

6

Conclusões e Recomendações

Neste trabalho diferentes modelos de mistura existentes para a modelagem de escoamentos turbulentos reativos foram estudados. A abordagem utilizada foi a do transporte da função densidade de probabilidade (PDF) conjunta da variável de progresso da reação e da frequência turbulenta que permite determinar a forma da PDF e momentos estatísticos. Inicialmente estes modelos de mistura foram implementados no caso inerte de mistura simples submetida a uma turbulência homogênea. Nesta situação foram estudados três modelos clássicos: os modelos de Curl (CM) e Curl modificado (MCM) e o modelo de interação de troca com a média (IEM), e três desenvolvidos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001): o modelo de Langevin (LM), o modelo IEM estendido (EIEM) e o modelo de Langevin estendido (ELM). Conforme esperado, os resultados obtidos mostram que os modelos clássicos não são capazes de produzir uma forma auto-similar da PDF que corresponde a uma Gaussiana. Dentre os modelos recentes, apenas o LM possui esta capacidade. Um estudo de sensibilidade do resultado obtido com a escolha de forma inicial da PDF foi realizado, mostrando que a adoção de condições iniciais discretas influencia o processo de decaimento inicial da PDF, mas não sua taxa assintótica de decaimento.

Os modelos de mistura recentes por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) incorporam uma descrição do processo difusivo na equação de transporte da PDF. No caso do modelo EIEM isto é feito mediante a descrição do espectro de escalas de tempo turbulento, enquanto que no modelo LM considera-se a influência da taxa de dissipação do escalar. O modelo ELM leva em conta ambos os processos e é, a priori, o mais completo.

Os resultados obtidos com estes modelos de mistura mostram que a evolução da PDF no caso de uma mistura binária apresenta uma boa concordância com os resultados obtidos por Eswaran e Pope (1988) mediante o uso de Simulação Numérica Direta (DNS). Os presentes resultados também apresentam uma excelente concordância com aqueles devidos a Soulard (2005).

A análise da influência dos modelos de mistura em um processo de combustão turbulenta pré-misturada foi realizada mediante a utilização de um

reator parcialmente misturado (PaSR). Para este fim, desenvolveu-se neste trabalho, uma formulação da equação de transporte da PDF que descreve o funcionamento do PaSR usando modelos propostos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001).

Inicialmente, o PaSR foi modelado utilizando-se o modelo IEM clássico. Os resultados obtidos mostram uma excelente concordância com a solução semi-analítica de Sabel'nikov e Figueira da Silva (2002). Em seguida o funcionamento do PaSR foi investigado para os três modelos de mistura recentes, em dois casos típicos: o de combustão intensa e mistura rápida e o de combustão moderada e mistura lenta. No primeiro destes casos, a forma da PDF em estado permanente praticamente não é modificada com o emprego dos diferentes modelos de mistura, pois é o processo de combustão que controla o funcionamento do PaSR. Desta forma, os momentos estatísticos da variável de progresso da reação, c , permanecem inalterados com a escolha do modelo de mistura.

Quando da operação do PaSR em um regime de combustão fraca e mistura lenta, os modelos de mistura estudados apresentam comportamentos discrepantes, tanto no que tange à forma da PDF quanto aos seus correspondentes momentos estatísticos. Estas discrepâncias crescem a medida que as velocidades características da mistura e da reação química são diminuídas, atingindo, em relação ao valor médio do escalar calculado pelo modelo IEM, valores de 6%, 35% e 55%, no caso dos modelos EIEM, LM e ELM respectivamente.

Além disto, mostrou-se, que contrariamente ao caso da mistura inerte, os resultados obtidos com os modelos de Langevin apresentam uma dependência no valor do parâmetro de ponderação dos processos de dissipação e difusão do escalar. Em particular, um aumento no valor deste parâmetro leva ao aumento de $\langle c \rangle$.

No regime de combustão fraca e mistura lenta, as oscilações de $\langle c \rangle$ e σ no interior do PaSR utilizando o modelo ELM com $d_0 = 0,4$ foram observadas. Estas oscilações parecem estar relacionadas à forte bi-modalidade que apresenta a forma da PDF nesta situação. Para corroborar esta suposição, deve ser feita uma análise de sensibilidade do resultado obtido com o número de partículas estocásticas utilizadas para a solução da equação de transporte da PDF.

Além disso, recomenda-se validar os modelos utilizados neste trabalho mediante técnicas experimentais e/ou mediante a Simulação Numérica Direta. Assim seria possível escolher o modelo de mistura e/ou o valor de d_0 que melhor reproduzam o funcionamento de um PaSR.

Também, sugere-se a utilização dos modelos e mistura formulados por

Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) em outros problemas práticos da engenharia que envolvam a combustão em escoamentos turbulentos, tais como a combustão em jatos difusivos, por exemplo.

Cabe resaltar que este é o primeiro estudo conhecido do emprego destes modelos de mistura recentes em presença de combustão. Para este fim, foi necessário implementar no âmbito de uma técnica de resolução Monte-Carlo um método numérico de resolução de equações diferenciais estocásticas capaz de garantir o suporte compacto do escalar reativo e adequado para resolução de problemas numericamente “rígidos”. Esta também é a primeira utilização deste novo método numérico no estudo de problemas reativos. Espera-se que o presente trabalho abra as portas para a utilização do método de Milstein-Taylor Implícito (Tian e Burrage, 2001) em outras simulações estocásticas de processos de combustão.