

4 Resultados e Discussões

Neste capítulo são discutidos os principais resultados obtidos na simulação do ISAT com a nova formulação e com a formulação original. Primeiramente, faz-se uma análise da influência da semente dos processos estatísticos. São estudadas as respostas do programa para diferentes sementes de processos estatísticos, utilizadas pelo algoritmo original. Em seguida, são discutidos os resultados obtidos das simulações empregando o mecanismo de combustão do monóxido de carbono (CO/O₂) (Gardiner, 2000).

Foi feito um estudo paramétrico do ISAT modificado e os resultados dessa análise são apresentados em duas subseções: a primeira com resultados de simulações que não tiveram a árvore binária saturada; e a segunda, com a árvore binária saturada. Os parâmetros de entrada do algoritmo que são variados são:

- Número de partículas estocásticas no reator, n_p ;
- Tempo de tabulação inicial, t_T ;
- Tempo total de simulação, τ^* ;
- Tempo de residência, τ_r .

Analisou-se a influência do tempo para tabulação inicial, t_T , sobre os vários parâmetros de desempenho da técnica ISAT. Os valores escolhidos para t_T encontram-se na faixa de 0 a $16 \tau_r$.

Para o mecanismo de cinética química escolhido, são determinados a acurácia, o tempo de simulação, a memória demandada e a homogeneidade da estrutura de árvore binária. Note-se que o desempenho do ISAT é analisado através dos seguintes parâmetros de saída:

- Número total de consultas resultando em:
 - i. recuperação;
 - ii. crescimento da árvore binária;
 - iii. adição na árvore binária;
 - iv. integração direta;
- Tempo de CPU;

- Gasto de memória do computador;
- Erro global;
- Erro médio;
- Altura da árvore binária;

Os ganhos referentes à nova estratégia de tabulação [Eq.(3.16)], aqui proposta, serão avaliados para os parâmetros de desempenho acima. Por fim, a análise é estendida para alguns casos do sistema termoquímico CH_4/ar , o qual é representativo de situações de interesse prático.

4.1. Influência da Semente dos Processos Estatísticos

A influência da semente estatística sobre os resultados obtidos é analisada com a configuração original do algoritmo. Este, em sua versão original, escolhia aleatoriamente a semente a ser usada, ou seja, seu valor não é o mesmo para todos os casos estudados nesta seção. Ressalta-se que o estudo da semente é importante apenas na situação em que se deseja realizar comparações com o algoritmo e analisar o erro nas diferentes situações, como as que serão feitas nas seções seguintes.

Cabe salientar que o resultado da utilização de um modelo de combustão não deveria depender de um parâmetro de simulação, tal qual uma semente de um processo de mistura estocástico. Assim, não deveria haver diferença entre os resultados obtidos quando o valor dessa semente é variado, visto que as condições iniciais e de contorno usadas na combustão são as mesmas. Contudo, como será mostrado nas subseções seguintes, esta diferença existe nos resultados, o que é uma característica intrínseca do modelo de mistura adotado e do número de partículas usado nas simulações. Por este motivo, salvo quando indicado, os ensaios realizados para o estudo das modificações no algoritmo ISAT, apresentados a partir da seção 4.2.1, utilizam sempre a mesma semente estatística.

No presente estudo, uma “condição simulada” consiste no conjunto de valores escolhidos para os dados de entrada do ISAT, usado para a simulação da combustão do monóxido de carbono com oxigênio. A mesma condição simulada, mostrada na Tabela 4-1, foi realizada diferentes vezes para determinar as diferenças entre os resultados devido à escolha aleatória da semente dos processos

estatísticos. Este caso foi escolhido devido a sua simplicidade e ao curto tempo necessário para a simulação de cada ensaio, no entanto, o caso é suficiente para mostrar a influência da semente dos processos estatísticos.

Tabela 4-1. Condições iniciais de simulação da combustão do CO/O₂ usando o algoritmo original ISAT.

Riqueza	0,7
Nº máximo de entradas - n_e	50×10^3
Tolerância de erro ISAT - ε_{tol}	$1,0 \times 10^{-3}$
Nº de partículas - n_p	256
Temperatura de entrada (K) - T_{in}	300
Pressão (atm) - p	1
Tempo de mistura (μ s) - τ_m	100
Tempo de emparelhamento (μ s) - τ_p	100

O caso em estudo consiste de um número pequeno de partículas quando comparado àquele que será empregado nas seções subsequentes. Entretanto, trata-se de um valor alto em relação aos valores típicos de número de partículas por volume de controle elementar empregado em simulações numéricas bi e tridimensionais de escoamentos reativos (Andrade, Figueira da Silva e Mura, 2011).

A mistura CO/O₂ é pobre e o valor da riqueza não varia, assim como a tolerância do ISAT, que possui o mesmo valor em todas as simulações feitas para a análise da influência da semente. Com relação às escalas de tempo usadas no reator, têm-se dois tipos de reatores simulados. No primeiro, o tempo de residência é o dobro do tempo de mistura, o qual é igual ao tempo de emparelhamento, ou seja, esses três tempos característicos do reator são da mesma ordem de grandeza, o que é típico de um reator parcialmente misturado (PaSR); note-se que nas condições simuladas o reator se encontra próximo da extinção. No segundo tipo de reator, o tempo de residência é dez vezes maior que o tempo de

mistura, assim o reator de aproxima da situação quase perfeitamente agitado (PSR), longe da zona de extinção da chama.

Os resultados obtidos para as condições apresentadas na Tabela 4-1 correspondem a 3 diferentes ensaios e são mostrados nas duas subseções que se seguem. A primeira subseção traz uma análise da influência da semente no erro referente ao cálculo da temperatura e a segunda analisa essa influência sobre as saídas características do algoritmo. Note-se que o teste realizado para o estudo da influência da semente foi feito somente com o algoritmo original.

4.1.1. Análise do Erro

A influência na escolha da semente estatística é analisada, primeiramente, com relação ao erro no cálculo da temperatura durante o processo de combustão em 3 diferentes ocasiões, ou seja, 3 ensaios, nos quais a semente dos processos estocásticos foi escolhida aleatoriamente pelo código e seus valores são diferentes para cada simulação.

Espera-se que a escolha aleatória da semente dos processos estatísticos tenha uma influência negativa no erro, visto que o mesmo é calculado pela diferença entre o valor aproximado dado ISAT e o valor fornecido por integração direta.

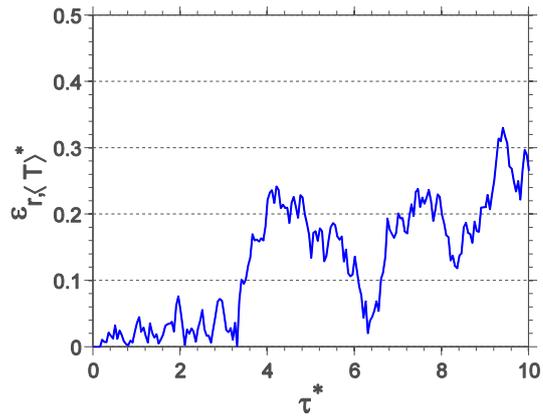
Duas situações no reator são investigadas: PaSR e quase-PSR.

