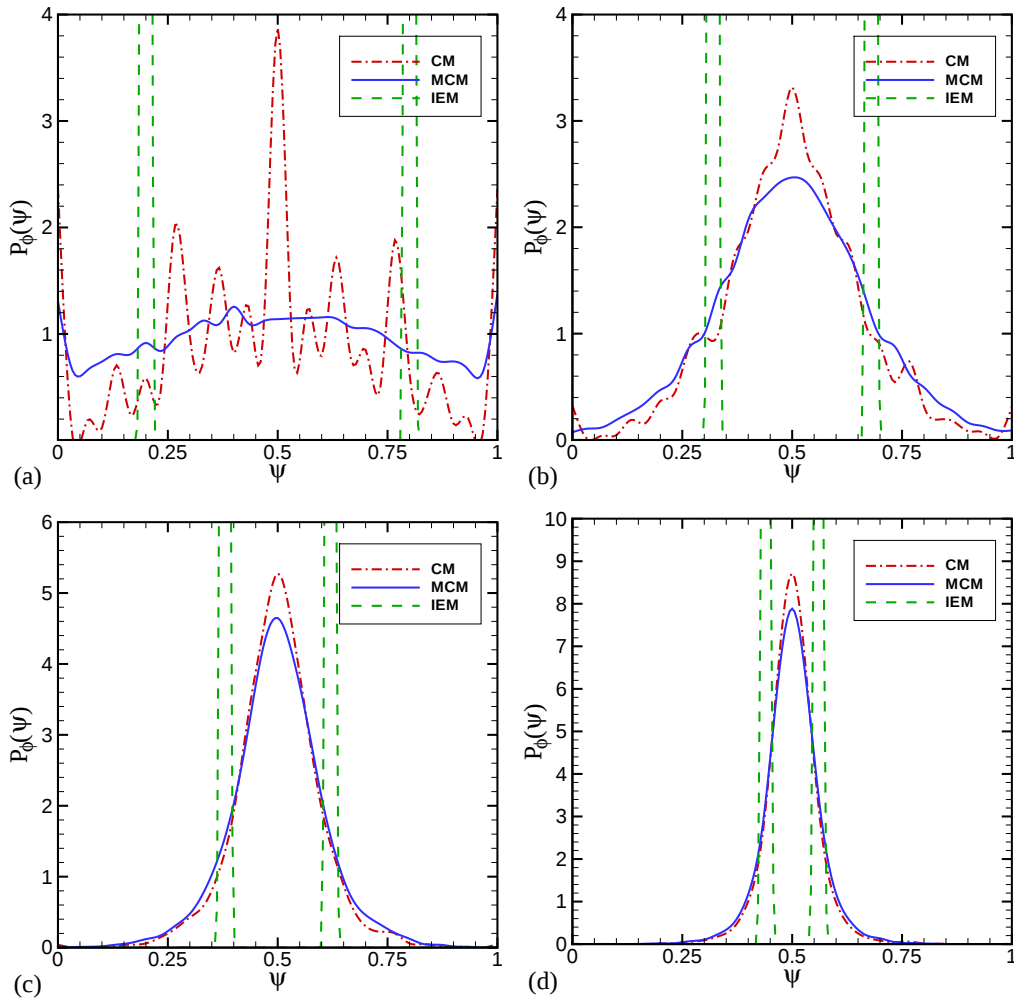


Figura 5.2: Comparação da evolução da representação contínua da PDF para os modelos de mistura clássicos para $\langle\omega_\phi\rangle t = 0,5$ (a); $1,0$ (b); $1,5$ (c) e $2,0$ (d). A PDF inicial foi assumida como sendo uma distribuição duplo delta de Dirac.

5.1.2

Resultados dos Modelos de Mistura Clássicos

A figura 5.2 mostra a evolução da PDF para os modelos clássicos de Curl (CM), Curl modificado (MCM) e de interação pela troca com a média (IEM) para valores adimensionais de $\langle\omega_\phi\rangle t = 0,5$; $1,0$; $1,5$ e $2,0$, respectivamente. A PDF inicial utilizada foi uma distribuição de tipo delta de Dirac, mostrada na figura 5.1(a). No caso desta condição inicial, esta figura mostra que a evolução da PDF obtida com o modelo de mistura de Curl é um conjunto de funções delta de Dirac, tal como exposto no Cap. 4. Note-se que a representação utilizada na figura 5.1 não permite a caracterização adequada desta propriedade do CM. Estes conjuntos de funções deltas não representam adequadamente o fenômeno difusivo, contínuo, que caracteriza a mistura. Para contornar esta deficiência, Dopazo (1979) propôs o modelo de Curl Modificado

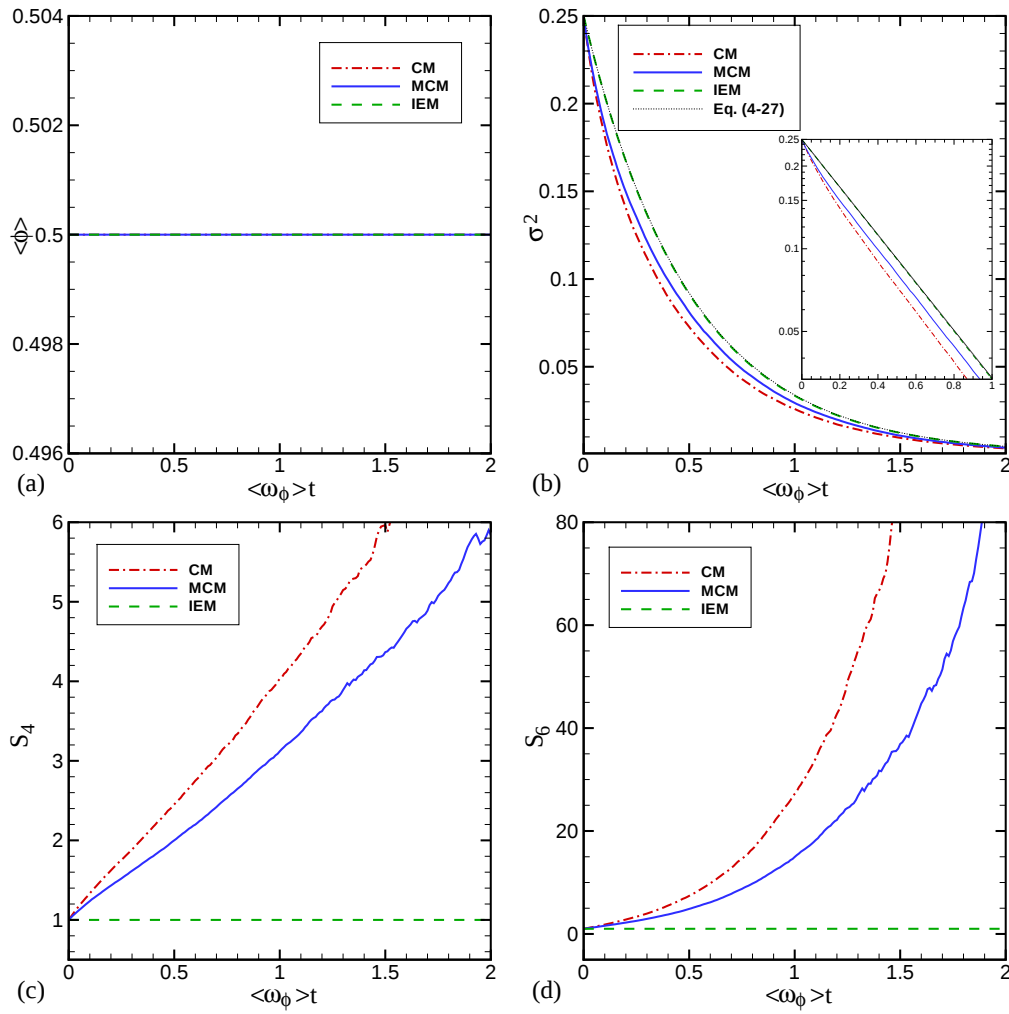


Figura 5.3: Comparação dos momentos estatísticos da PDF para os modelos de mistura clássicos; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

(MCM), o qual corrige a natureza discreta que possui o modelo simples de Curl tal como se pode perceber na figura 5.2.

Na figura 5.2, observa-se que a PDF calculada utilizando-se o modelo de mistura IEM relaxa para o valor médio. No entanto, a forma da PDF permanece inalterada ao longo do tempo, isto é, as funções delta de Dirac deslocam-se para o valor médio do espaço amostral do escalar.

A figura 5.3 apresenta o histórico da média e dos três primeiros momentos de ordem par da PDF destes modelos de mistura clássicos. Desta figura, percebe-se que estes modelos respeitam a conservação da média do escalar. O decaimento exponencial da variância, dado pela Eq. (4-27), somente é observado para os modelos CM e MCM após uma relaxação inicial.

De fato, nestes casos, nos estágios iniciais de mistura a taxa de decaimento da variância é ligeiramente superior àquela dada pela Eq. (4-27). Porém, para valores de $\langle \omega_\phi \rangle t > 0,4$, as taxas de decaimento previstos pelos três mode-

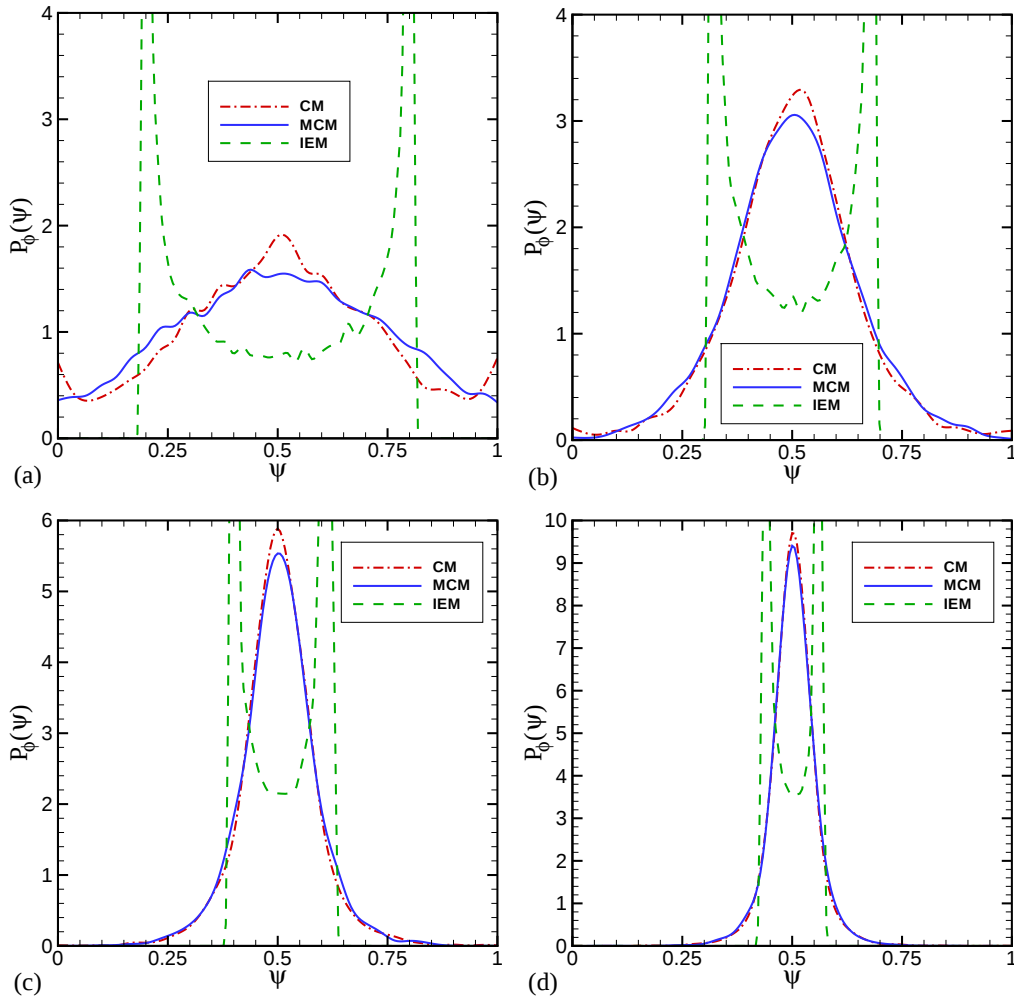


Figura 5.4: Comparação da evolução das PDF para os modelos de mistura clássicos para $\langle\omega_\phi\rangle t = 0,5$ (a) ; $1,0$ (b); $1,5$ (c) e $2,0$ (d). A PDF inicial é uma distribuição Beta.

los são idênticas. Esta variação inicial discrepante pode ser atribuída à maneira como os modelos CM e MCM respondem à singularidade da PDF inicial (delta duplo Dirac).

Esta figura também mostra que a Curtose, S_4 e a Hiper-curtose, S_6 , calculadas pelo modelo CM crescem monotomamente com o tempo, ultrapassando os valores de uma Gaussiana ($S_4 = 3$ e $S_6 = 15$), para $\langle\omega_\phi\rangle t \approx 0,7$. No caso do modelo MCM, S_4 e S_6 também apresentam um comportamento crescente, e estes valores são atingidos para $\langle\omega_\phi\rangle t \approx 1$. No caso do modelo de mistura IEM, S_4 e S_6 permanecem inalteradas.

As figuras 5.4 e 5.5 apresentam a evolução da PDF e o histórico dos diferentes momentos obtidos com os modelos de mistura clássicos considerando como PDF inicial, uma distribuição aleatória do tipo Beta com média $\langle\phi\rangle = 0,5$ e variância $\langle\phi'^2\rangle = 0,15$ a qual é mostrada na figura 5.1(b). Percebe-se na figura 5.4 que a evolução da PDF do modelo MCM apresenta uma forma

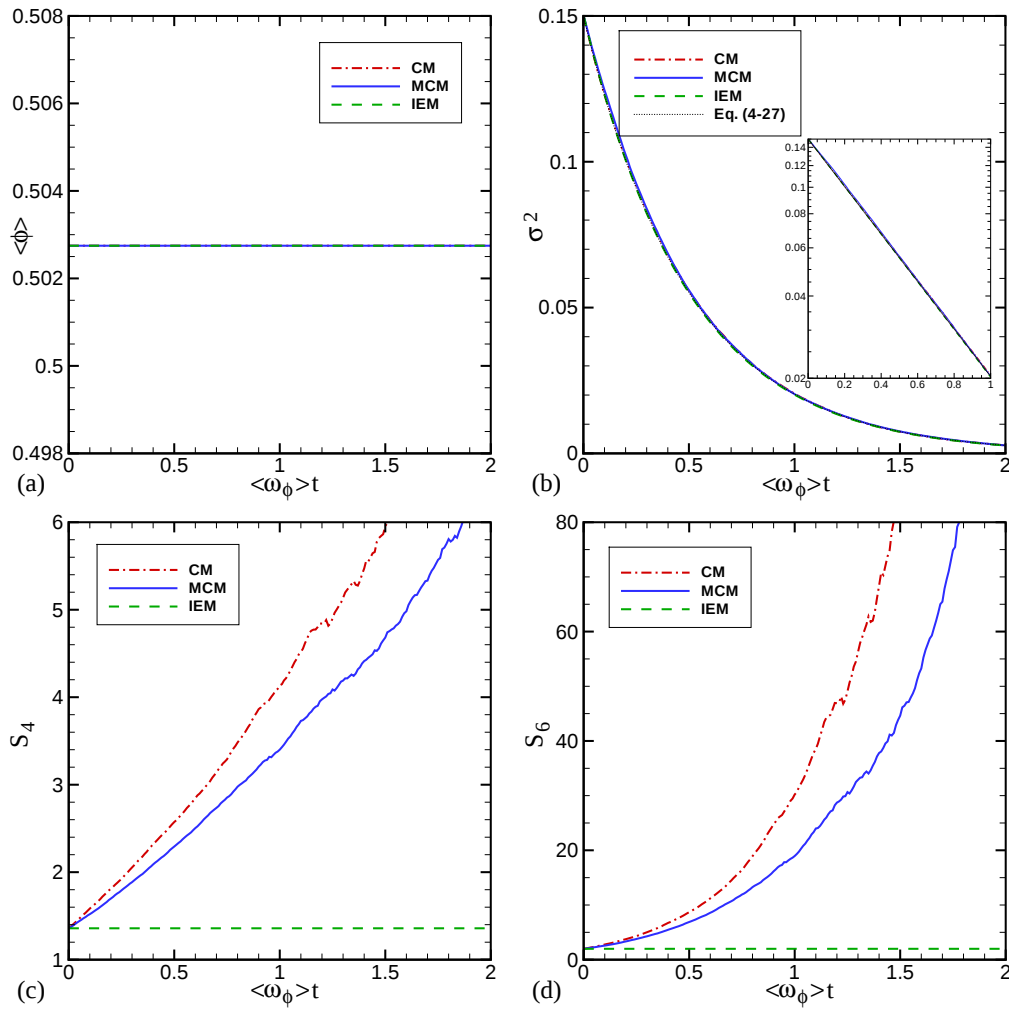


Figura 5.5: Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura clássicos; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper- Curtose. A PDF inicial é uma distribuição Beta.

semelhante àquela apresentada na figura 5.2. No caso do modelo IEM, pode-se perceber que a PDF do tipo Beta é deformada no entorno da média sem que sua forma geral seja afetada. O modelo CM, apresenta nos estágios iniciais, uma forma da PDF diferente daquele mostrado na figura 5.2. No presente caso, a PDF inicial contínua leva a uma evolução contínua da forma da PDF.

Uma diferença perceptível entre os resultados mostrados na figura 5.5 e aqueles da figura 5.3, é que agora os três modelos de mistura representam corretamente o decaimento da variância. Isto corrobora o argumento de que o uso da distribuição duplo delta de Dirac como PDF inicial influencia os estágios iniciais do desenvolvimento do processo de mistura no caso dos modelos discretos (CM e MCM).

Das figuras 5.3 e 5.5 percebe-se que, embora a variância do campo escalar calculada pelo modelo IEM represente corretamente a queda das flutuações do escalar, a estrutura da PDF nunca muda. Como consequência, para uma PDF

inicial arbitrária, a forma Gaussiana nunca será obtida.

A figura 5.5 mostra que, de modo análogo à figura 5.3, os valores da Curtose, S_4 , e da Hiper-curtose, S_6 , para os modelos de mistura CM e MCM tendem para o infinito, enquanto que, para o modelo IEM, estes momentos permanecem inalterados.