4.1.1.1. Situação PaSR

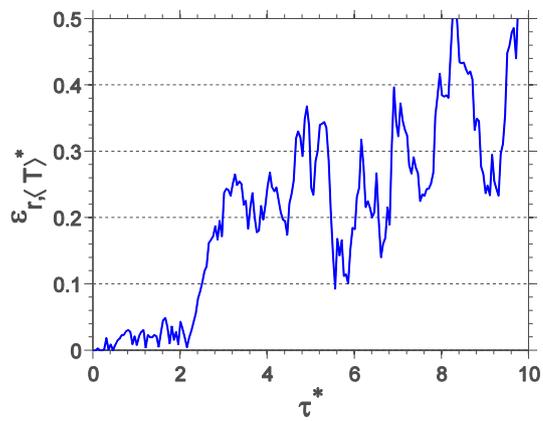
Nos casos apresentados nesta subseção, em que o tempo de residência do reator (τ_r) é de $200\mu\text{s}$, assim $\tau_m/\tau_r=1/2$, espera-se que a semente dos processos estatísticos influencie os resultados da simulação, visto que o reator se encontra perto da condição de extinção. A Figura 4-1 apresenta o erro, Eq.(3.14), calculado para a evolução da temperatura dentro do reator em três ensaios. Como pode ser observado dos gráficos apresentados, a diferença nas três simulações é considerável. A escolha aleatória da semente, feita pelo programa, influencia diretamente na resposta do algoritmo e pode levar a erros de até 50%, como mostrado no Ensaio 2 da Figura 4-1.

Da Eq.(3.14), o erro local de uma propriedade é calculado comparando-se o valor fornecido pelo algoritmo ISAT com o valor fornecido pela a integração direta (DI) das equações para cada partícula do reator. O valor de uma semente de processos estatísticos determina os pares de partículas que serão formados dentro do reator (PMSR) para a troca de propriedades termodinâmicas, segundo o modelo de reator usado [Eq.(3.2)].

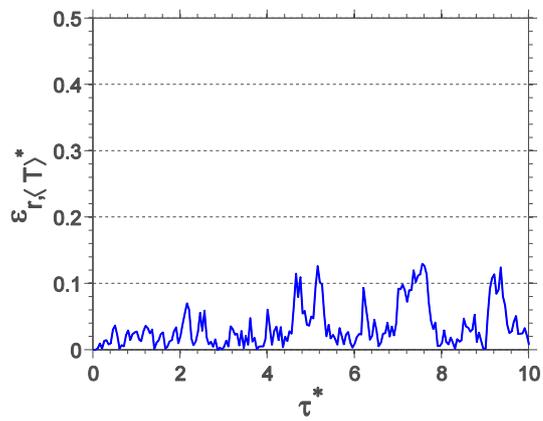
Quando a escolha da semente é aleatória, é provável que o valor de semente escolhido para o ISAT seja diferente do valor escolhido para o DI. Isto implica que o caminho percorrido pelas partículas no espaço amostral do reator seja diferente, conseqüentemente, a comparação é feita entre dois sistemas cuja evolução termoquímica é diferente, o que pode levar a grandes erros, que não são intrínsecos ao algoritmo ISAT. Essa situação é tão mais crítica quanto maior é a razão τ_m/τ_r , isto é, quando o reator está situado longe da condição de equilíbrio termodinâmico. Assim, parece ser indispensável garantir que simulações envolvendo ISAT e DI correspondam ao mesmo histórico de emparelhamento de partículas, o que só pode ser obtido quando sementes idênticas são empregadas.



a) Ensaio 1.



b) Ensaio 2.

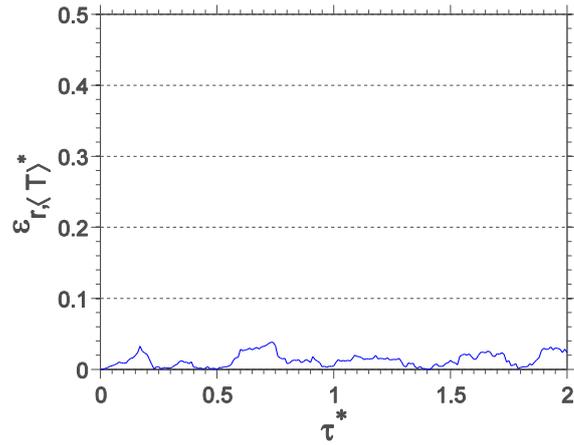


c) Ensaio 3.

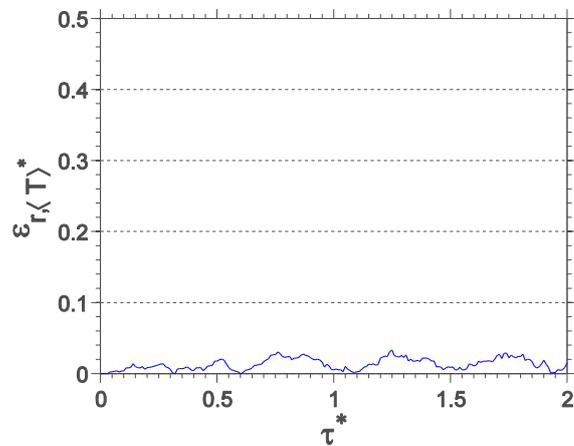
Figura 4-1. Erro do cálculo da evolução da temperatura para as condições da Tabela 4-1, usadas em 3 diferentes ensaios, com o algoritmo original. Situação PaSR, $\tau_m/\tau_r=1/2$.

4.1.1.2. Situação Quase-PSR

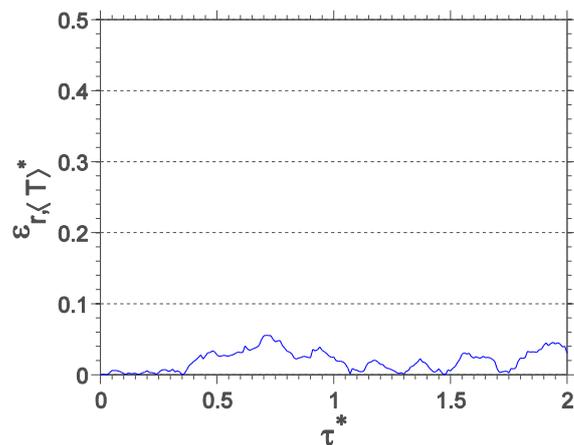
Nos casos apresentados nesta subseção, em que o tempo de residência do reator (τ_r) é de 1ms, assim $\tau_m/\tau_r=1/10$, o reator se encontra afastado da zona de extinção da chama. Assim, espera-se que a semente dos processos estatísticos não tenha grande influência nos resultados da simulação e os erros calculados sejam menores do que no tipo de reator mostrado na seção precedente. A Figura 4-2 apresenta o erro, Eq.(3.14), calculado para a evolução da temperatura dentro de reator em 3 ensaios. Observa-se, dos gráficos, que a semente dos processos estatísticos influencia nos resultados do erro calculado para a temperatura, no entanto, esta influência é menos importante do que aquela mostrada para a situação de PaSR, pois a diferença nos valores apresentados para as três simulações é desprezível.



a) Ensaio 4.



b) Ensaio 5.



c) Ensaio 6.

Figura 4-2. Erro do cálculo da evolução da temperatura para as condições da Tabela 4-1 usadas em 3 diferentes ensaios, com o algoritmo original. Situação quase-PSR, $\tau_m/\tau_r=1/10$.