O comportamento qualitativamente incorreto dos modelos de misturas de Curl (CM) e Curl modificado (MCM) é um problema sério por duas razões:

1. Uma vez que, os momentos de ordem superior tendem para o infinito, o erro estatístico dos modelos estocásticos é muito grande. Conseqüentemente, a convergência não pode ser garantida em todos os casos.
2. A maior vantagem dos métodos de PDF é de proporcionar uma descrição estatística das flutuações e desta forma fornecer um fechamento mais completo. Claramente esta vantagem não se materializa se o modelo conduz a PDF's qualitativamente incorretas (Pope, 1982).

Estes resultados mostram, claramente que nenhum dos modelos clássicos é completamente satisfatório.

5.1.3

Resultados dos Modelos de Mistura Recentes

Os modelos de mistura formulados por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) foram implementados aplicando a abordagem Monte-Carlo, utilizando-se o método de discretização de equações diferenciais estocásticas (SDE) de Milstein Taylor Implícito (Tian e Burrage, 2001), o qual apresenta uma ordem de convergência forte igual a 1.

Além das condições iniciais impostas para a simulação da evolução do processo de mistura, detalhadas nas seções 5.1.1 e 5.1.2, para os modelos propostos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) é necessário, como parâmetros de entrada, os valores do número de Reynolds na micro-escala de Taylor, $Re_\lambda = 50$ e a frequência de mistura turbulenta média, $\langle \omega \rangle = 100 Hz$. Estes valores são aqueles adotados por Sabel'nikov e Gorokhovski, (2001).

A figura 5.6 mostra a evolução da forma da PDF obtida com os modelos de mistura do tipo Langevin (LM), com $d_0 = 1$, IEM estendido (EIEM), e de Langevin estendido (ELM), com $d_0 = 1$, para os tempos adimensionais de $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5; 1,0; 1,5$ e $2,0$. A PDF inicial utilizada foi uma distribuição duplo delta de Dirac, mostrada na figura 5.1(a). Na figura 5.6, percebe-se que a PDF calculada com os três modelos de mistura apresenta diferentes formas. O modelo de Langevin (LM) é aquele que apresenta a evolução da PDF mais lenta, enquanto o modelo de EIEM estendido (EIEM) apresenta evolução mais

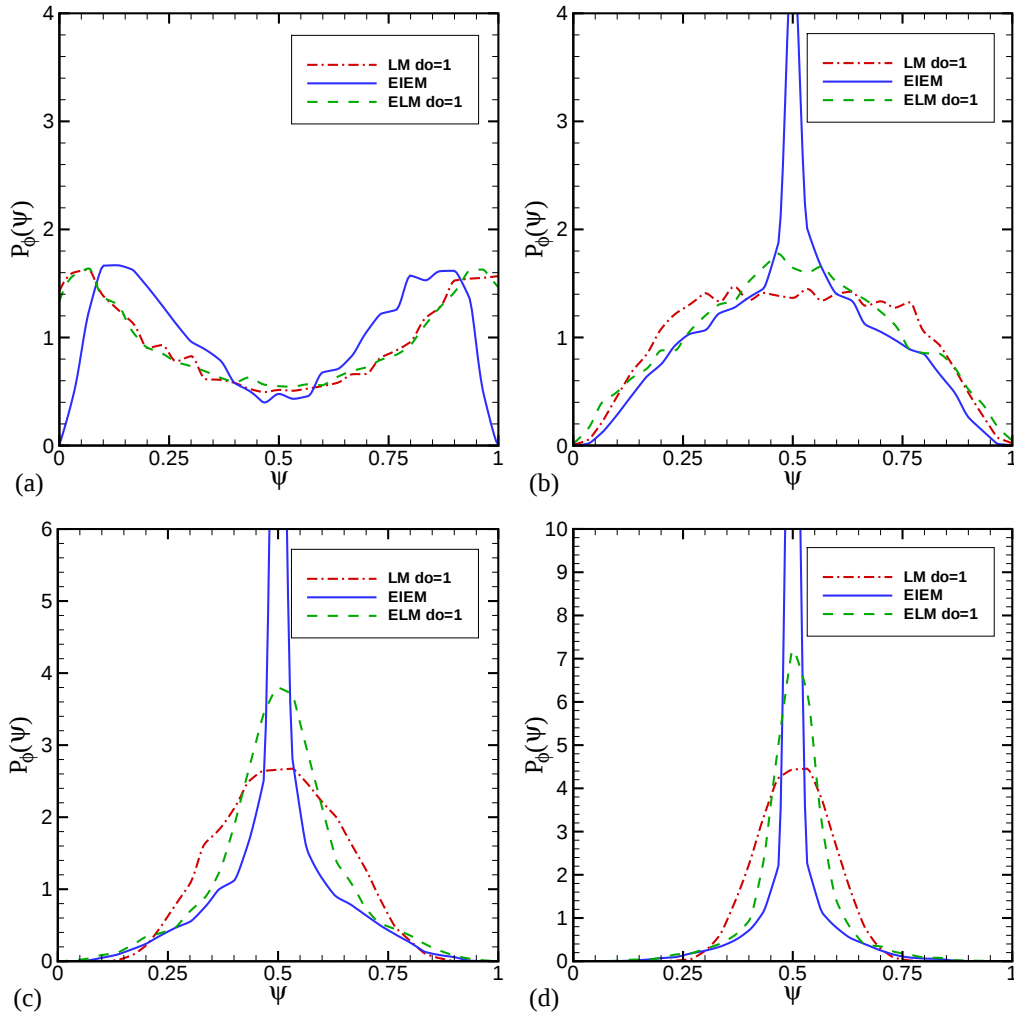


Figura 5.6: Comparação da evolução das PDFs para os modelos de mistura Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para $d_o = 1, 0$; $\langle \omega \rangle = 100$ Hz. e $\langle \omega_\phi \rangle t = 0, 5$ (a); 1, 0 (b); 1, 5 (c) e 2, 0 (d). A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

rápida dentre os três modelos analisados nesta seção. Além disso, a PDF obtida no caso do modelo IEM estendido (EIEM) para tempos longos, apresenta um pico muito pronunciado, diferentemente dos demais modelos de mistura. Como será visto mais adiante, esta característica particular própria do modelo EIEM, é devida à escolha da PDF inicial utilizada, uma função duplo delta de Dirac discreta, a qual influi na formação do pico e na evolução da PDF para tempos relativamente longos.

Na figura 5.7 são apresentados os históricos dos momentos da PDF obtidos com os modelos de mistura LM, EIEM e ELM, correspondentes às distribuições mostradas na figura 5.6. Pode-se perceber na figura 5.7(a), que mostra a média do escalar para os três modelos de mistura considerados, que pequenos desvios, menores do que 0,7%, são observados em torno da média

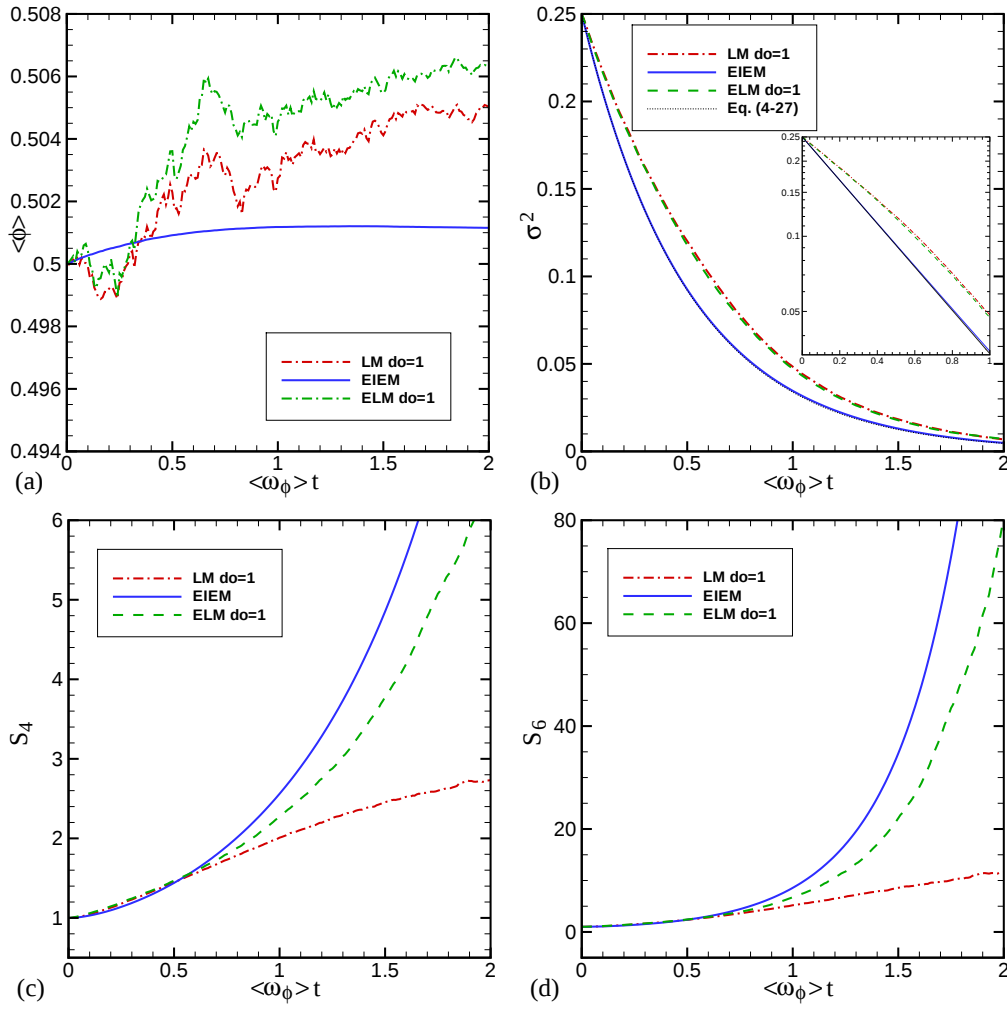


Figura 5.7: Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura de Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para $d_o = 1,0$ e $\langle \omega \rangle = 100 \text{ Hz}$; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

inicial. Estes desvios são de natureza flutuante no caso dos modelos LM e ELM. Estas flutuações são atribuídas à discretização da equação de transporte do escalar no referencial Lagrangeano [Eqs. (4-49) e (4-72)].

No caso do modelo IEM estendido (EIEM) existe também uma pequena variação do valor médio do escalar, que pode ser atribuída à discretização presente na solução numérica da SDE do processo estocástico que descreve a distribuição da frequência turbulenta χ . A distribuição de χ influi, de forma indireta, na variação do valor médio do escalar $\langle \phi \rangle$. Assim, o comportamento observado não é uma característica intrínseca aos modelos de mistura propostos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001), mas um artefato do processo de solução. Assim, pode ser afirmado que os modelos de mistura estudados respeitam a propriedade da conservação da média do escalar.

A figura 5.7(b) também mostra a queda das flutuações do escalar repre-

sentada pela variância, σ^2 , traçada em coordenadas do tipo natural e semi-logaritmica para os modelos de mistura estudados. Pode-se perceber que o decaimento da variância é corretamente representando pelo modelo IEM estendido (EIEM). Porém, da mesma forma aos resultados obtidos pelos modelos de Curl e Curl modificado, a evolução da variância para o caso dos modelos de Langevin (LM) e Langevin estendido (ELM) apresentam um desvio com respeito à solução analítica descrita pela Eq. (4-27). Este desvio só é observado nos estágios iniciais do processo de mistura e é lentamente reduzido, até que a taxa de decaimento da variância (declividade no gráfico semi-logaritmico) torna-se igual à descrita pela Eq. (4-27).

Este comportamento inicial anômalo da queda da variância para os modelos de Langevin (LM) e Langevin Estendido (ELM), é devido à singularidade que apresenta a PDF inicial duplo delta de Dirac. Note-se que não foi estudada a influência da escolha do passo do tempo, $\Delta t = 100\mu s$, nem da constante $d_0 = 1$, sobre os resultados obtidos.

As figuras 5.7(c) e 5.7(d) mostram, respectivamente, o histórico da Curtose, S_4 , de da Hiper-curtose, S_6 , dos modelos de mistura de Langevin (LM), IEM estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM). Estes valores crescem monotomamente para o infinito no caso dos modelos EIEM e ELM, o que indica que a PDF tende para distribuições Super-gaussianas. No caso do modelo de Langevin (LM), S_4 e S_6 aparentemente evoluem assintoticamente para valores Gaussianos, 3 e 15, respectivamente.

As figuras 5.8 e 5.9 apresentam a evolução da PDF e o histórico dos momentos estatísticos obtidos com os modelos de mistura recentes formulados por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001). Neste caso, a PDF inicial considerada é uma distribuição aleatória do tipo Beta com média $\langle\phi\rangle = 0,5$ e variância $\langle\phi'^2\rangle = 0,15$, mostrada na figura 7.1(b). Como pode ser verificado nas figuras 5.8 e 5.9, os três modelos de mistura apresentam tendências análogas às observadas quando uma PDF duplo delta de Dirac é utilizada. A única diferença perceptível corresponde à queda da variância, obtida para os modelos de Langevin (LM) e Langevin estendido (ELM), a qual exhibe, um menor desvio da solução analítica descrita pela Eq. (4-27), do aquelas obtidas no caso mostrado na figura 5.7(b). A comparação destas duas figuras ilustra a influência da escolha da PDF inicial sobre a evolução das flutuações nos modelos de misturas que contém termos estocásticos, como é o caso dos modelos de Langevin (LM) e Langevin Estendido (ELM).

Nas figuras 5.10 e 5.11 são apresentadas a evolução da PDF e o histórico de seus respectivos momentos estatísticos para o caso do modelo de Langevin (LM) para diferentes valores do parâmetro que controla o peso do termo

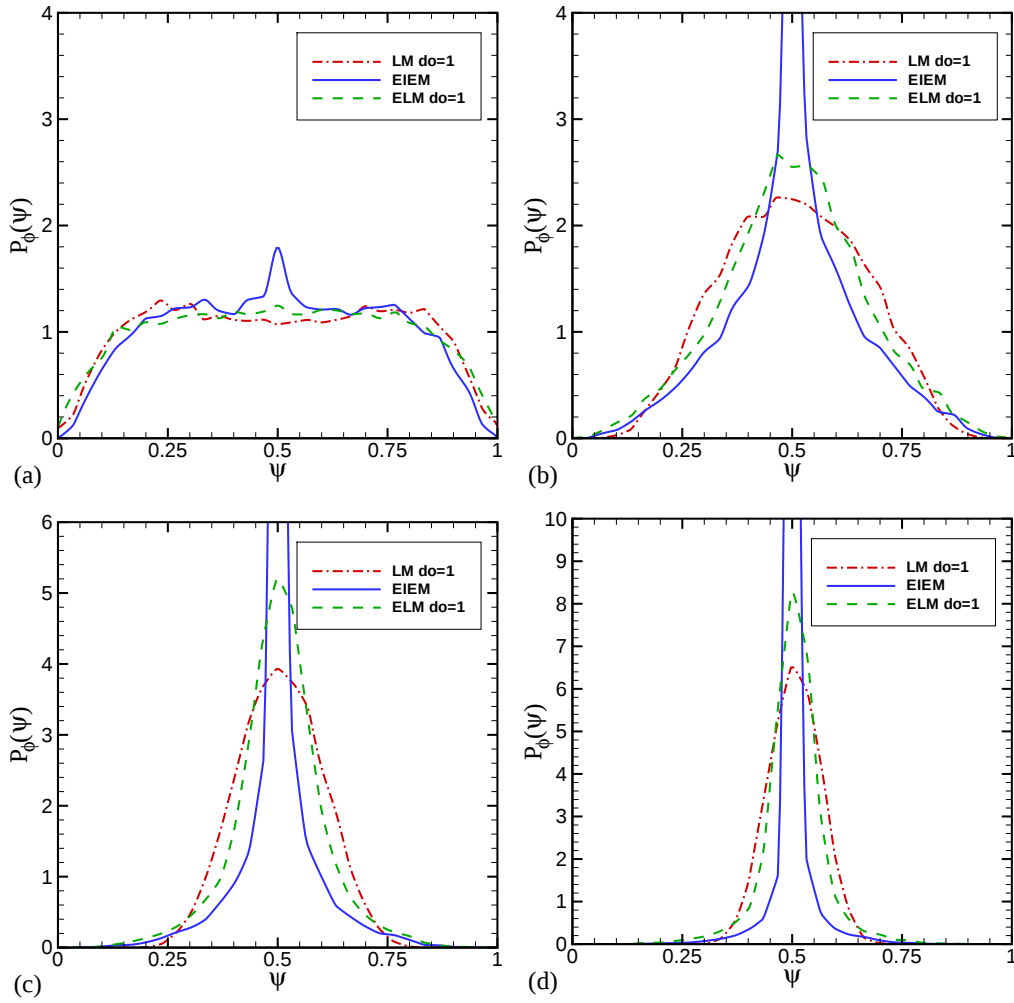


Figura 5.8: Comparação da evolução das PDF entre os modelos de mistura Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para $d_o = 1, 0$; $\langle \omega \rangle = 100$ Hz. e $\langle \omega_\phi \rangle t = 0, 50$, (a) ; 1,0 (b); 1,5 (c) e 2,0 (d); A PDF inicial é uma distribuição Beta.

estocástico que modela a influência da taxa de dissipação escalar, isto é, para $d_0 = 0, 25, 0, 5, 0, 75$ e 1. Pode-se perceber na figura 5.10 que, para estágios iniciais da mistura, a PDF apresenta formas que são diferentes, segundo a escolha de d_0 . Note-se que pequenos valores de d_0 reforçam o peso do modelo IEM e, conseqüentemente, acarretam um efeito de “memória” da forma inicial da PDF mais pronunciado do que para grandes valores de d_0 . As diferentes formas da PDF tendem a uma única Gaussiana para tempos longos. Esta afirmação é comprovada pelos resultados mostrados na figura 5.11, pois os valores de S_4 e S_6 tendem assintoticamente para aqueles de uma Gaussiana.