4.1.2. Análise das Saídas Características do Algoritmo ISAT

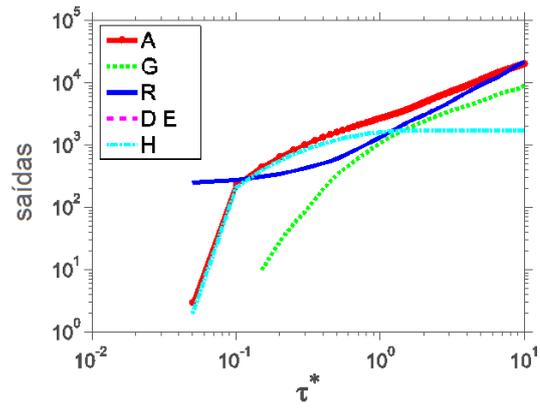
Nesta subseção, a influência na escolha da semente estatística é analisada em termos do número de adições, crescimentos, recuperações avaliações diretas e altura da árvore binária de busca, para as mesmas ocasiões apresentadas na subseção 4.1.1.

4.1.2.1. Situação PaSR

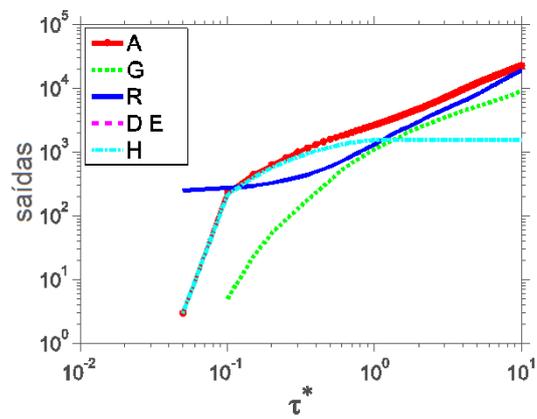
A Figura 4-3 apresenta gráficos com as saídas características do ISAT e com a altura da árvore binária de busca. Lembrando que $\tau_m/\tau_r=1/2$, observa-se, desta figura, que as saídas características do algoritmo não são modificadas quando a simulação acontece com sementes diferentes. Embora os valores exatos de cada saída sejam diferentes, como mostra a Tabela 4-2, essa diferença é pequena e não sofre grande influência da escolha da semente.

Tabela 4-2. Saídas características do ISAT para as mesmas condições iniciais.

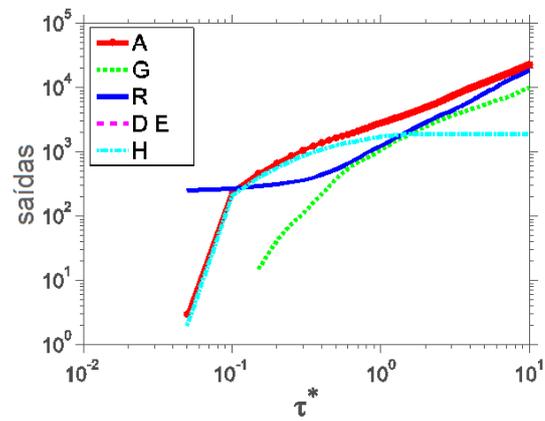
	Ensaio 1	Ensaio 2	Ensaio 3
Nº adições	23758	22789	22754
Nº crescimentos	9360	9095	9954
Nº recuperações	18081	19320	18491
Nº avaliações diretas	0	0	0
Nº folhas	23759	22785	22755
Altura da árvore binária	1824	1578	1891
Tempo de CPU (s)	113	111	107



a) Ensaio 1.



b) Ensaio 2.



c) Ensaio 3.

Figura 4-3. Saídas característica do ISAT para as condições iniciais da Tabela 4-1 calculadas em 3 ensaios, usando o algoritmo original. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore. Situação PaSR, $\tau_m/\tau_l=1/2$.

Quando se toma como referência a média dos valores no caso analisado, a diferenças em termos de número de adições é de no máximo 2,9%; já o número de crescimentos varia em 5,1%, e o número de recuperações difere em 3,7%. Essas diferenças nos valores das saídas características do ISAT interferem diretamente no tempo de CPU gasto durante a simulação; para o presente caso analisado, o tempo de CPU pode ser até cerca de 6% maior que o menor valor.

Atenção especial deve ser dada à diferença relativa percentual no número de folhas na árvore binária, que chega a 2,9%, pois a memória utilizada pelo algoritmo também cresce quando o número de folhas aumenta. O tamanho da árvore também varia bastante podendo ser até 11% maior, e isso tornam a árvore “menos balanceada”.

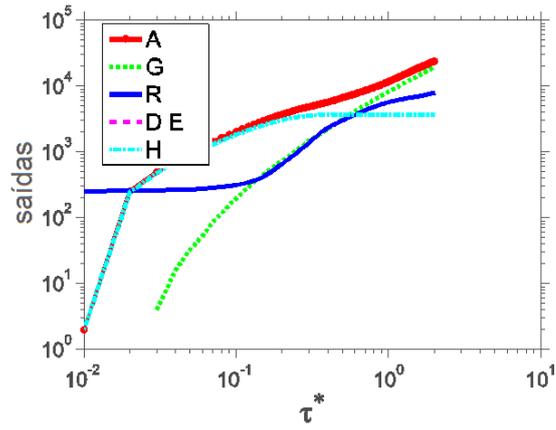
4.1.2.2. Situação Quase-PSR

Uma análise semelhante é feita para os valores de saídas características do ISAT da simulação do algoritmo num sistema quase-PSR. Lembrando que $\tau_m/\tau_r=1/10$, observa-se, da Figura 4-4, na qual estão representadas as saídas características do ISAT, que não há grande influência da semente dos processos estatísticos nesses parâmetros.

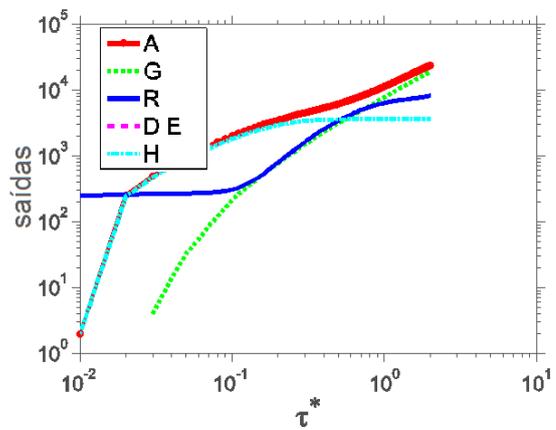
Baseado nos valores obtidos dos 3 ensaios, apresentados na

Tabela 4-3, faz-se a média aritmética e encontra-se a diferença relativa percentual de cada valor da tabela. Desse modo, a diferença no número de adições na árvore binária é de no máximo 4,1%, o número de crescimentos varia menos de 2%, e o número de recuperações pode ser mais de 8,5% maior. Como tempo de CPU depende diretamente desses valores, o tempo de CPU pode diferir em até 7% em relação ao menor valor dos 3 ensaios.

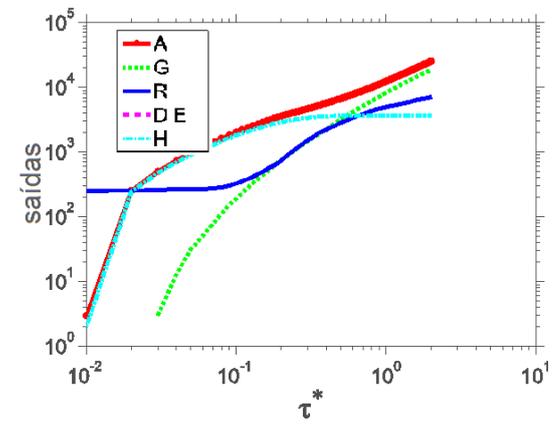
A diferença percentual, em relação ao valor médio obtido dos 3 ensaios, no número de folhas na árvore binária é de 4,1%, isso acarreta em maior uso da memória pelo algoritmo. O tamanho da árvore alcança uma diferença percentual de menos de 1%.



a) Ensaio 4.



b) Ensaio 5.



c) Ensaio 6.