Na figura 5.11 pode se verificada a influência da escolha de d_0 no histórico dos principais momentos estatísticos durante o transiente. No caso da média do escalar, o desvio da condição inicial é incrementado de forma insignificante à medida que aumenta d_0 . A discrepância é máxima para $d_0 = 1$, porém é

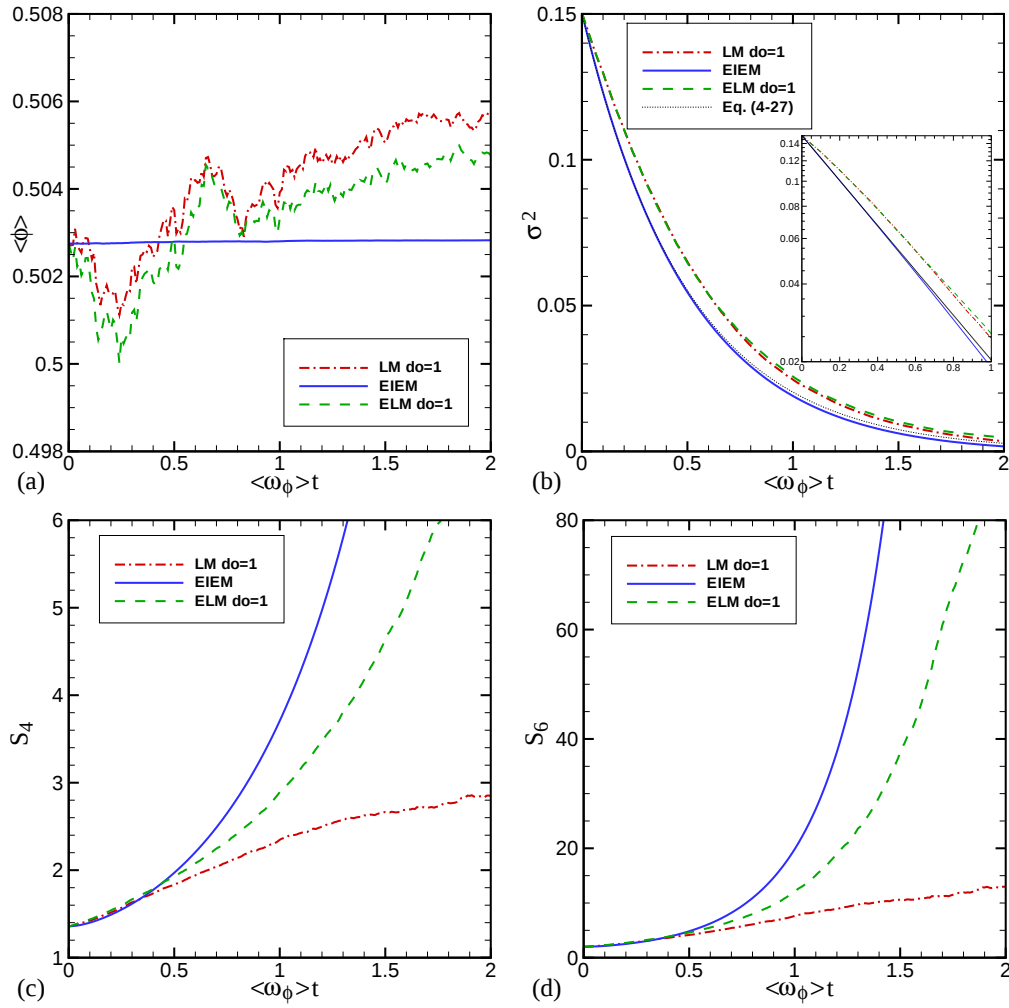


Figura 5.9: Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura de Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para $d_0 = 1,0$ e $\langle \omega \rangle = 100 \text{ Hz}$; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição Beta.

inferior a 0,6%. Note-se que o aumento da discrepância com o valor de d_0 é consistente com o aumento do peso do termo estocástico de mistura turbulenta. Além disso, a figura 5.11(a) mostra um amortecimento das pequenas variações do valor médio do escalar para valores de $\langle \omega \phi \rangle t$ maiores que 3. Esta queda das flutuações de $\langle \phi \rangle$ indica que a PDF se tornou auto-similar.

Quando se observa a evolução da variância do escalar inerte, percebe-se que, a escolha de d_0 influi na queda das flutuações do escalar. Quanto maior o valor de d_0 , maior o desvio em relação à solução analítica.

No caso da Curtose e da Hiper-curtose, as variações devidas à escolha do parâmetro d_0 acompanham a evolução da forma da PDF mostrada na figura 5.10; quanto menor d_0 , mais lenta a evolução da PDF para a forma de uma Gaussiana.

Para examinar a influência da escolha do tempo turbulento, $\tau_t = \langle \omega \rangle^{-1}$,

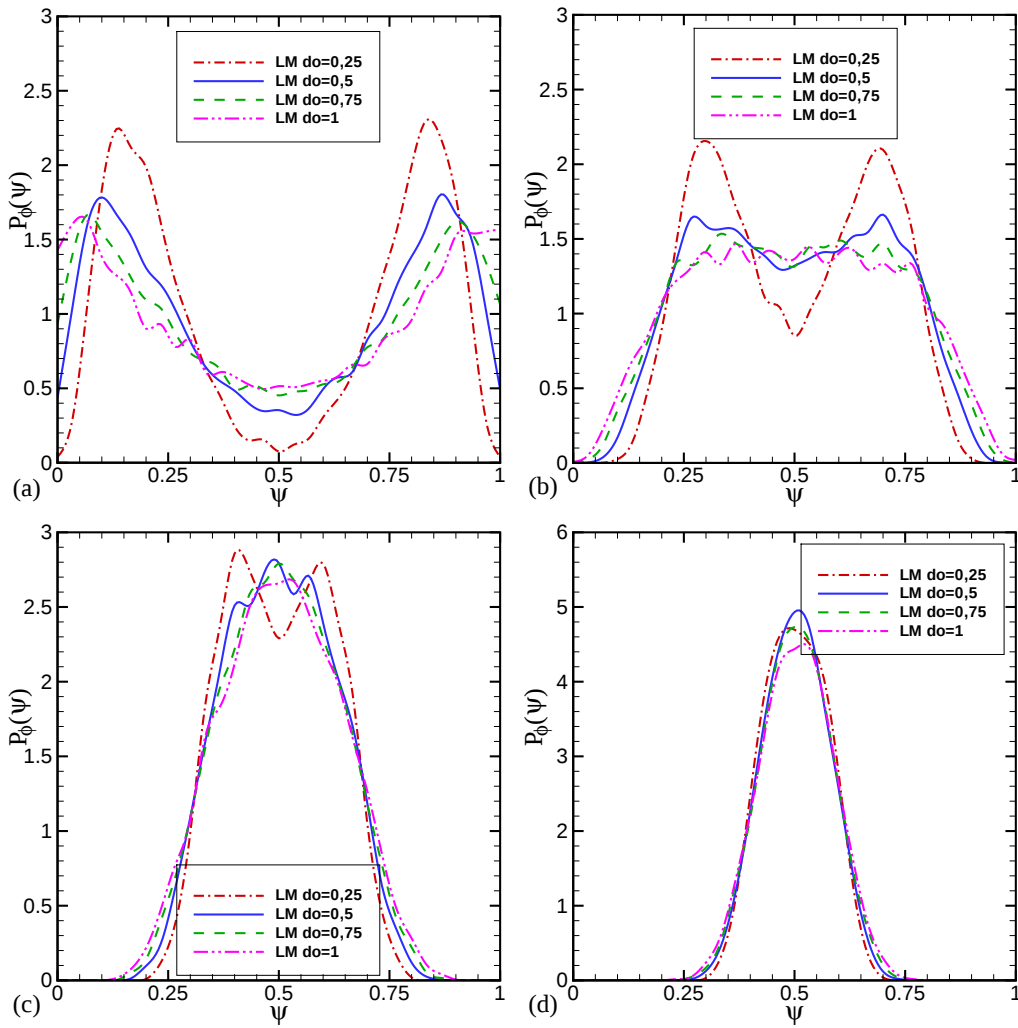


Figura 5.10: Comparação da evolução das PDFs do modelo de Langevin (LM) para diferentes valores de d_o ; com $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5$ (a); $1,0$ (b); $1,5$ (c) e $2,0$ (d); A PDF inicial é duplo delta de Dirac.

no processo da mistura descrito pelo modelos estendidos, adotou-se para fins de análise, o modelo IEM estendido (EIEM). As diferentes frequências turbulentas médias utilizadas foram 50, 100, 150 e $200Hz$. As figuras 5.12 e 5.13 mostram, respectivamente, a evolução e os principais momentos estatísticos da PDF usando o modelo EIEM para estes valores de frequências. Na figura 5.12, é possível constatar que a frequência turbulenta não influi de forma perceptível na evolução da forma PDF, o que está de acordo com os resultados obtidos por Eswaran e Pope (1988) mediante a Simulação Numérica Direta (DNS).

A figura 5.13, que apresenta o histórico dos momentos estatísticos da PDF mostra que a modificação da média não é maior que 0,3% para os diferentes valores de frequência turbulenta média. Este pequeno desvio parece estar associado à dispersão envolvida na solução numérica da equação diferencial estocástica, que descreve a frequência turbulenta como um processo estocástico

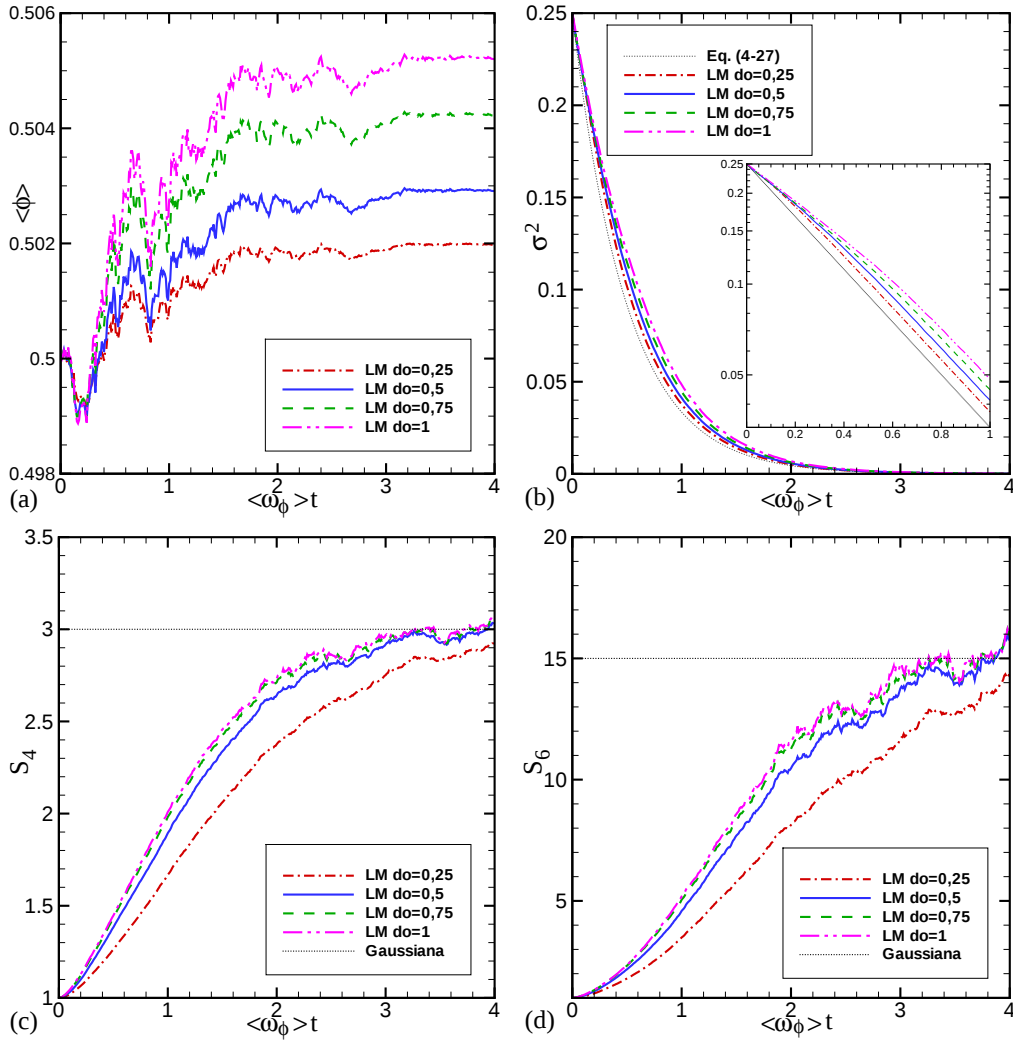


Figura 5.11: Comparação dos momentos estatísticos da PDF do modelo de Langevin (LM) para diferentes valores de d_o ; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

do tipo Ornstein-Uhlenbeck [Eq. (4-65)] (Gardiner, 1990). Esta pequena variação da média é acompanhada de uma mudança insignificante da variância do escalar. Os valores da Curtose S_4 e da Hiper-curtose S_6 , são incrementados à medida em que se aumenta a frequência turbulenta média. Acredita-se que este comportamento seja devido à propagação de erros de discretização, suposição esta que deve de ser confirmada em trabalhos futuros.

5.1.4

Comparação com os resultados obtidos por Eswaran e Pope (1988) e por Soulard (2005)

Para fins de comparação com os resultados obtidos por Soulard (2005), considerou-se como PDF inicial uma distribuição de tipo Beta com média

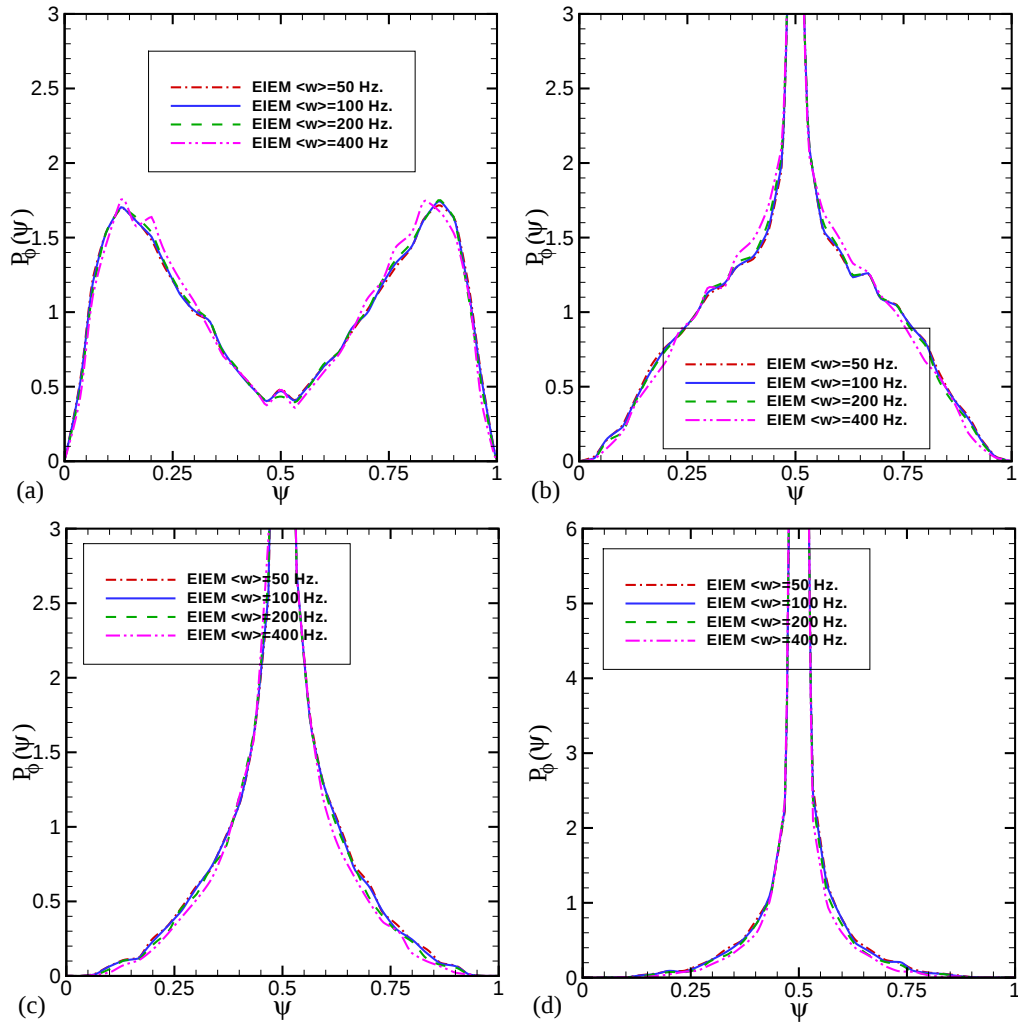


Figura 5.12: Comparação da evolução das PDF do modelo IEM Estendido (EIEM) para diferentes valores de frequência média de velocidade $\langle \omega \rangle$; $\langle \omega_\phi \rangle t = 0, 5$ (a) ; $1, 0$ (b); $1, 5$ (c) e $2, 0$ (d); A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

igual a $0,5$ e uma variância igual a $0,15$, mostrada na figura 5.1(b). A evolução da taxa de dissipação escalar média $\langle \varepsilon_\phi \rangle$ foi retirada do trabalho de Eswaran e Pope (1988). Cabe ressaltar que a distribuição Beta considerada como PDF inicial representa de forma aproximada a PDF inicial empregada na DNS de Eswaran e Pope (1988).