Figura 4-4. Saídas característica do ISAT para as condições iniciais da Tabela 4-1 calculadas em 3 ensaios quase-PSR, usando o algoritmo original. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore. Situação quase-PSR, $\tau_m/\tau_f=1/10$.

Tabela 4-3. Saídas características do ISAT para as mesmas condições iniciais.

	Ensaio 4	Ensaio 5	Ensaio 6
Nº adições	23929	23894	25428
Nº crescimentos	19417	19058	18707
Nº recuperações	7853	8247	7064
Nº avaliações diretas	0	0	0
Nº folhas	23930	23895	25429
Altura da árvore binária	3711	3659	3697
Tempo de CPU (s)	113	112	120

Com base na análise da influência da semente nos resultados do ISAT, as demais comparações apresentadas neste manuscrito utilizarão sempre o mesmo valor de semente estatística.

4.2. Estudo da Nova Estratégia de Tabulação – Algoritmo Modificado – CO/O₂

Os resultados apresentados nas seções precedentes mostraram que em situações onde o reator está perto da extinção, o valor da semente estatística pode influenciar drasticamente os resultados obtidos, tendo influência direta na análise do erro, quando comparações são feitas. A escolha de uma única semente para todos os cálculos pode introduzir viés estatístico, mas evita esse comportamento anômalo associado ao modelo de mistura escolhido, que é observado no cálculo do erro.

Assim, todos os casos seguintes foram simulados utilizando a mesma semente para todos os processos estatísticos, ou seja, entrada, saída, e mistura no reator.

A fim de permitir comparações envolvendo simulações nas quais o tempo total de cálculo é muito maior do que o tempo de residência, uma mistura CO/O₂, que possui um dos mais simples mecanismos de cinética química disponíveis, foi

modelada utilizando o mecanismo de Gardiner (Gardiner, 2000) com 4 espécies e 3 de reações. Mesmo que este mecanismo químico seja simples, tendo como base a discussão desenvolvida na seção 3.3.4, acredita-se que permite caracterizar as modificações propostas.

A Tabela 4-4 apresenta as condições iniciais para a simulação, estes parâmetros, os mesmos usados no trabalho de Cunha (2010) de forma a permitir comparações entre os trabalhos, são usados em todos os casos simulados na combustão de CO/O₂. Note-se que a temperatura inicial do sistema é aquela do equilíbrio químico, muito embora a composição seja de gases frescos. Este artifício visa propiciar uma rápida ignição do reator. Todos os casos estudados (Tabela 4-5 e Tabela 4-7) e seus resultados (Tabela 4-6 e Tabela 4-8) serão agora apresentados e discutidos nas seções subsequentes.

Tabela 4-4. Condições iniciais usadas nos casos simulados para a combustão da mistura CO/O₂.

Tolerância de erro ISAT- ε_{tol}	1,00 x10 ⁻³
Riqueza	0,7
Temperatura dos gases de entrada (K)	300
Pressão dos gases de entrada (atm)	1
Temperatura inicial do sistema (K)	2948,5
Pressão inicial do sistema (atm)	1
Tempo de mistura (μ s) - τ_m	100
Tempo de emparelhamento (μ s) - τ_p	100

Tabela 4-5. Condições para o estudo paramétrico do CO/O₂ - árvore não saturada.

	CASO						
	1	1a	1b	1c	2	3	4
Nº partículas - n_p	100	100	100	100	256	1024	256
Tempo de residência - τ_r (μ s)	200	200	200	200	200	200	1000
Tempo tab. inicial - t_T	$2\tau_r$	$4\tau_r$	$6\tau_r$	$8\tau_r$	$2\tau_r$	$2\tau_r$	$2\tau_r$
Tempo total simul. - τ^*	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$

Tabela 4-6. Ganho calculado para cada caso avaliado com o algoritmo modificado em relação ao algoritmo original - árvore não saturada.

GANHO %	CASO						
	1	1a	1b	1c	2	3	4
Memória	22,8	40,4	59,3	76,3	20,6	17,8	15,0
Tempo de CPU	18,3	33,3	47,9	60,9	19,0	28,3	25,7
Erro global	40,6	46,7	62,3	85,8	83,2	65,3	23,9
Erro médio	41,4	40,8	55,4	72,8	65,6	26,5	4,3
Altura da árvore	95,8	96,13	96,13	97,0	97,8	99,1	72,7

Tabela 4-7. Condições para o estudo paramétrico do CO/O₂ - árvore saturada.

	CASO										
	5	5a	5b	6	7	8	8a	8b	8c	8d	9
Nº máx. entradas (10^3)	50	50	50	100	500	50	50	50	50	50	50
Nº partículas - n_p	1024	1024	1024	1024	1024	1024	1024	1024	1024	1024	4096
Tempo de resid. (μ s) - τ_r	200	200	200	200	1000	200	200	200	200	200	200
Tempo tab. inicial - t_T	$2\tau_r$	$4\tau_r$	$6\tau_r$	$2\tau_r$	$2\tau_r$	$2\tau_r$	$4\tau_r$	$8\tau_r$	$12\tau_r$	$16\tau_r$	$2\tau_r$
Tempo total simul. - τ^*	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$12\tau_r$	$120\tau_r$	$120\tau_r$	$120\tau_r$	$120\tau_r$	$120\tau_r$	$120\tau_r$

Tabela 4-8. Ganho calculado para cada caso avaliado com o algoritmo modificado em relação ao algoritmo original - árvore saturada.

GANHO %	CASO										
	5	5a	5b	6	7	8	8a	8b	8c	8d	9
Tempo CPU	-2,9	-0,3	-2,2	27,2	0,4	4,1	3,7	-1,0	-7,5	-34,0	0,9
Erro global	80,3	98,9	96,5	65,2	51,5	5,6	6,6	6,4	10,9	41,0	47,8
Erro médio	70,6	97,2	96,7	24,0	35,3	5,2	6,1	3,0	10,1	37,7	38,5
Altura da árvore	99,6	99,5	99,3	99,1	99,0	99,6	99,5	99,8	78,2	-12,0	99,9

4.2.1. Árvore Não Saturada

Nos casos apresentados nesta seção, a árvore binária não está saturada pelas adições, ou seja, o número máximo de entradas permitidas não foi atingido. Por esta razão, é possível analisar, também, os ganhos em termos de memória utilizada pelo algoritmo. Dada a discussão apresentada na seção 3.3.4, podem ser esperados ganhos expressivos no tempo de CPU

O estudo paramétrico realizado para esta primeira análise considerou quatro casos diferentes; os parâmetros são mostradas na Tabela 4-5 que apresenta o número de partículas dentro do reator, o número de tempos de residência para iniciar a tabulação e o número total de tempos de residência simulado. Para todos os 4 casos, o tempo de tabulação inicial é o mesmo.

Os ganhos para os casos avaliados são apresentados Tabela 4-6 e discutidos nas subseções seguintes.

4.2.1.1. Situação PaSR

Nos casos 1, 2 e 3, o tempo de residência, τ_r , é o dobro do tempo de mistura, τ_m , que é igual ao tempo de emparelhamento, τ_p . Nessa configuração, onde as escalas de tempo de emparelhamento e mistura são da mesma ordem do tempo de residência, espera-se que a temperatura seja relativamente mais baixa quando comparada com a temperatura de combustão adiabática, o que caracteriza uma combustão não completa, na média. Esta situação corresponde a um reator parcialmente agitado (PaSR). Note-se que nos casos 1, 2 e 3, o número de partículas estocásticas dentro do reator é progressivamente aumentado.

A análise apresentada nas próximas figuras está relacionada com os passos do ISAT, conforme ilustrado na Figura 4-5 e na Figura 4-6, que apresentam os resultados do caso 1 com as saídas características do algoritmo, as quais são o número de adições, crescimentos, recuperações e avaliações diretas e também a altura da árvore. A Figura 4-5 refere-se à estratégia original e a Figura 4-6 refere-se à nova estratégia, com as modificações do algoritmo.

Comparações entre estas figuras permitem verificar, por exemplo, a diferença drástica no tamanho das árvores. Com efeito, a nova estratégia apresenta uma árvore com distribuição mais uniforme, já que sua altura é 23 vezes menor do que a árvore de estratégia anterior.

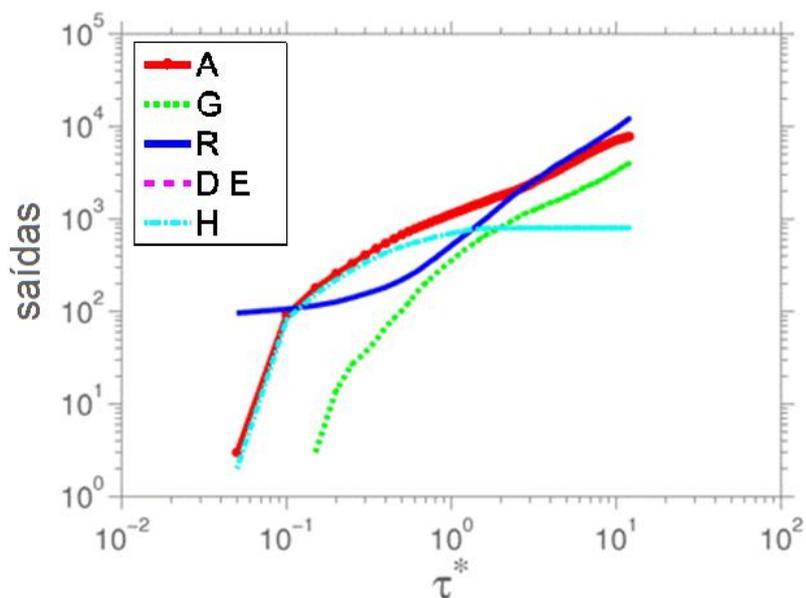


Figura 4-5. Saídas características para a formulação original - caso 1. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.

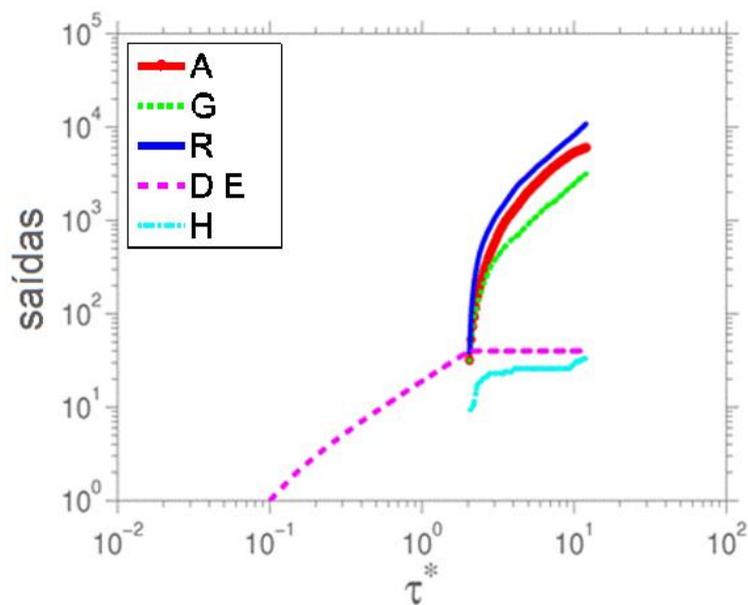


Figura 4-6. Saídas características para a nova estratégia - caso 1. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.

Outra vantagem das melhorias, que é revelada nessas figuras é o fato de que, com a nova estratégia, praticamente desde o início da tabulação, há mais recuperações na tabela ISAT do que adições, o que constitui o propósito desta técnica de tabulação. Como os valores empíricos apresentados na Tabela 3-1 mostram, os cálculos necessários para adicionar uma nova folha em uma árvore binária são três ordens de grandeza mais demorados do que para fazer uma recuperação, pode-se concluir que a nova estratégia é mais eficiente que a anterior, no que diz respeito ao tempo de processamento. Embora nenhuma avaliação direta tenha sido realizada com a formulação original, sua simulação leva mais tempo para ser realizada, porque mais adições do que recuperações foram feitas.

As tendências indicadas na Figura 4-6 são sistematicamente observados nos casos estudados e são apresentados na Tabela 4-6, onde os parâmetros de desempenho são dados em termos de ganho relativo, [Eq.(3.16)]. Uma primeira análise desta tabela permite verificar que a estratégia simples, aqui proposta, leva a um ganho substancial em todos os parâmetros característicos do algoritmo ISAT. Em particular, observa-se que, conforme o número de partículas é aumentado (casos 1, 2 e 3), tanto o tempo de CPU quanto a altura das árvores aumentam seus ganhos, atingindo 28% e 99%, respectivamente, para o caso 3. Isso indica que a altura da árvore binária resultante é consideravelmente menor, sugerindo uma maior homogeneidade e menos tempo de busca na árvore, ou seja, menor tempo de recuperação, o que leva a uma maior eficiência da técnica. Todas as simulações mostram que o tamanho da árvore tende rapidamente para um estado estacionário.

Os ganhos de tempo de CPU observados são consistentes, no regime estacionário, com um número de recuperações (por unidade de tempo) que não ultrapassa em 9 vezes o número de adições. Nos casos 1, 2 e 3, o ganho referente ao tempo de simulação é positivo, isso mostra que, de acordo com a análise apresentada na seção 3.3.4, estes casos estão longe da zona em que há somente recuperações e por isso o uso da nova estratégia de tabulação leva a ganhos consideravelmente altos no que diz respeito ao tempo de processamento programa.

Note-se que, comparando-se os casos 1, 2 e 3, a economia de tempo de CPU também é significativa e aumenta quando o número de partículas também

aumenta, o que é de especial interesse para simulações de grandes escalas. Esse comportamento de estado estacionário é característico de uma árvore de busca que tabula adequadamente o espaço de composição acessado.

Os erros médio e global exibem tendências semelhantes de ganhos em relação à influência do número de partículas. Os ganhos obtidos devem-se às composições que são calculadas durante o regime transitório e que não são todas tabuladas. Os ganhos em ambos esses erros parecem possuir um comportamento não-monotônico que leva à presença de um máximo para 256 partículas. Isto pode estar relacionado com o valor real dos erros médio e global calculados, que diminuem à medida que o número de partículas no reator aumenta.