A figura 5.14 apresenta a comparação da evolução da PDF obtida pelos modelos de mistura de Langevin (LM), IEM estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) com os resultados obtidos por Eswaran e Pope (1988). Pode-se perceber que, embora a condição inicial considerada seja diferente daquela utilizada na Simulação Numérica Direta (DNS), existe uma boa concordância qualitativa entre as PDFs obtidas com modelos EIEM e ELM e aquela obtida pela DNS. Como já foi discutido anteriormente, os modelos EIEM e ELM

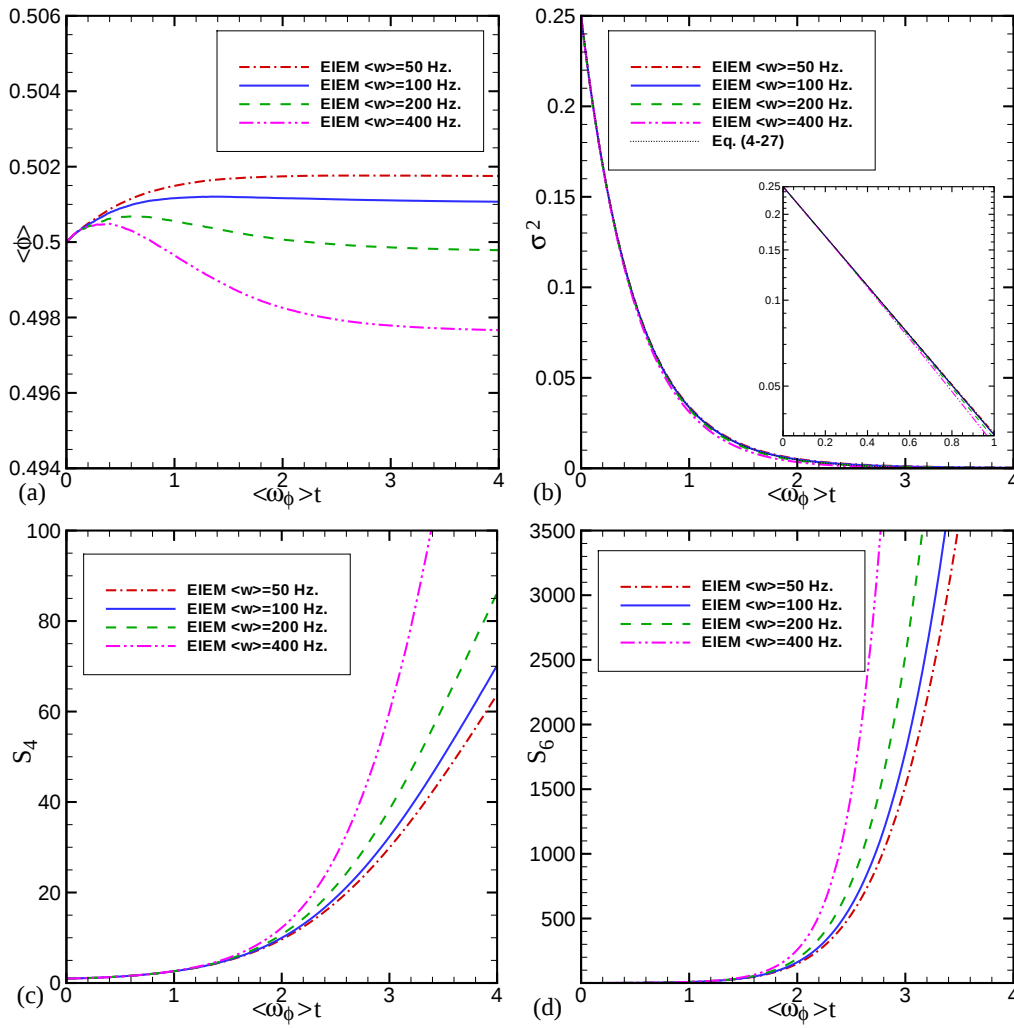


Figura 5.13: Comparação dos momentos estatísticos da PDF do modelo IEM Estendido (EIEM) para diferentes valores de frequência média de velocidade $\langle \omega \rangle$; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição delta duplo de Dirac.

resultam em PDFs que são Super-Gaussianas, como se pode perceber na figura 5.15, onde os valores de S_4 e S_6 obtidos para estes modelos crescem monotonicamente atingindo valores mais altos do que os valores Gaussianos (3 e 15 respectivamente). Este crescimento da curtose e da hiper-curtose é maior do que aquele obtido pela DNS.

Como se pode perceber nas figuras 5.18 e 5.19, Soulard (2005) mediante a utilização da técnica dos volumes finitos de segunda ordem na solução das equação de transporte da PDF, e considerando as mesmas condições iniciais impostas por Eswaran e Pope (1988), obtiveram resultados equivalentes aos do presente trabalho para os modelos do tipo estendido.

O conjunto de resultados apresentados nesta seção permite afirmar que o código computacional desenvolvido é capaz de simular os diferentes modelos de

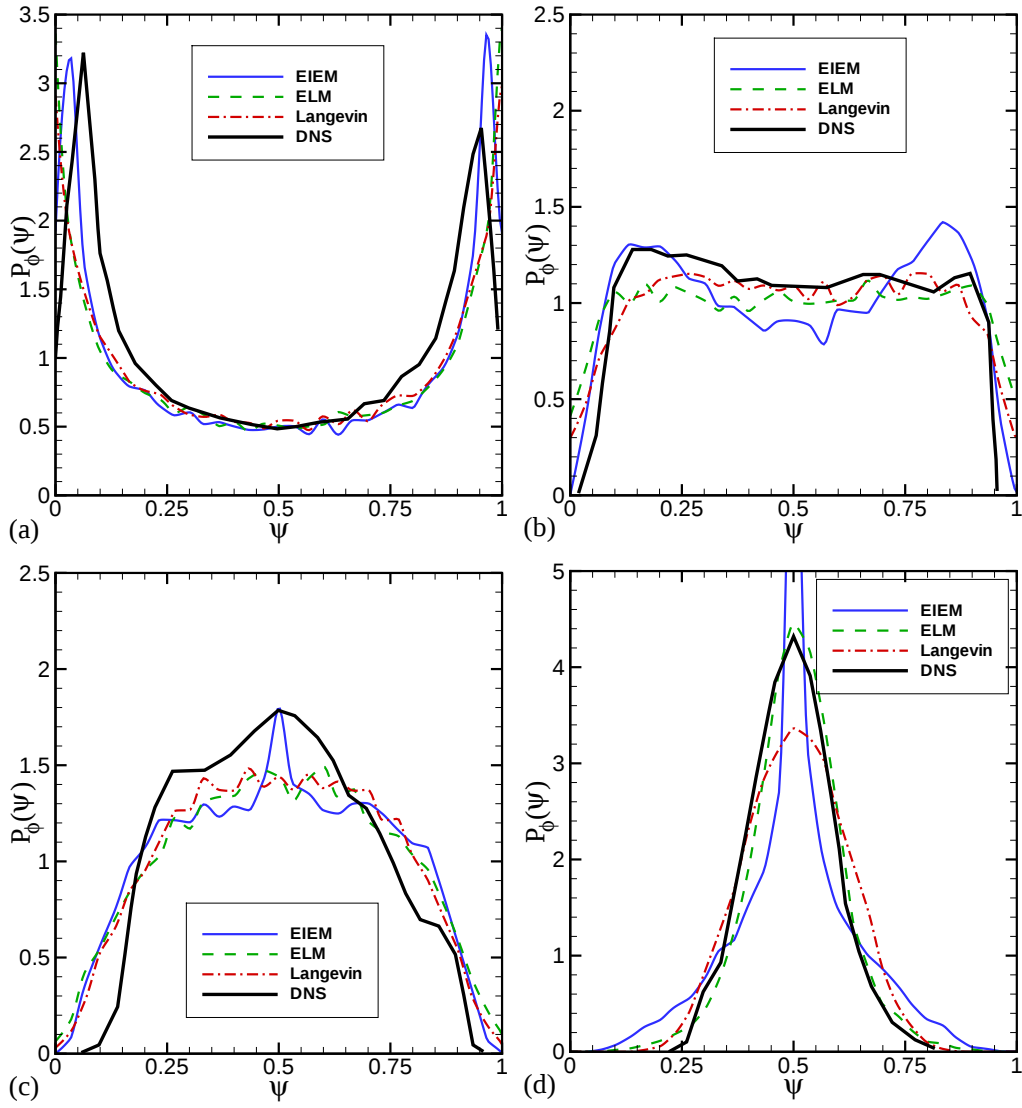


Figura 5.14: Comparação das PDFs do escalar modeladas com os dados da DNS. $(\langle\omega\rangle t, \sigma/\sigma_0) = (0, 22; 0, 99)$ (a); $(1, 49; 0, 73)$ (b); $(2, 11; 0, 55)$ (c); $(3, 47; 0, 27)$ (d). A PDF inicial é uma distribuição Beta com $\langle\phi\rangle = 0,5$ e $\sigma_0^2 = 0,15$.

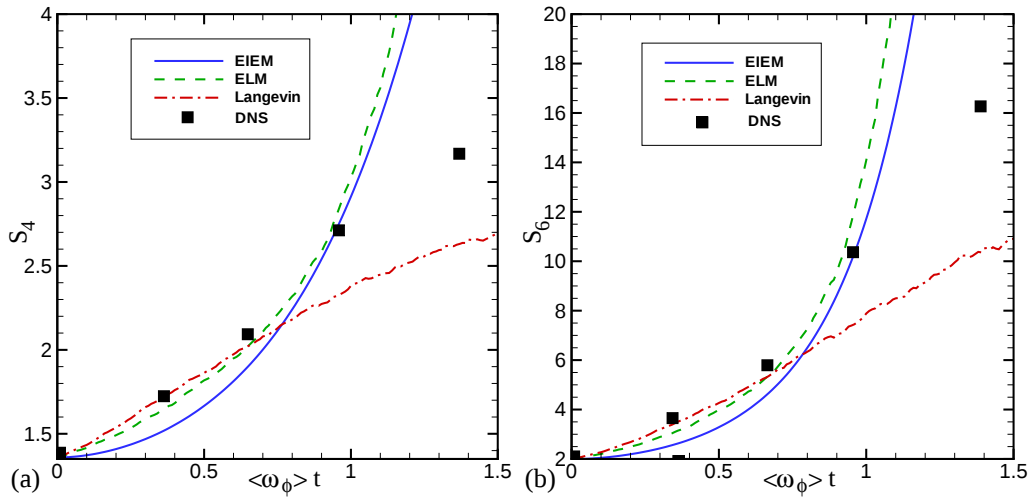


Figura 5.15: Comparação dos fatores da Curtose e da Hiper-curtose com os resultados DNS. (a) Curtose; (b) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição Beta com $\langle \phi \rangle = 0,5$ e $\sigma_0^2 = 0,15$.

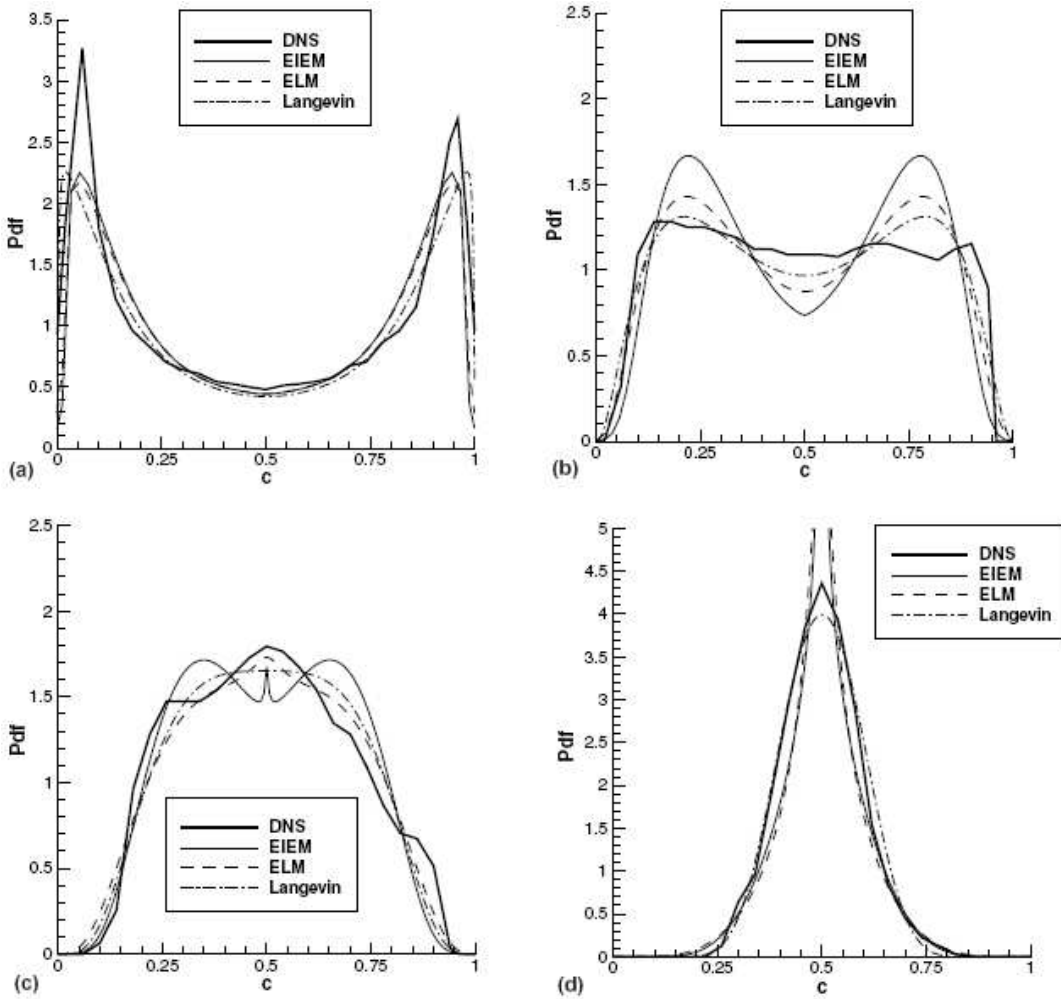


Figura 5.16: Resultados obtidos por Soulard, (2005) da comparação entre as PDF do escalar modeladas com os dados da DNS. $(\langle \omega \rangle t, \sigma/\sigma_0) = (0, 22; 0, 99)$ (a); $(1, 49; 0, 73)$ (b); $(2, 11; 0, 55)$ (c); $(3, 47; 0, 27)$ (d).

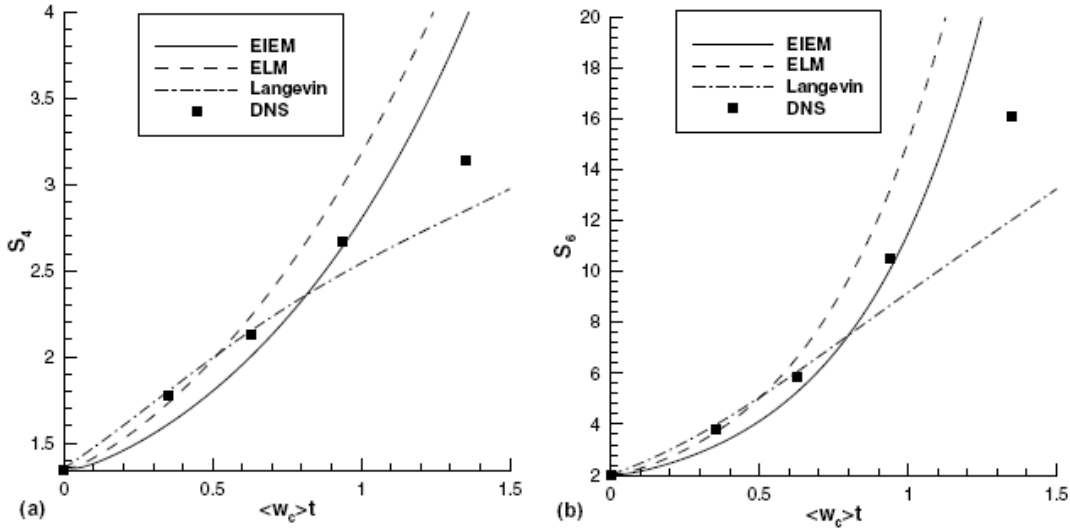


Figura 5.17: Resultados foram obtidos por Soulard (2005) da comparação dos fatores da curtose e da Hiper-curtose com respeito à DNS. (a) Curtose; (b) Hiper-curtose.

mistura. Além disto, em concordância com os resultados obtidos por Soulard (2005), apenas modelo de Langevin (LM) leva a uma PDF Gaussiana auto-similar, e os modelos estendidos acarretam um comportamento divergente da Curtose e da Hiper-curtose.

5.2

Simulação do PaSR

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos para o PaSR utilizando a técnica de Monte-Carlo e levando-se em conta o modelo de mistura IEM e os modelos de mistura desenvolvidos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski, (2001). Será apresentado um estudo da influência do valor de d_0 e dos parâmetros $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$ e $\mathcal{Z}$ sobre os processos da combustão.

5.2.1

Condições Iniciais Impostas

Os parâmetros iniciais considerados para simulação estocástica pelo método de Monte-Carlo foram $N_p = 4^6$ partículas dentro do PaSR, e o número de partículas escolhidas a serem substituídas a cada passo de tempo adimensional, Δt^* , foi de $N_{sub} = 4^3$, desta forma, o erro estatístico é reduzido de forma considerável além de manter um tempo computacional razoável. Uma vez que o tempo de residência é calculado pela relação

$$\tau_r = \frac{N_p \Delta t}{N_{sub}}, \quad (5-1)$$

o passo do tempo adimensional $\Delta t^* = \Delta t / \tau_r = N_{sub} / N_p$ é igual a 4^{-3} . No início da simulação, todas as partículas estocásticas contêm apenas gases não queimados, isto é, $c(t=0) = 0$.

Para a descrição do termo de produção química, os valores adimensionais do calor de reação reduzido, α , e a energia de ativação reduzida, β , que foram utilizados em todas as simulações apresentadas neste trabalho são iguais a 0,8 e 15 respectivamente. Estes valores são idênticos aos utilizados por Sabel`nikov e Figueira da Silva (2002) pois a solução semi-analítica do PaSR em regime permanente usando o modelo IEM, desenvolvida por estes autores será utilizada para fins de comparação.

Para o caso reativo que corresponde à operação de um PaSR, foi verificada que, simulações numéricas utilizando os modelos EIEM e ELM apresenta um tempo computacional que é 20 vezes maior da que aquelas simulações desenvolvidas usando o modelos IEM e LM.

5.2.2

Resultados obtidos para o caso de Combustão Intensa e Mistura Rápida

Para a avaliação dos modelos de mistura no processo de combustão intensa e de mistura rápida, utilizaram-se os seguintes parâmetros adimensionais: $\mathcal{X} = 0,167$ (ou $\mathcal{Z} = 0,167$) e $\mathcal{Y} = 2$. Note-se, nas Eqs. (4-99) e (4-101), que os valores de $\mathcal{X}$ (ou $\mathcal{Z}$) e $\mathcal{Y}$ controlam a intensidade dos processos de micro-mistura e de combustão, respectivamente.

A figura 5.18 mostra os histogramas da PDFs da variável de progresso de uma reação, c , obtida para os modelos de IEM e de Langevin (LM) para valores de $d_0 = 0,1; 0,4$ e $1,0$. Uma linha contínua traçada em todos os gráficos da figura 5.18 representa a PDF obtida por Sabel`nikov e Figueira da Silva (2002), mediante a solução semi-analítica e utilizando o modelo IEM. Note-se que não se dispõe de solução analítica para o modelo de Langevin (LM).