Os testes para os casos 1, 2 e 3 mostram que o número de recuperações ultrapassa o número de adições na nova estratégia. Isso indica que a região acessada pelos cálculos tem mais composições acuradas e necessita de menos avaliações diretas, ou seja, a árvore é mais rica na nova estratégia do ISAT. Esse comportamento não foi observado na estratégia original, onde o número de adições é igual ao número de avaliações diretas. Além disso, este fato mostra uma maior eficácia do algoritmo quando a nova estratégia é utilizada, em relação à anterior.

Considerando-se o tempo gasto na simulação do algoritmo, e tomado-se como referência o caso 1, para comparação com os casos 2 e 3, correspondentes ao aumento no número de partículas no reator, o caso 2 (com 256 partículas) leva o triplo de tempo no processamento, no entanto, os erros médio e global diminuem à metade. O caso 3 (com 1024 partículas) leva 26 vezes mais tempo para processar, devido ao grande número de partículas e os erros médio e global são da mesma ordem de grandeza do caso 1 (com 100 partículas).

Este aumento não linear do tempo de CPU com o número de partículas estocásticas no reator está relacionado, também, ao grande número de adições que ainda estão sendo feitas na árvore e que penaliza o tempo de CPU

Nas configurações testadas onde o reator se comporta como um PaSR, isto é, nos casos 1, 2 e 3, observa-se que a redução relativa média na altura da árvore é de mais de 97%, o tempo de CPU foi reduzido em cerca de 22% e o erro global e médio diminuiu mais de 63% e 45% respectivamente. Isso ressalta as vantagens da estratégia proposta para tabulação do ISAT.

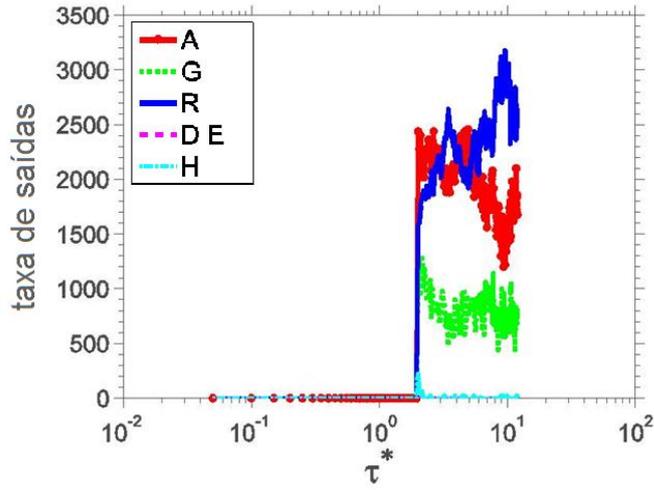
4.2.1.2. Situação Quase-PSR

O caso 4 envolve o mesmo número de partículas que o caso 2, porém o tempo de residência é cinco vezes maior. Nessa configuração, onde as escalas de tempo de emparelhamento e de mistura são pequenas quando comparadas com o tempo de residência, o reator se comporta como se o processo de emparelhamento e mistura ocorresse quase instantaneamente. Esta situação se aproxima de um reator perfeitamente agitado (PSR).

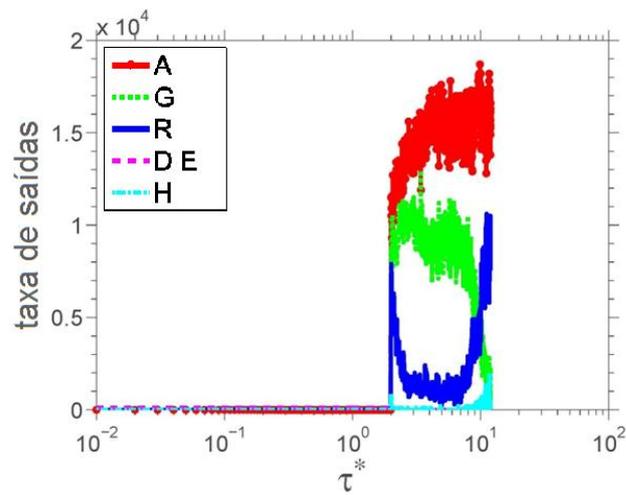
Ao se comparar os parâmetros de desempenho mostrados na Tabela 4-6, para os casos 2 e 4, onde as condições simuladas são as mesmas, com exceção ao tempo de residência, que no caso 4 é cinco vezes maior que no caso 2, observa-se que os ganhos relativos aos erros diminuem do caso 2 para o caso 4. No caso 4 o reator se afasta da condição de extinção e no caso 2 ocorre situação na qual o reator se aproxima da condição de extinção.

A Figura 4-7, que apresenta a taxa de variação das saídas características do ISAT e do tamanho da árvore para os casos 2 e 4, mostra no caso 2 a árvore se estabiliza rapidamente, enquanto que no caso 4, ela ainda se encontra em crescimento quando a simulação é finalizada. Por esse motivo, embora esteja longe da zona de extinção da chama e a árvore não esteja saturada, o caso 4 apresenta erros médios que são aproximadamente 1 ordem de grandeza maiores que aqueles apresentados pelo caso 2, como mostra a Tabela 4-9. Esta tabela reporta os valores de erros absolutos de cada um dos elementos considerados (CO , O_2 , O , CO_2) e da temperatura usando o algoritmo ISAT original e o modificado para os casos 2 e 4.

Baseado nesses gráficos pode-se inferir que o tempo de simulação não foi suficiente para que o número de recuperações na árvore ultrapassasse o número de adições na situação onde o reator se afasta da extinção, como pode ser observado da Figura 4-8, o que faz com que o uso do ISAT no caso 4 não seja eficiente. Ainda assim, o uso da nova estratégia é mais vantajoso do que o uso da estratégia original, isso pode ser concluído a partir dos ganhos mostrados na Tabela 4-6. Desse modo, tal como discutido na seção 3.3.4, os ganhos com relação ao tempo de CPU aumentam quando comparados com o caso 2.

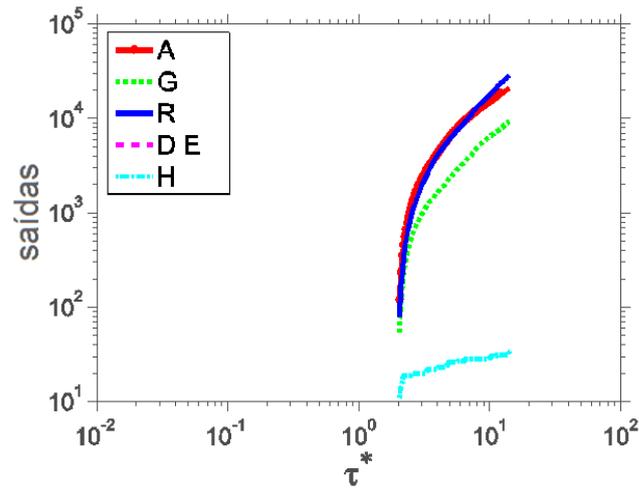


a) caso 2.

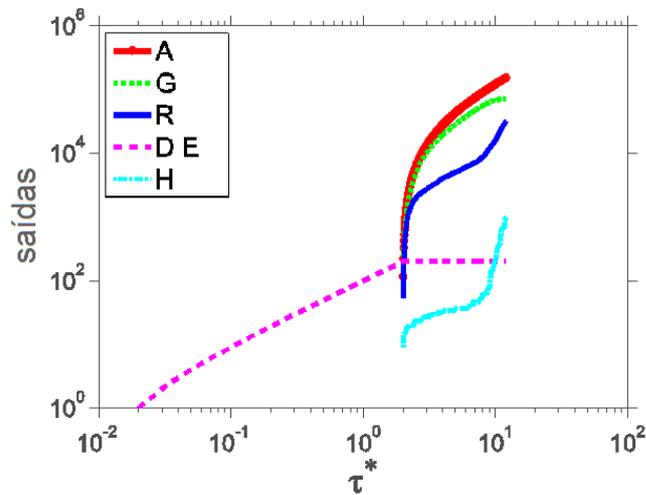


b) caso 4.