A figura 5.18 mostra que os resultados da presente simulação para o modelo IEM apresentam uma boa concordância com a solução semi-analítica. De outro lado, os histogramas que representam a PDF de c são diferentes entre o modelo IEM e o modelo de Langevin (LM), para diferentes valores numéricos de d_0 .

A figura 5.18 também mostra que a PDF obtida pelo modelo Langevin (LM) tende a diferir do modelo IEM à medida em que aumenta o valor do parâmetro que controla a taxa de dissipação do escalar, d_0 . Estas diferenças se manifestam por um aumento dos valores de $P(c)$ na vizinhança de $c = 0$, isto é, a natureza bi-modal da PDF de c é reforçada quando d_0 cresce. Assim, contrariamente ao caso inerte, onde o valor de d_0 não influencia o estado

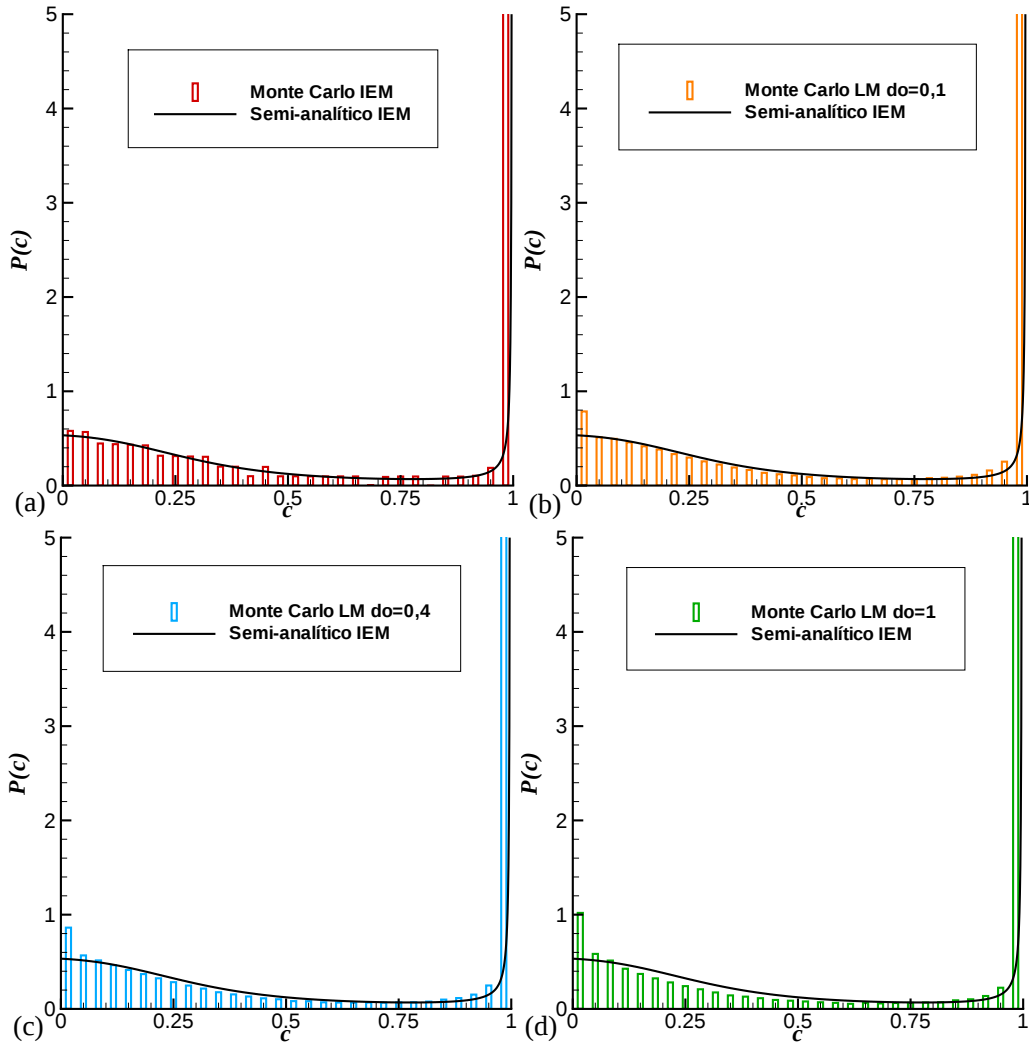


Figura 5.18: Comparação entre a PDFs teórica do modelo IEM (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de c para $\mathcal{X} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,167$ e para os modelos de mistura (a) IEM; (b) LM $d_0 = 0,1$; (c) LM $d_0 = 0,4$; (d) LM $d_0 = 1$. Regime de combustão intensa.

estacionário, a escolha deste parâmetro modifica o funcionamento permanente do PaSR.

A figura 5.19 mostra os histogramas que representa as PDFs de c , para o caso da combustão intensa com mistura rápida (para $\mathcal{Z} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,167$) levando em conta os modelos IEM estendido (EIEM) e Langevin estendido (ELM) com valores de $d_0 = 0,1$; $0,4$; e 1 respectivamente. A figura 5.19(a) mostra que a PDF obtida com o modelo EIEM apresenta uma diferença significativa com respeito ao modelo IEM. O valor da PDF obtida pelo modelo EIEM é maior nas zonas próximas aos gases não queimados ($c \rightarrow 0$) e menor na zona dos gases queimados ($c \rightarrow 1$), o que tem como consequência uma redução do valor médio de c em comparação com aquele obtido pelo modelo IEM, como será visto adiante.

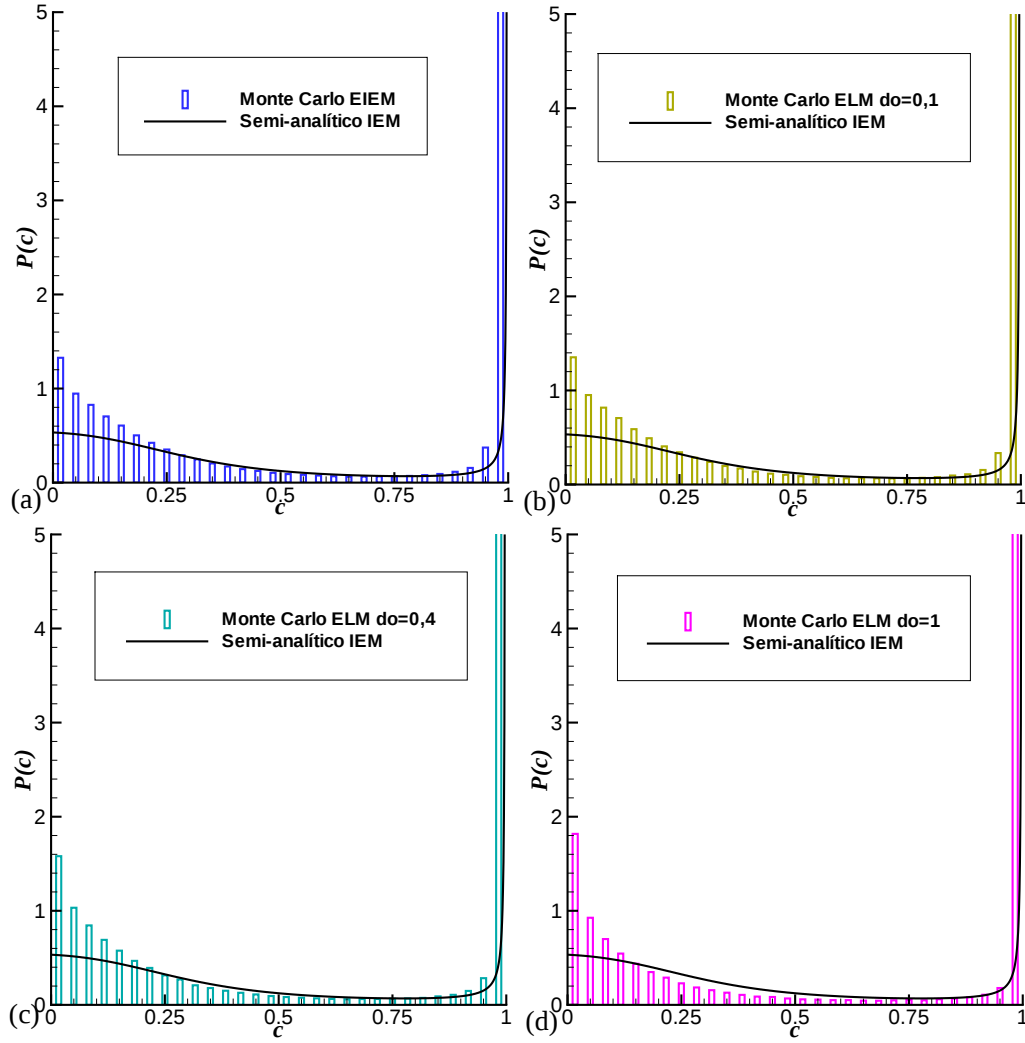


Figura 5.19: Comparação entre a PDFs teóricas para o modelo IEM (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de c para $Z = 2$ e $Y = 0,167$ e para os modelos de mistura (a) EIEM; (b) ELM $d_0 = 0,1$; (c) ELM $d_0 = 0,4$; (d) ELM $d_0 = 1$. Regime de combustão intensa.

A figura 5.19 mostra que a PDF obtida pelo modelo ELM, para $d_0 = 0,1$; $0,4$; e 1 , apresenta, como seria de esperar, um comportamento similar à do modelo LM quando $d_0 = 0,1$. O incremento progressivo de d_0 é acompanhado de um aumento da natureza bi-modal da forma da PDF nas zonas próximas aos gases frescos e quentes, e por um decréscimo do valor de $P(c)$ nas regiões centrais de c .

A comparação das figuras 5.18 e 5.19, permite verificar as diferenças entre as PDFs obtidas com os modelos EIEM e IEM. Como se pode verificar na figura 5.20, onde são mostrados o histórico dos momentos estatísticos da PDF de c , isto é, a média, $\langle c \rangle$, o desvio padrão, σ , e S_4 e S_6 . Os valores $\langle c \rangle$ e σ obtidos por Sabel'nikov e Figueira da Silva (2002), para o modelo IEM também são mostrados.

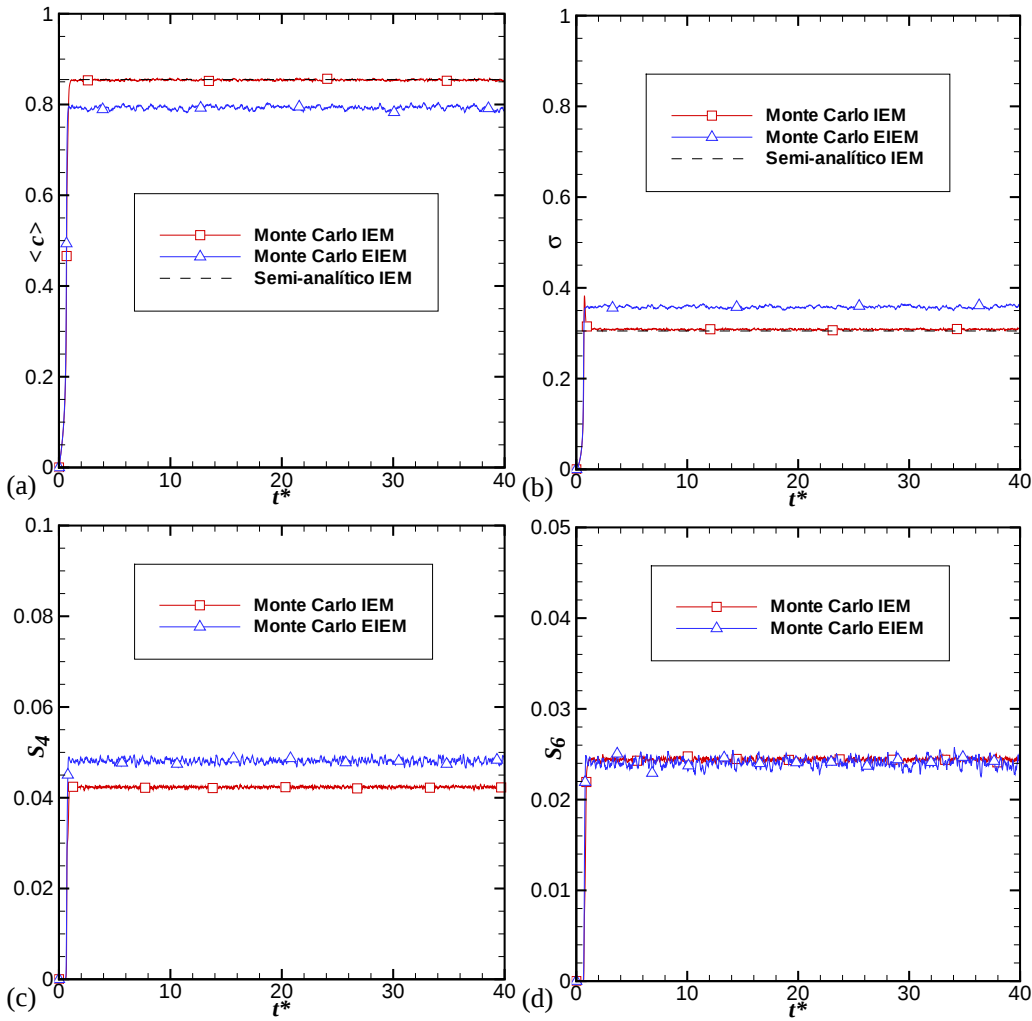


Figura 5.20: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de c para $Z = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,167$ e para os modelos de mistura IEM e EIEM. (a) Média $\langle c \rangle$; (b) Desvio padrão σ ; (c) Curtose S_4 ; (d) Hiper-curtose S_6 . Regime de combustão intensa.*

A figura 5.20 mostra o excelente acordo obtido entre os valores calculados da média e o desvio padrão de c , e aqueles oriundos da solução semi-analítica (Sabel'nikov e Figueira da Silva, 2002) o que permite validar a simulação estocástica desenvolvida para o PaSR utilizando o modelo IEM.

A figura 5.20 também mostra que a média obtida pelo modelo EIEM é aproximadamente 8% menor do que a calculada utilizando o modelo IEM, enquanto que a variância é 18% maior. Esta diferença é atribuída à tendência do modelo EIEM em fornecer PDFs com maiores valores nas vizinhanças de $c = 0$, isto é, à maior probabilidade de encontrar gases frescos, o que acarreta a diminuição do valor médio e o aumento do desvio padrão. Os comportamentos da Curtose e da Hiper-curtose de c , indica que o PaSR opera em regime estável.

As figuras 5.21 e 5.22 mostram o histórico dos principais momentos estatísticos da PDF de c utilizando os modelos de Langevin (LM) e Langevin

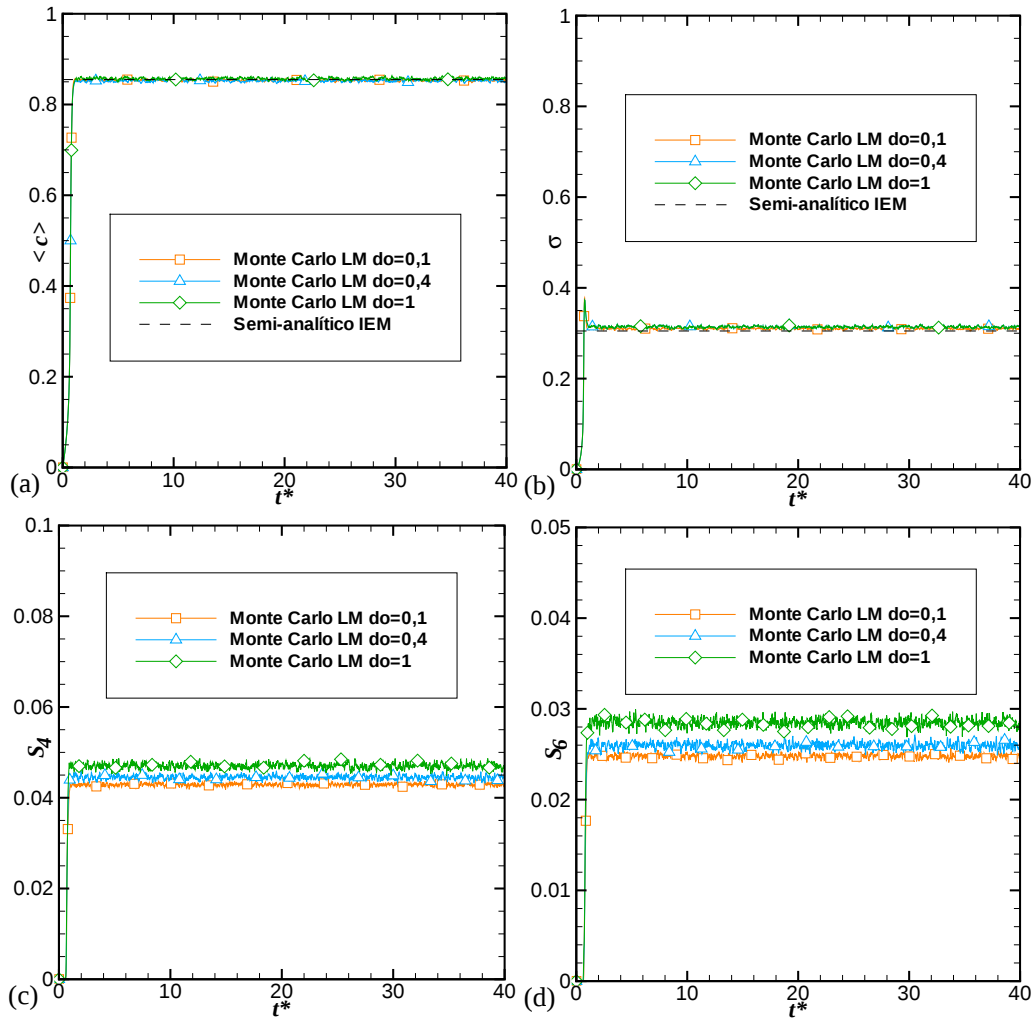


Figura 5.21: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de c para $\mathcal{X} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,167$ para o modelo de mistura de Langevin (LM) e para diferentes valores de d_0 . (a) Média $\langle c \rangle$; (b) Desvio padrão σ ; (c) Curtose S_4 ; (d) Hipercurtose S_6 . Regime de combustão intensa.*

estendido (ELM), e para diferentes valores de $d_0 = 0,1$; $0,4$; e 1 . Pode-se perceber, da figura 5.21, que um incremento de d_0 no modelo de Langevin (LM), acarreta uma variação menor do que 3% na média dos dois primeiros momentos de c . Os momentos de ordem superior aumentam com d_0 , porém este aumento é inferior a 15% quando d_0 aumenta de $0,1$ a 1 . Assim, nesta operação do PaSR de combustão intensa e mistura rápida, os diferentes valores adotados para d_0 no modelo de Langevin, não exercem uma influência sobre os processos da combustão.

Por comparação com o modelo EIEM, a tendência de aumento de $P(c)$, conforme d_0 é incrementado, fornecido pelo modelo ELM nas regiões próximas aos gases não queimados e queimados, faz com que a média calculada pelo modelo ELM seja incrementada à medida que o valor de d_0 aumenta. Este

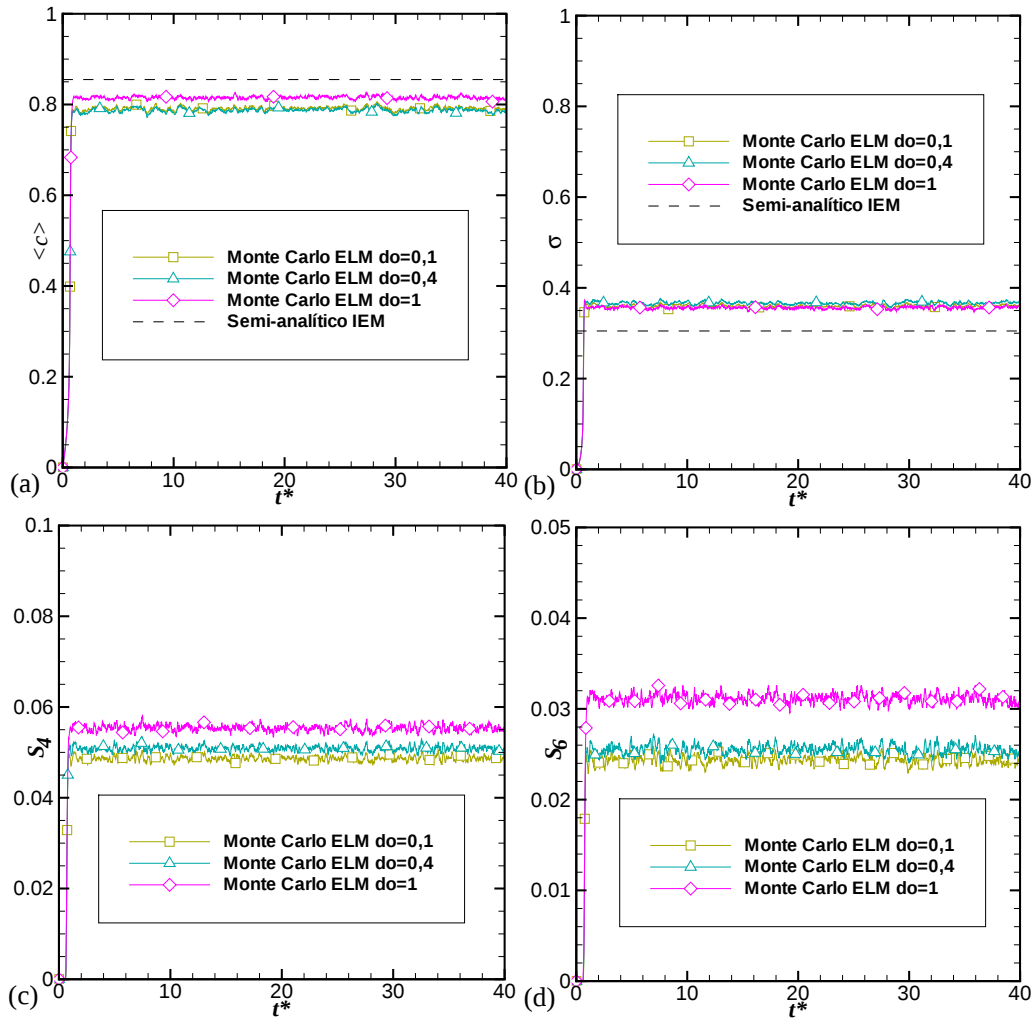


Figura 5.22: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de c para $Z = 2$ e $Y = 0,167$ para o modelo de mistura de Langevin estendido (ELM) e para diferentes valores de d_0 . (a) Média $\langle c \rangle$; (b) Desvio padrão σ ; (c) Curtose S_4 ; (d) Hiper- Curtose S_6 . Regime de combustão intensa.*

incremento imperceptível, para $d_0 = 0,1$ e $0,4$, é mais notório para $d_0 = 1$, cuja média é apenas 5% menor do que do modelo IEM, enquanto que a média calculada pelo modelo ELM para $d_0 = 0,1$ e $0,4$ é 8% menor.

Uma comparação entre as figuras 5.20(b) e 5.22(b) mostra a grande semelhança dos valores estacionários do desvio padrão obtido com o modelos EIEM e ELM com $d_0 = 0,1$; $0,4$; e 1 . Estes valores são 20% maiores do que aqueles calculados pelos modelos IEM e LM com $d_0 = 0,1$; $0,4$; e 1 .

5.2.3

Resultados Obtidos para o Caso de Combustão Moderada e Mistura Lenta

Nesta seção são avaliados o desempenho dos modelos de mistura em um caso representativo da situação em que a mistura é lenta e a combustão é mode-

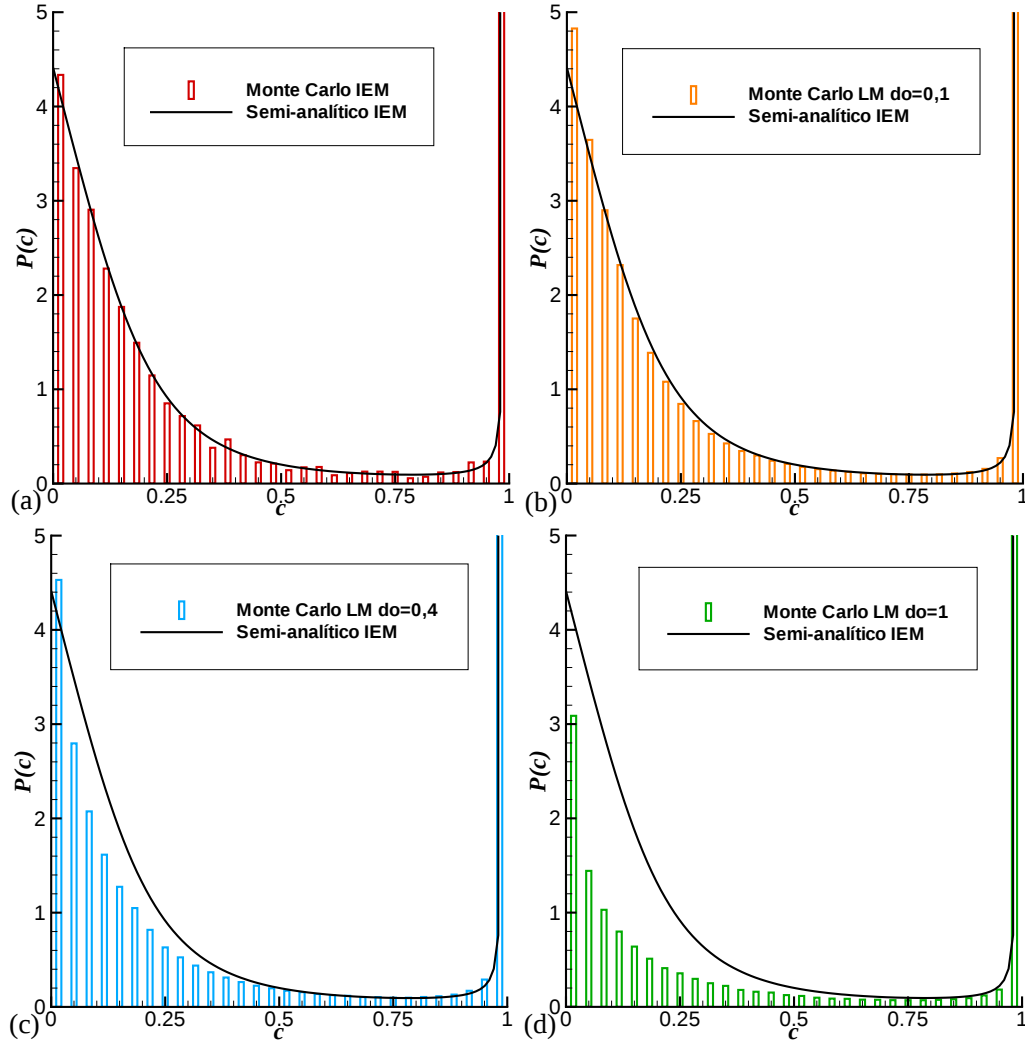


Figura 5.23: Comparação entre a PDF teórica (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de c para $\mathcal{X} = 0,5$ e $\mathcal{Y} = 0,042$ e para os modelos de mistura (a) IEM; (b) LM $d_0 = 0,1$; (c) LM $d_0 = 0,4$; (d) LM $d_0 = 1$. Regime de combustão moderada.

rada. Para este fim, consideraram-se os mesmos parâmetros adimensionais que Sabel'nikov e Figueira da Silva (2002) para a análise do modelo de mistura IEM, isto é, $\mathcal{X} = 0,5$ ($\mathcal{Z} = 0,5$ para os modelos estendidos) e $\mathcal{Y} = 0,042$.

A figura 5.23 mostra os histogramas das PDFs de c , utilizando o modelo IEM e o modelo de Langevin (LM) para valores de $d_0 = 0,1$; $0,4$ e 1 . Nesta figura também é traçada a PDF para o modelo IEM obtida por Sabel'nikov e Figueira da Silva (2002) mediante o método semi-analítico.

No caso do modelo IEM, mostrado na figura 5.23(a), existe uma excelente concordância entre os resultados obtidos pela abordagem semi-analítica e pela simulação estocástica. Este acordo permite confirmar a validade da técnica de Monte-Carlo empregada. Note-se que não se dispõe de solução exata no caso dos demais modelos de mistura. Assim, a presença da solução teórica nos

demais gráficos deve ser vista apenas como elemento de comparação entre os diferentes modelos.

A figura 5.23(a) também permite verificar que a PDF é de tipo bi-modal, na qual a probabilidade de encontrar gases não queimados $P(c = 0)$ é maior que no caso da combustão intensa. Como consequência, ocorre uma diminuição da média da variável de progresso da reação, em comparação ao valor médio obtido no caso da combustão intensa.

Os gráficos (b), (c) e (d) da figura 5.23, mostram a PDF de c usando o modelo de Langevin para $d_0 = 0, 1; 0, 4$ e 1 respectivamente. Neste caso, a probabilidade de encontrar gases não queimados, $P(c = 0)$ aumenta ligeiramente para pequenos valores de d_0 , para em seguida diminuir a medida que d_0 aumenta. Este incremento de d_0 é acompanhado a uma mudança na forma da PDF, a qual passa a privilegiar os gases queimados. Além disto, o módulo derivada da PDF nas imediações de $c = 0$, $dP(c)/dc$, aumenta consideravelmente quando d_0 cresce, simultaneamente à curvatura, $|d^2P(c)/dc^2|$, a qual está associada ao termo de difusão da equação de transporte da PDF Eq. 4-101, o que também aumenta. Desta forma é verificado que, em oposição ao caso da combustão intensa, a escolha de d_0 influi fortemente na forma da PDF.

Um comportamento similar é mostrado na figura 5.24, que apresenta a PDF de c utilizando os modelos IEM estendido (EIAM) e o modelo de Langevin estendido (ELM) para $d_0 = 0, 1; 0, 4$ e 1 . Esta figura também mostra, a título de comparação, a PDF obtida da solução semi-analítica correspondente ao modelo IEM. O incremento de d_0 conduz a uma redução progressiva de valores da PDF na vizinhança da zona correspondente aos gases não queimados. Este decréscimo é acompanhado de um incremento considerável da PDF nas zonas próximas aos gases queimados. Este incremento acarreta um aumento do valor médio de c .

A figura 5.24 também mostra que, quando $d_0 = 0, 1$, o resultado obtido com o modelo ELM é muito próximo àquele dado pelo modelo EIAM. Neste caso, a probabilidade de encontrar-se gases não queimados no PaSR é muito maior do que para o modelo IEM.

Uma comparação da figura 5.24(a) com respeito à figura 5.23(a), mostra que a PDF fornecida pelo modelo EIAM difere significativamente daquela obtida pelo método IEM. A PDF obtida com o modelo EIAM é maior na zonas dos gases não queimados e menor nos gases queimados em relação com a PDF obtida pelo modelo IEM. Além disto, o valor absoluto da derivada $dP(c)/dc$ na vizinhança de $c = 0$ é maior no caso do modelo EIAM do que no caso do modelo IEM. Isto indica que a presença de um espectro de flutuações da frequência turbulenta aumenta o fluxo da PDF no interior do PaSR. Desta

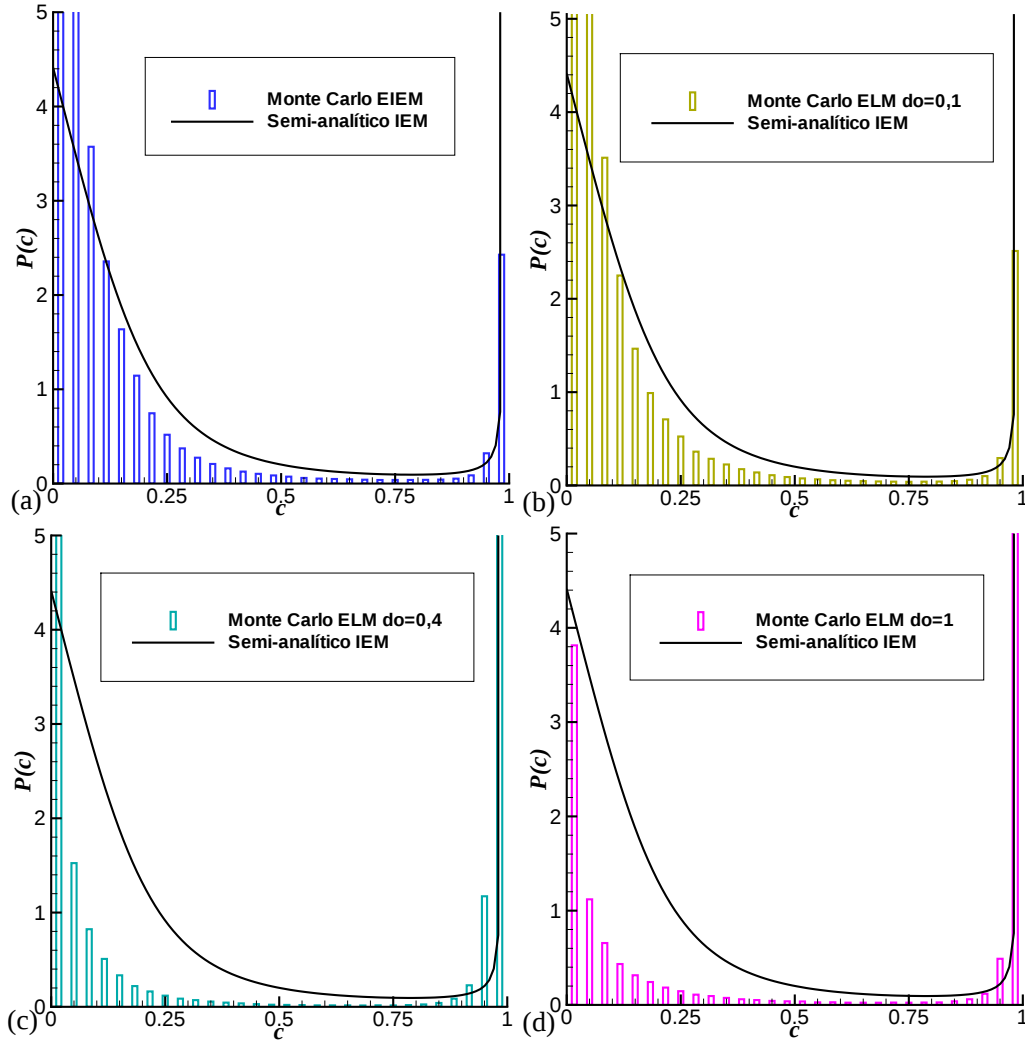


Figura 5.24: Comparação entre a PDF teórica (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de c para $\mathcal{Z} = 0,5$ e $\mathcal{Y} = 0,042$ e para os modelos de mistura (a) EIEM; (b) ELM $d_0 = 0,1$; (c) ELM $d_0 = 0,4$; (d) ELM $d_0 = 1$. Regime de combustão moderada.

forma, o valor médio da variável de progresso da reação obtido através do modelo EIEM é menor do que o fornecido pelo modelo IEM.

As figuras 5.25, 5.26 e 5.27 mostram o histórico dos principais momentos estatísticos de c , os quais correspondem às PDFs apresentadas nas figuras 5.23 e 5.24.