Figura 4-7. Taxa das saídas características e árvore binária do ISAT – casos 2 e 4. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.



a) caso 2.



b) caso 4.

Figura 4-8. Saídas características do ISAT – casos 2 e 4. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.

O caso 4 (256 partículas e $\tau_r = 1000\mu s$), que possui uma grande altura de árvore aliada a um grande número de adições na árvore (Tabela 4-10), pode ser comparado com o caso 7 (1024 partículas e $\tau_r = 1000\mu s$). Com base na Figura 4-9 e na Figura 4-10, observa-se que o caso 4 possui maior dispersão dos valores calculados. O gráfico da variância calculada para a temperatura do caso 4 reflete o fato de que, embora a temperatura média se mantenha constante após atingir o regime estatisticamente permanente, há uma dispersão considerável dos valores de temperatura, a qual não é observada na situação em que há mais partículas no reator. Assim, a condição de operação com poucas partículas e grande tempo de mistura pode levar a uma grande dispersão das propriedades dentro do reator, isso

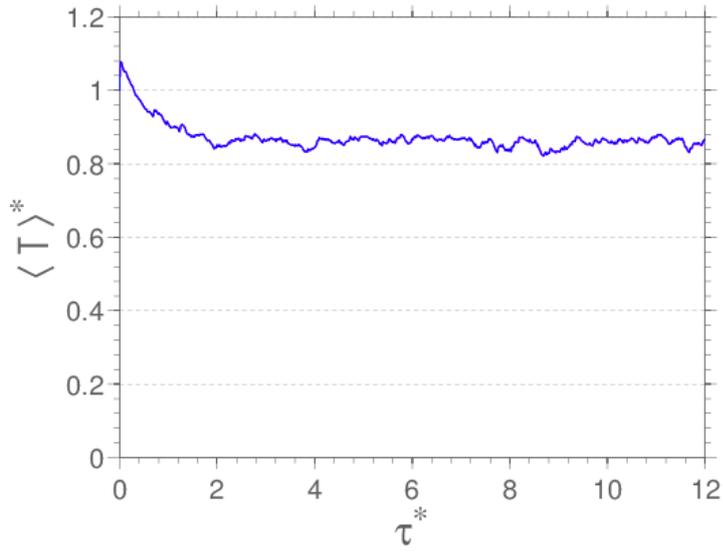
resulta em mais adições na árvore binária e em uma árvore com grande altura, ou seja, menos homogênea.

Tabela 4-9. Erro absoluto fornecido pelo ISAT modificado e original e seus respectivos ganhos, em cada elemento considerado e temperatura, para os casos 2 e 4.

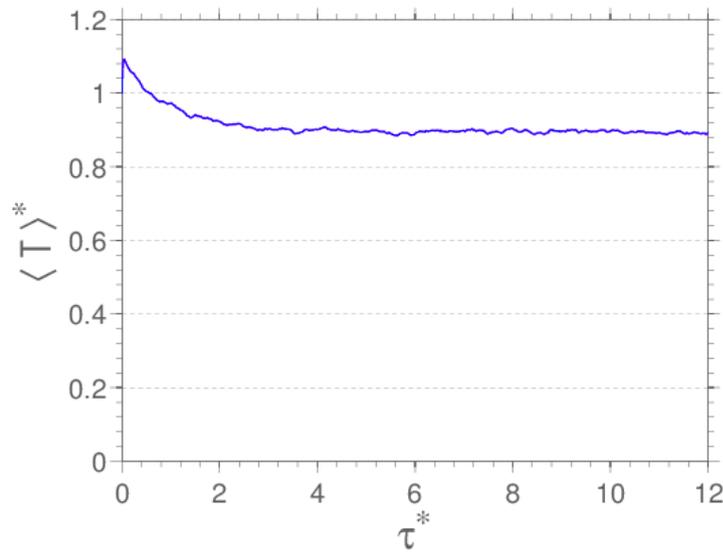
Elemento	Caso 2		Caso 4	
	Modificado	Original	Modificado	Original
T	$1,6 \times 10^{-5}$	$4,6 \times 10^{-5}$	$2,7 \times 10^{-4}$	$2,9 \times 10^{-4}$
CO	$2,8 \times 10^{-6}$	$1,4 \times 10^{-5}$	$2,4 \times 10^{-4}$	$2,5 \times 10^{-4}$
O ₂	$3,1 \times 10^{-6}$	$8,0 \times 10^{-6}$	$3,7 \times 10^{-5}$	$3,6 \times 10^{-5}$
O	$3,4 \times 10^{-5}$	$7,9 \times 10^{-5}$	$9,5 \times 10^{-4}$	$1,0 \times 10^{-3}$
CO ₂	$1,3 \times 10^{-5}$	$3,8 \times 10^{-5}$	$1,8 \times 10^{-4}$	$1,9 \times 10^{-4}$

Tabela 4-10. Comparação do número de adições, recuperações e altura da árvore entre os casos 4 e 7.

	Caso 4	Caso 7
Nº adições	152532	18759
Nº recuperações	31422	24554
Altura da árvore	960	34

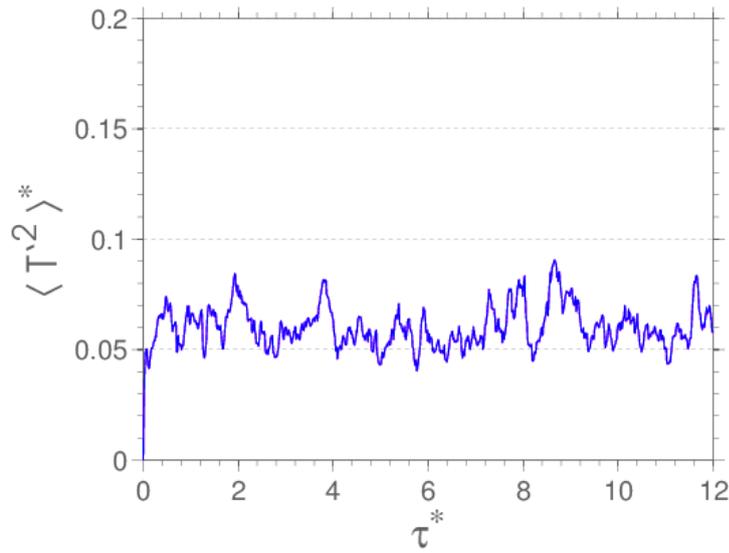


a) Caso 4.

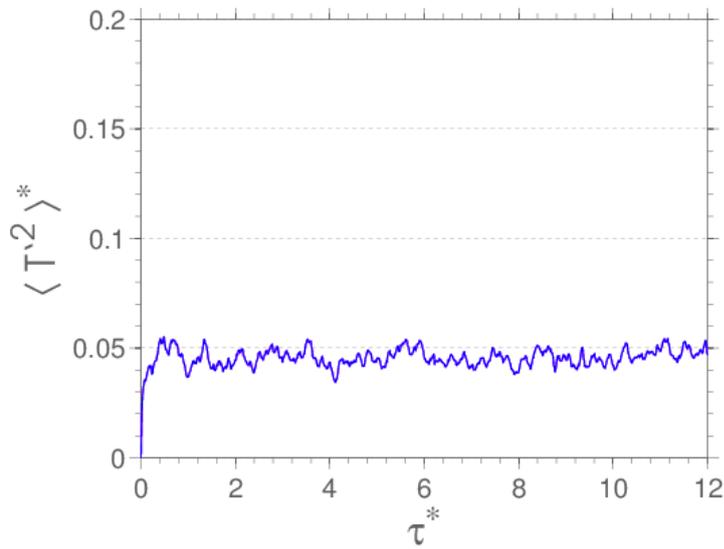


b) Caso 7.