Na figura 5.25 pode-se perceber uma diferença com respeito aos momentos estatísticos fornecidos pela utilização dos modelos IEM e EIEM. No tocante à média de c , o modelo EIEM fornece uma média que é cerca de 50% menor daquela calculada com o modelo IEM, enquanto que o desvio padrão calculado com o modelo EIEM é 20% menor do que o obtido com o modelo IEM. Esta mudança notável dos dois primeiros momentos acompanha o comportamento observado nas PDFs, que é de valores mais altos na zona próxima aos gases

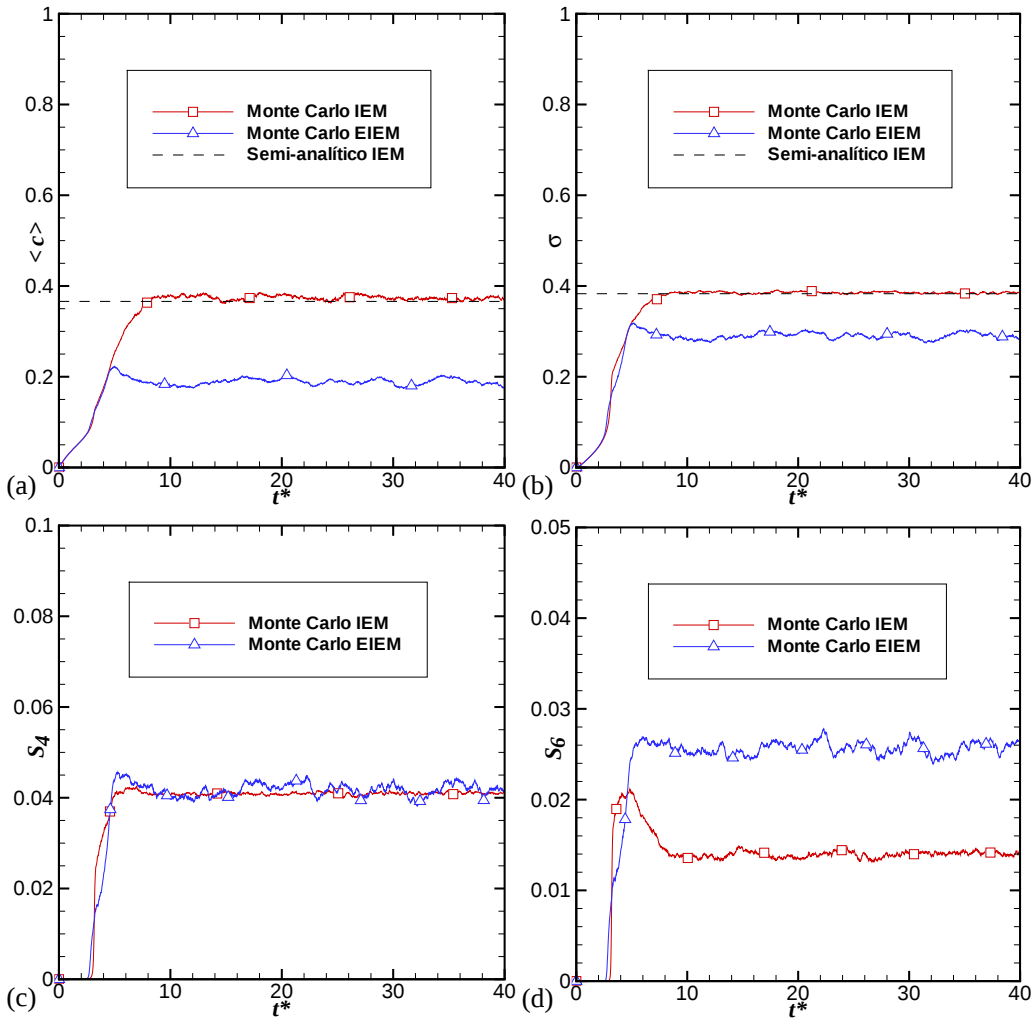


Figura 5.25: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de c para $\mathcal{Z} = 0,5$ e $\mathcal{Y} = 0,042$ e para os modelos de mistura IEM e ELEM. (a) Média $\langle c \rangle$; (b) Desvio padrão σ ; (c) Curtose S_4 ; (d) Hiper-curtose S_6 . Regime de combustão moderada.*

frescos e uma diminuição da PDF na zona dos gases queimados.

Este comportamento do modelo ELEM está relacionado à existência de um espectro de frequências características do processo turbulento, descrito pela Eq. (4-105), contrariamente ao modelo IEM, caracterizado apenas pelo valor médio de frequência. Ao aumentar $|dP(c)/dc|$ nas imediações de $c = 0$, as flutuações da frequência da turbulência aumentam a influência dos gases não queimados no interior do PaSR. Neste caso de mistura lenta e combustão moderada, este efeito resulta num decréscimo da taxa global da produção química.

Os gráficos (c) e (d) da figura 5.25, que correspondem ao histórico de S_4 e S_6 , permitem verificar que surpreendentemente, o primeiro destes não foi afetado, enquanto que o outro aumenta um 80% quando se passa do modelo IEM para o ELEM.

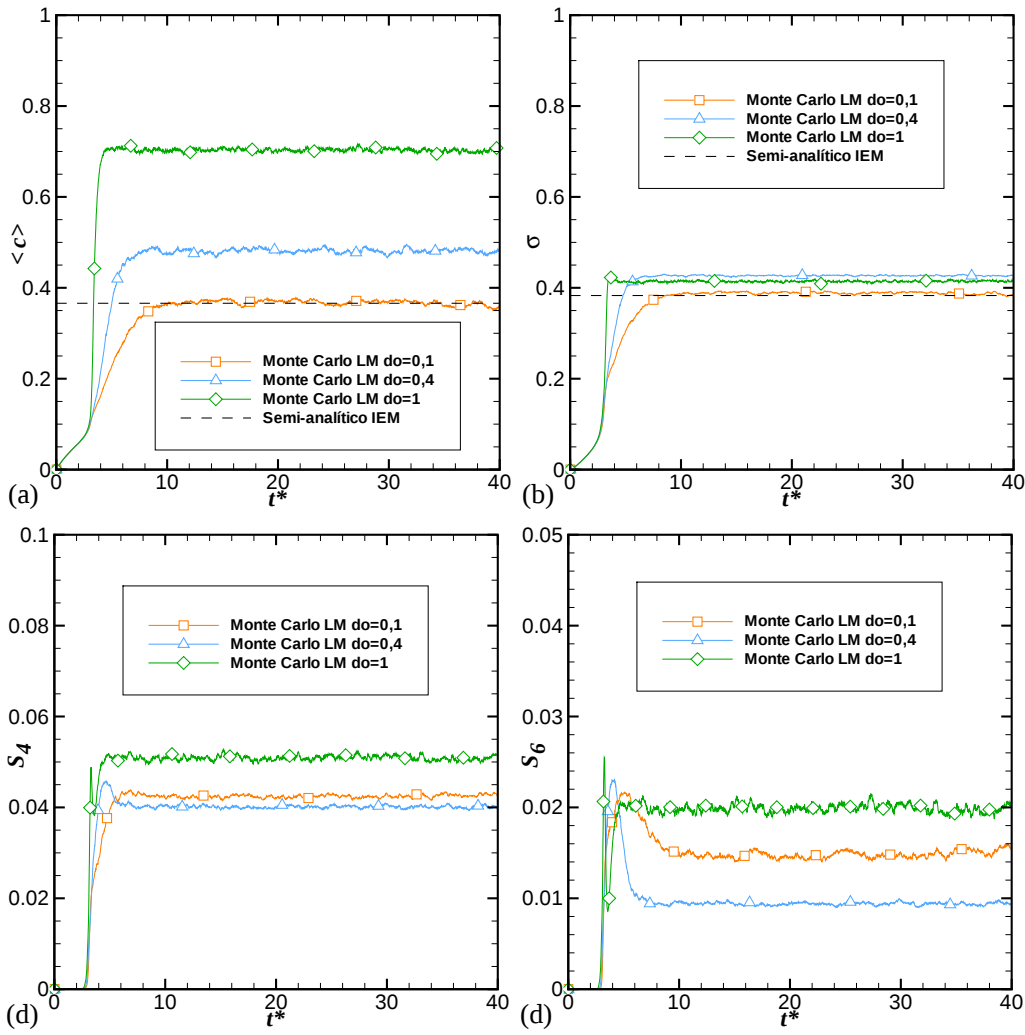


Figura 5.26: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de c para $\mathcal{X} = 0,5$ e $\mathcal{Y} = 0,042$ para o modelo de mistura de Langevin (LM) e para diferentes valores de d_0 . (a) Média $\langle c \rangle$; (b) Desvio padrão σ ; (c) Curtose S_4 ; (d) Hipercurtose S_6 . Regime de combustão moderada.*

Da mesma forma, a figura 5.26 apresenta o histórico dos principais momentos estatísticos da PDF de c utilizando o modelo de Langevin (LM) para $d_0 = 0,1; 0,4$ e 1 . De maneira análoga ao caso da combustão intensa e mistura rápida, a medida que o valor de d_0 é aumentado, a média de c é incrementada. Este aumento progressivo de c é até 90% em relação àquele valor fornecido pelo modelo IEM. Assim, a escolha de d_0 influi fortemente na média de c que exibe um comportamento crescente. Por outro lado, o desvio padrão de c aparentemente não se encontra correlacionado com a escolha de d_0 . Um comportamento não monótono é verificado no caso do quarto e sexto momentos, reflete as mudanças qualitativas complexas observadas na forma das PDFs obtidas.

O comportamento crescente de $\langle c \rangle$ com d_0 para o caso do modelo LM

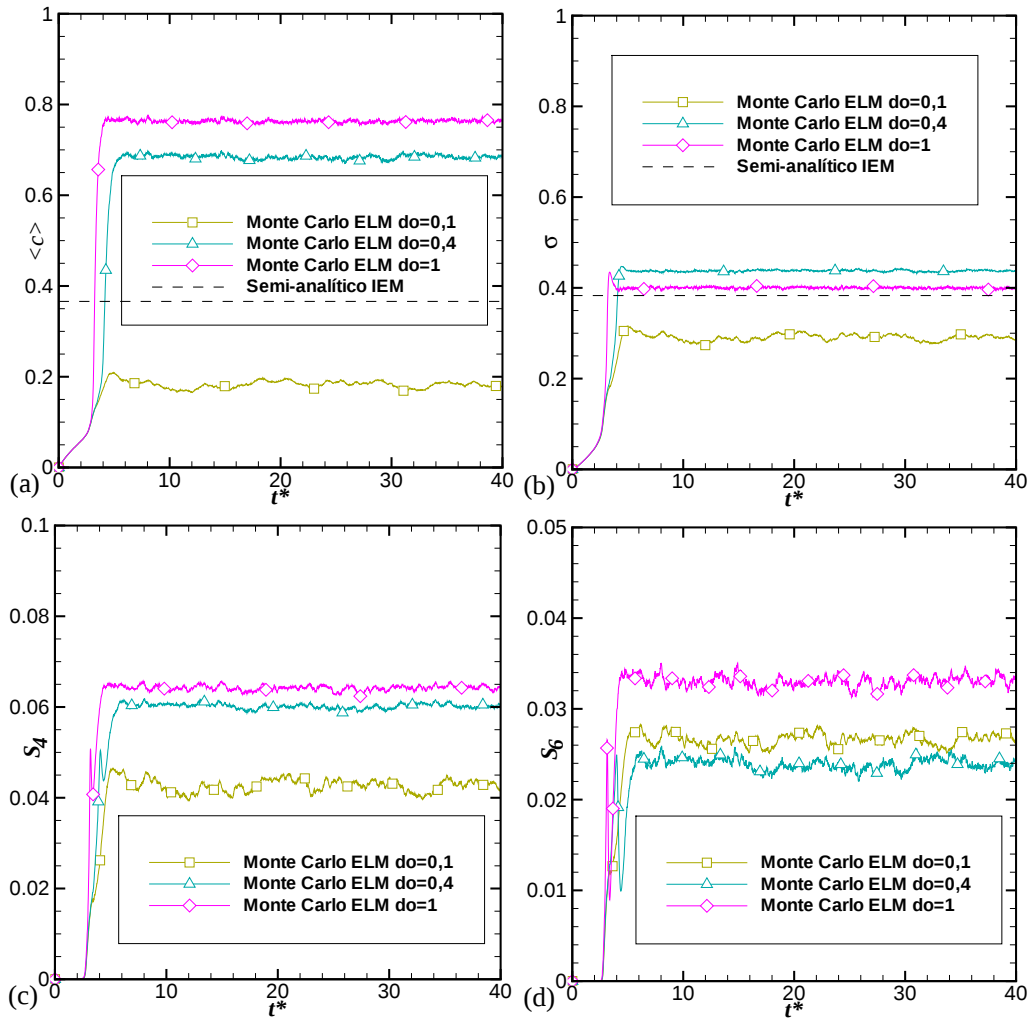


Figura 5.27: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de c para $\mathcal{Z} = 0,5$ e $\mathcal{Y} = 0,042$ para o modelo de mistura de Langevin Estendido (ELM) e para diferentes valores de d_0 . (a) Média $\langle c \rangle$; (b) Desvio padrão σ ; (c) Curtose S_4 ; (d) Hiper-curtose S_6 . Regime de combustão moderada.*

pode ser entendido considerando-se a evolução da uma partícula Lagrangeana, dada pela Eq. (4-49). Um aumento de d_0 reforça a importância de ambos os termos desta equação, resultando em uma evolução mais rápida de c na vizinhança de $c = 0$. Note-se também que o aumento da variação de c é, neste caso estacionário, equivalente ao aumento do módulo de $dP(c)/dc$, o que é efetivamente observado na figura 5.23.

Cabe ressaltar que este comportamento, é consistente com o aumento da taxa de dissipação do escalar [Eq. (4-43)], o que corresponde ao resultado clássico da combustão turbulenta pré-misturada (Borghi e Champion, 2000).

A figura 5.27 mostra o histórico da média, do desvio padrão, da Curtose e da Hiper-curtose de c obtido com o modelo de Langevin estendido (ELM) para valores de $d_0 = 0,1; 0,4$ e 1 . Uma comparação da figura 5.27(a) com a

figura 5.25(a) evidencia uma forte influência da escolha de d_0 sobre o valor médio de c , isto é, a média obtida pelo modelo ELM para $d_0 = 0,1$ é quase a mesma daquela obtida pelo modelo EIEM, e 50% menor do que calculada com o modelo IEM. Porém, para $d_0 = 0,4$ e $1,0$, a média de c é 90% e 110% maior do que a média obtida com modelo IEM. Este comportamento não monótono do valor médio de c , traduz extrema sensibilidade do modelo ELM respeito à escolha de d_0 .

De forma similar ao comportamento do desvio padrão e da Hipercurtose no caso dos modelos de Langevin (LM), existe um comportamento não monótono com o valor de d_0 . Com respeito à Curtose, a variação de d_0 no modelo ELM leva a uma acréscimo de cerca de 50% quando d_0 passa de 0,1 para 1.

Assim, contrariamente ao caso de combustão intensa e mistura rápida, a escolha do modelo de mistura exerce uma influência determinante nos resultados obtidos no caso de mistura lenta e combustão moderada. Esta influência se materializa por modificações importantes na forma da PDF, as quais, por sua vez, levam a mudanças significativas no primeiro e segundo momento. Estas mudanças serão investigadas de forma sistemática a seguir.

5.2.4

Estudo Sistemático da Influência dos Modelos de Mistura na Média e Desvio Padrão em um PaSR

Esta seção apresenta os resultados de um estudo sistemático da influência dos tempos de mistura $\mathcal{X}$ ou $\mathcal{Z}$ e químico $\mathcal{Y}$, no processo de combustão do PaSR e, em particular, nos valores de $\langle c \rangle$ e σ . Este estudo considera dois valores de $\mathcal{X}$ (ou $\mathcal{Z}$), 0,5 e 2, correspondentes, respectivamente a mistura lenta e rápida, e uma gama de valores de $\mathcal{Y}$, $0,03 \leq \mathcal{Y} \leq 1$ que cobre a faixa que vai da combustão lenta à intensa. O conjunto de resultados obtidos é reportado nas Tabelas 5.1, 5.2, 5.3 e 5.4, as quais trazem os resultados obtidos para diversos modelos de mistura. Estes resultados serão analisados sob a forma de gráficos. Esta análise será apresentada em duas etapas, a primeira mostra os resultados por modelo e a segunda compara os modelos entre si.

A figura 5.31 mostra a comparação de $\langle c \rangle$ e σ para os modelos de mistura IEM e LM com $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, e para os casos de uma mistura rápida ($\mathcal{X} = 2$) e lenta ($\mathcal{X} = 0,5$).

No caso de uma mistura rápida, a figura 5.28(a) mostra que a média de c é igual para os modelos IEM e LM com $d_0 = 0,4$ em toda a faixa de $\mathcal{Y}$ analisados neste trabalho. Quando o modelo LM é utilizado com $d_0 = 1$, maiores valores de $\langle c \rangle$ são obtidos. Um acréscimo, no máximo 8% de $\langle c \rangle$ é

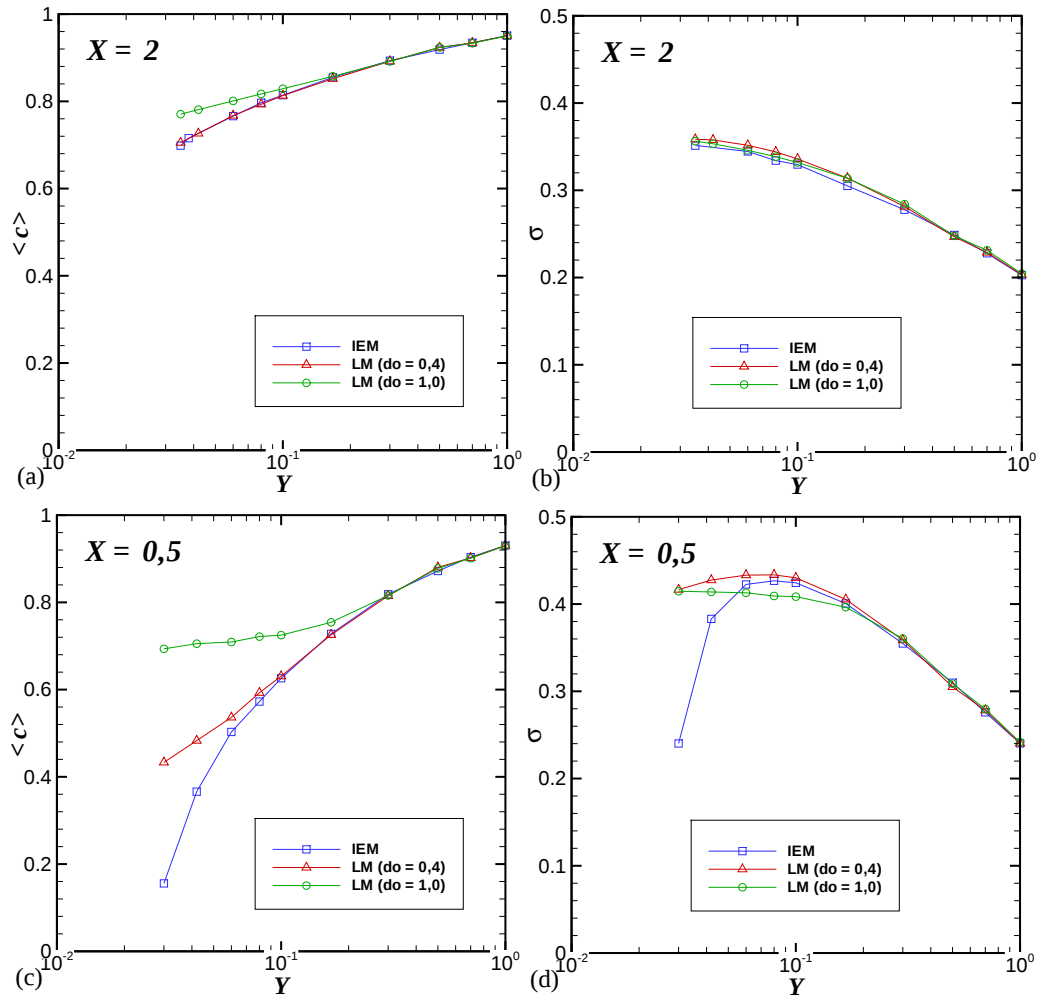


Figura 5.28: Comparação da Média (a) e (c); e Desvio padrão (b) e (d); da variável de progresso da reação c calculados pelos modelos IEM e Langevin com $d_0 = 0,4$ e 1 , como função de $\mathcal{Y}$ e para mistura rápida ($\mathcal{X} = 2$) e lenta ($\mathcal{X} = 0,5$).

observado com o LM para $d_0 = 1$. Esta diferença é mais notável nas regiões de combustão fraca ($\mathcal{Y} < 0,2$), porém, este desvio não supera o 8%.

Além disto, verifica-se na figura 5.28(b) que os desvios padrão de c utilizando os modelos IEM e LM com $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, são idênticos com os regimes de combustão intensa. Pequenas discrepâncias são observadas à medida que o valor de $\mathcal{Y}$ é diminuído, porém a variação obtida é inferior a 2%.

A figura 5.28(c) e (d) mostra os valores de $\langle c \rangle$ e σ utilizando os modelos IEM e Langevin (LM) para $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, no caso de uma mistura lenta ($\mathcal{X} = 0,5$), os valores obtidos de $\langle c \rangle$ com estes modelos de mistura, são praticamente idênticos no regime de combustão intensa ($\mathcal{Y} > 2$). A medida que o processo de mistura torna-se preponderante sobre o processo químico, a escolha do modelo de mistura influi de forma substancial na média e no desvio padrão de c .

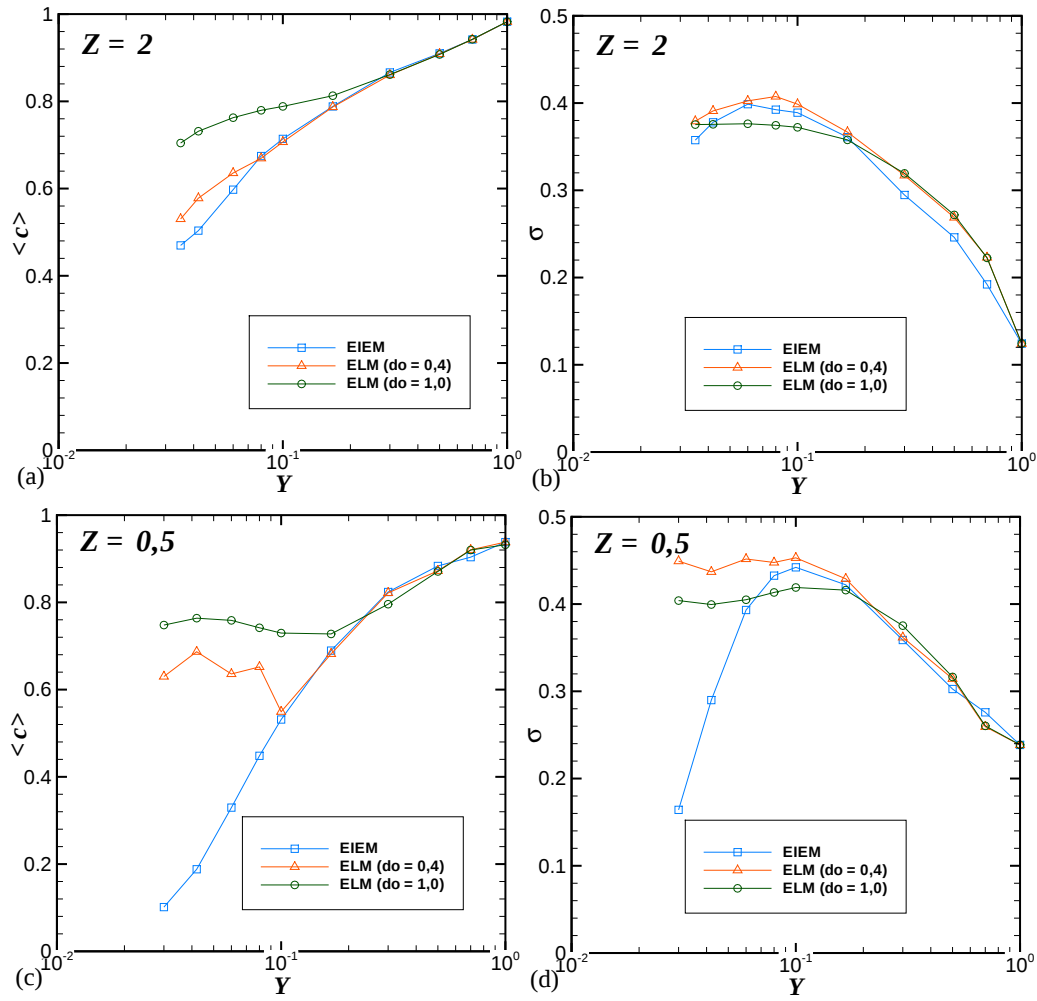


Figura 5.29: Comparação da Média (a) e (c); e Desvio padrão (b) e (d); da variável de progresso da reação c calculados pelos modelos ELEM e ELM com $d_0 = 0,4$ e 1 , como função de $\mathcal{Y}$ e para mistura rápida ($Z = 2$) e lenta ($Z = 0,5$).

Por exemplo, para $\mathcal{Y} = 0.030$ e $\mathcal{X} = 0.5$, que representa o caso de uma combustão fraca com mistura lenta, o valor de $\langle c \rangle$ obtido pelos modelos de mistura IEM, LM com $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, são $0,1556$; $0,4332$ e $0,6935$ respectivamente, o que evidencia uma influência significativa da escolha de d_0 sobre $\langle c \rangle$.

Os desvios padrão obtido pelos modelo IEM e LM com $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, e apresentadas na figura 5.28(d) mostra uma coincidência para regimes de combustão intensa. Porém à medida que $\mathcal{Y}$ é diminuído, discrepâncias são observadas. Verifica-se também que o desvio padrão obtido com o modelo LM tende para um patamar à medida que $\mathcal{Y}$ é diminuído e d_0 aumenta. Esta tendência acompanha aquela da PDF, que se torna progressivamente mais bimodal.

De forma análoga ao mostrado na figura 5.28, a figura 5.29 traz a

comparação de $\langle c \rangle$ e σ para os modelos de mistura EIEM e ELM com $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$ e para os casos de uma mistura rápida ($\mathcal{Z} = 2$) e lenta ($\mathcal{Z} = 0,5$). A comparação entre estas figuras mostra que a média de c calculada pelo modelo EIEM é idêntica à obtida quando $\mathcal{Y} > 0,2$, e sempre menor do que para os casos de combustão lenta, $\mathcal{Y} < 0,2$. Esta tendência corrobora resultados apresentados nas seções anteriores.

Para o caso de uma mistura rápida, pode-se notar na figura 5.29(a), que a média de c é igual para todos os casos analisados e na faixa correspondente à combustão intensa ($\mathcal{Y} > 0,2$). À medida que a $\mathcal{Y}$ decresce, ocorre um aumento de $\langle c \rangle$ quando d_0 é incrementado. Porém, a diferença do observado na figura 5.28(a), as discrepâncias da média de c obtidas para estes modelos atingem até 35% para $\mathcal{Z} = 2$. Por si só este resultado ilustra a influência que exerce a distribuição de frequência turbulenta sobre a operação do PaSR.

Além disto, verifica-se na figura 5.29(b) que os desvios padrão de c obtidos utilizando os modelos EIEM e ELM com $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, são ligeiramente diferentes para $\mathcal{Z} = 2$.

Finalmente, a figura 5.29(c) e (d) apresenta os valores de $\langle c \rangle$ e σ utilizando os modelos EIEM e ELM para $d_0 = 0,4$ e $d_0 = 1$, no caso de mistura lenta, $\mathcal{Z} = 0,5$. Os valores de $\langle c \rangle$ e σ obtidos com estes modelos de mistura são similares para regimes de combustão intensa $\mathcal{Y} > 0,2$ e, à medida que o processo de mistura torna-se preponderante sobre o processo químico, a escolha do modelo de mistura influi drasticamente na média e no desvio padrão de c . Esta influência é maior que no caso analisado na figura 5.29(c).

Em particular, o emprego do modelo ELM com $d_0 = 0,4$ e para $\mathcal{Y} = 0,030$ e $\mathcal{Z} = 0,5$, o valor de $\langle c \rangle$ obtido é 0,63, superior àquele calculado com $\mathcal{Y} = 0,030$ e $\mathcal{Z} = 2$, que fornece um valor de $\langle c \rangle$ igual 0,5305. Esta inversão de tendência está associada às flutuações de $\langle c \rangle$ no interior do PaSR e à natureza bi-modal pronunciada das respectivas PDFs, as quais são mostradas na figura 5.30.

Mistura Rápida $\mathcal{X} = 2$								
IEM			LM ($d_0 = 0, 4$)			LM ($d_0 = 1$)		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ
0,035	0,6985	0,3512	0,035	0,7053	0,3585	0,035	0,7706	0,3563
0,038	0,7155	0,3504	0,042	0,7264	0,3577	0,042	0,7810	0,3533
0,060	0,7661	0,3445	0,060	0,7674	0,3516	0,060	0,8010	0,3458
0,080	0,7968	0,3340	0,080	0,7932	0,3441	0,080	0,8170	0,3385
0,100	0,8141	0,3295	0,100	0,8132	0,3359	0,100	0,8289	0,3319
0,167	0,8550	0,2050	0,167	0,8519	0,3140	0,167	0,8574	0,3137
0,300	0,8933	0,2777	0,300	0,8919	0,2814	0,300	0,8916	0,2841
0,500	0,9185	0,2488	0,500	0,9235	0,2467	0,500	0,9236	0,2477
0,700	0,9343	0,2278	0,700	0,9343	0,2287	0,700	0,9332	0,2312
1,000	0,9505	0,2027	1,000	0,9504	0,2033	1,000	0,9500	0,2045

Tabela 5.1: Média e desvio padrão da PDF de c obtidos utilizando-se os modelos IEM, e de Langevin com $d_0 = 0, 4$ e 1 para diversos regimes de combustão. Caso de uma mistura rápida, $\mathcal{X} = 2$.

Mistura Lenta $\mathcal{X} = 0, 5$								
IEM			LM ($d_0 = 0, 4$)			LM ($d_0 = 1$)		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ
0,030	0,1556	0,2402	0,030	0,4332	0,4166	0,030	0,6935	0,4147
0,042	0,3660	0,3830	0,042	0,4830	0,4275	0,042	0,7053	0,4139
0,060	0,5029	0,4225	0,060	0,5363	0,4332	0,060	0,7092	0,4129
0,080	0,5725	0,4267	0,080	0,5928	0,4335	0,080	0,7215	0,4093
0,100	0,6260	0,4244	0,100	0,6307	0,4301	0,100	0,7248	0,4085
0,167	0,7278	0,4006	0,167	0,7256	0,4054	0,167	0,7542	0,3964
0,300	0,8185	0,3548	0,300	0,8149	0,3588	0,300	0,8159	0,3605
0,500	0,8719	0,3099	0,500	0,8803	0,3051	0,500	0,8779	0,3087
0,500	0,9036	0,2759	0,700	0,9019	0,2783	0,700	0,9012	0,2797
1,000	0,9303	0,2403	1,000	0,9305	0,2403	1,000	0,9297	0,2419

Tabela 5.2: Média e desvio padrão da PDF de c obtidos utilizando-se os modelos IEM, e de Langevin com $d_0 = 0, 4$ e 1 para diversos regimes de combustão. Caso de uma mistura lenta, $\mathcal{X} = 0, 5$.

Mistura Rápida $\mathcal{Z} = 2$								
EIEM			ELM ($d_0 = 0, 4$)			ELM ($d_0 = 1$)		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ
0,035	0,4697	0,3575	0,035	0,5303	0,3792	0,035	0,7044	0,3753
0,042	0,5036	0,3779	0,042	0,5780	0,3910	0,042	0,7314	0,3756
0,060	0,5975	0,3987	0,060	0,6357	0,4025	0,060	0,7626	0,3763
0,080	0,6846	0,3924	0,080	0,6695	0,4075	0,080	0,7795	0,3745
0,100	0,7139	0,3890	0,100	0,7069	0,3987	0,100	0,7884	0,3722
0,167	0,7883	0,3609	0,167	0,7870	0,3667	0,167	0,8130	0,3578
0,300	0,8662	0,2946	0,300	0,8604	0,3171	0,300	0,8613	0,3194
0,500	0,9099	0,2660	0,500	0,9087	0,2688	0,500	0,9075	0,2718
0,700	0,9418	0,2221	0,700	0,9417	0,2230	0,700	0,9423	0,2225
1,000	0,9826	0,1242	1,000	0,9826	0,1242	1,000	0,9826	0,1244

Tabela 5.3: Média e desvio padrão da PDF de c obtidos utilizando-se os modelos IEM estendido (EIEM), e de Langevin estendido (ELM) com $d_0 = 0, 4$ e 1 para diversos regimes de combustão. Caso de uma mistura rápida, $\mathcal{Z} = 2$.

Mistura Lenta $\mathcal{Z} = 0, 5$								
EIEM			ELM ($d_0 = 0, 4$)			ELM ($d_0 = 1$)		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	σ
0,030	0,1014	0,1041	0,030	0,6300	0,4492	0,030	0,7480	0,4040
0,042	0,1881	0,2899	0,042	0,6868	0,4370	0,042	0,7637	0,3995
0,060	0,3294	0,3932	0,060	0,6270	0,4565	0,060	0,7587	0,4050
0,080	0,4482	0,4326	0,080	0,6520	0,4477	0,080	0,7417	0,4133
0,100	0,5314	0,4421	0,100	0,5493	0,4530	0,100	0,7296	0,4190
0,167	0,6894	0,4221	0,167	0,6819	0,4290	0,167	0,7276	0,4160
0,300	0,8237	0,3588	0,300	0,8217	0,3618	0,300	0,7958	0,3753
0,500	0,8835	0,3026	0,500	0,8723	0,3144	0,500	0,8709	0,3165
0,500	0,9209	0,2584	0,700	0,9204	0,2594	0,700	0,9200	0,2604
1,000	0,9381	0,2385	1,000	0,9381	0,2385	1,000	0,9321	0,2386

Tabela 5.4: Média e desvio padrão da PDF de c obtidos utilizando-se os modelos IEM estendido (EIEM), e de Langevin estendido (ELM) com $d_0 = 0, 4$ e 1 para diversos regimes de combustão. Caso de uma mistura lenta, $\mathcal{Z} = 0, 5$.

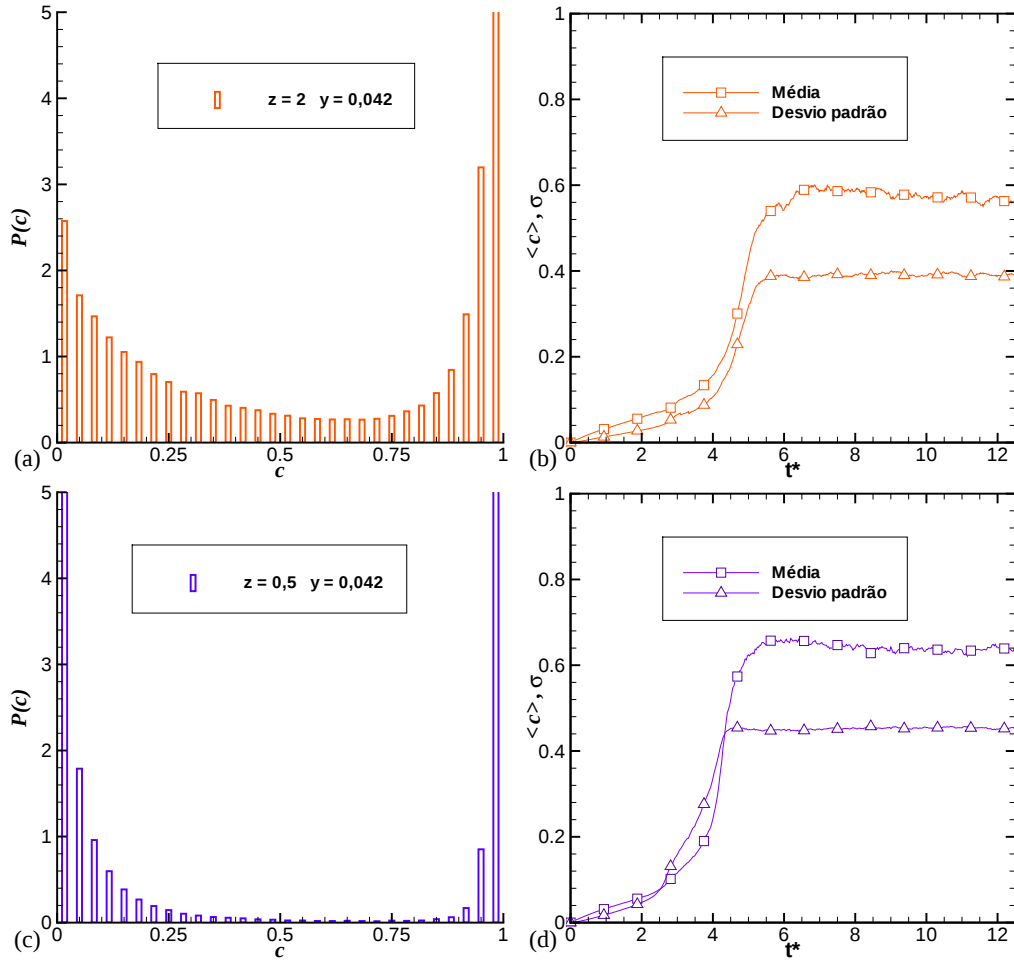


Figura 5.30: *PDFs e momentos estatísticos de c utilizando o modelo ELM para $d_0 = 0,4$ na operação do PaSR em um regime de combustão moderada ($\mathcal{Y} = 0,042$) para o caso de: (a) e (b) mistura rápida ($\mathcal{X} = 2$), (c) e (d) mistura lenta ($\mathcal{X} = 0,5$).*