Figura 4-9. Evolução da temperatura dentro do reator. Casos 4 e 7.



a) Caso 4.



b) Caso 7.

Figura 4-10. Variância da temperatura calculada como: $\langle T'^2 \rangle^* = \frac{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}{(T_{eq} - T_{in})^2}$. Casos 4 e 7.

Finalmente, um dos principais inconvenientes encontrados no ISAT original é a grande demanda de memória. Para todos os casos testados, a nova estratégia de tabulação ocupa apenas 80%, em média, da memória ocupada pela versão original.

4.2.1.3. Influência do Tempo Inicial de Tabulação

Será estudada a resposta do algoritmo quando o tempo inicial de tabulação varia para o caso em que o tempo de mistura é da ordem do tempo de residência e o reator é parcialmente agitado (PaSR). Para fazer uma análise apenas da influência do início da tabulação nos resultados, os casos 1a, 1b, e 1c foram simulados tendo como base o caso 1 e variando somente o instante em que se começa a tabular, ou seja, variando t_T , tal como mostrado na Tabela 4-5. Para todos os casos o tempo de residência, τ_r , é de 200 μ s. Os ganhos obtidos para a variação deste parâmetro são apresentados na Tabela 4-6 e na Figura 4-11.

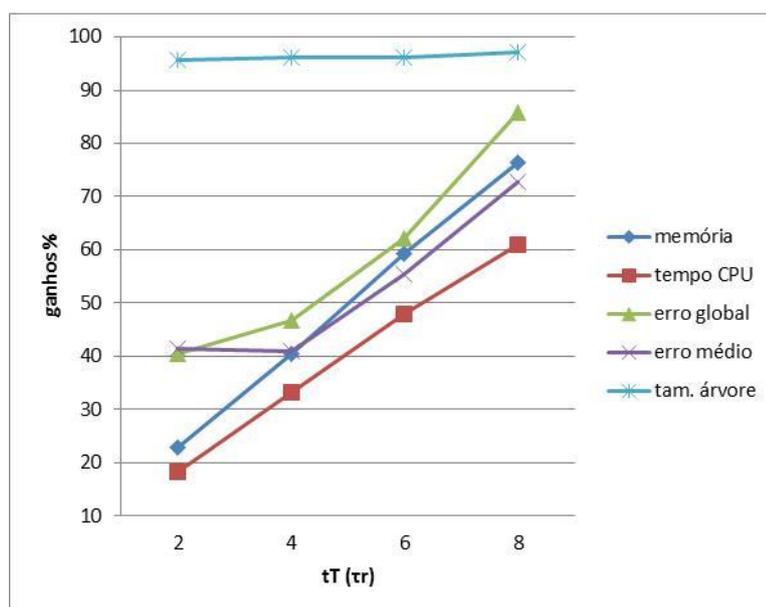


Figura 4-11. Ganhos relativos - casos 1, 1a, 1b e 1c.

Da Figura 4-11, pode-se observar que os ganhos com a memória aumentam quase que linearmente com tempo de início de tabulação para as condições simuladas. Outra observação importante é que o tamanho da árvore reduz bastante e chega a ser, para o caso 1c, 33 vezes menor que aquele obtido no caso original. Os erros global e médio também se tornaram menores, isso leva a uma maior acurácia das composições calculadas, quando a nova formulação é utilizada.

O caso 1 e suas variações, cujos resultados são mostrados na Tabela 4-6, tem o número de recuperações três vezes maior que o número de adições, aproximadamente. Isso faz com que o ISAT usado neste caso teste não seja

eficiente quando comparado com DI, no entanto, quando comparada com a versão original do ISAT, a nova estratégia é mais vantajosa.

Por último, pode-se afirmar que, em todos os casos em que a árvore não satura, a nova formulação é mais vantajosa que a formulação original do ISAT, no que diz respeito à altura da árvore binária, acurácia, tempo de CPU e memória demandada. Conforme o exposto na seção 3.3.4, os casos estudados até aqui são bastante favoráveis aos altos ganhos relativos ao tempo de CPU.

4.2.2. Árvore Saturada

Todos os casos estudados nesta seção foram simulados utilizando a mesma semente para todos os processos estatísticos, ou seja, entrada, saída, e mistura no reator.

Nesta seção serão apresentados estudos onde o número máximo permitido de entradas na árvore é atingido, levando a sua saturação. As condições iniciais de simulação são as mesmas apresentadas na Tabela 4-4, no entanto o número de partículas, o tempo para iniciar a tabulação, o número de tempos de residência simulados e o número máximo de entradas permitidas na árvore variam; esses são os parâmetros variáveis, apresentados na Tabela 4-7. O estudo paramétrico realizado para análise com árvore binária lotada, considerou 5 diferentes casos.

No caso 6 somente, a árvore binária de busca saturou apenas na simulação com o algoritmo original e não saturou com a nova estratégia de tabulação. Nos demais casos estudados a árvore binária de busca saturou tanto no uso do algoritmo original quanto no uso do algoritmo modificado com a nova estratégia de tabulação. Os ganhos obtidos para os casos 5 a 9 são apresentados na Tabela 4-8 e analisados nas subseções seguintes.

4.2.2.1. Situação PaSR

Nos casos em que o reator se aproxima de um PaSR, os resultados, apresentados na Tabela 4-8, são analisados em termos de ganho [Eq.(3.16)] com relação ao tempo de simulação, ao erro global e ao médio, e à altura da árvore binária.

A Figura 4-12 e a Figura 4-13 mostram as saídas características para o caso 5 e o caso 8, respectivamente. Note-se que a árvore binária atinge um estado estacionário rapidamente e é 238 vezes menor que a árvore binária formada no algoritmo original. Esta figura mostra que pouco após a árvore saturar no caso 8, o crescimento também satura.

Ao se aumentar apenas o o número de tempos de residência simulados e se manter os outros parâmetros constantes, como ocorre quando se compara o caso 8 com o caso 5, o ganho na altura da árvore não varia, mas o ganho nos erros médio e global diminuem e o ganho no tempo de simulação aumenta. Isso acontece porque quanto maior o tempo de simulação maior será a eficiência do ISAT, pois o algoritmo fará mais recuperações na árvore binária do que adições, que é a operação mais cara e se estabiliza logo no início da simulação, assim como o número de crescimentos. Esse comportamento não é observado para o caso 5, que passa grande parte do tempo da simulação realizando operações caras.

Esse motivo também explica o observado na Figura 4-12 e na Figura 4-13. Embora o caso 5 e o caso 8 apresentem bons ganhos nos parâmetros de desempenho avaliados, a diferença no tempo total simulado ($12 \tau_r$ e $120 \tau_r$) leva a uma grande diferença nos ganhos em relação aos erros e ao tamanho da árvore de busca. No caso 8, o número de recuperações na árvore binária é 31 vezes maior que o número de adições, o que comprova a eficiência algoritmo ISAT.

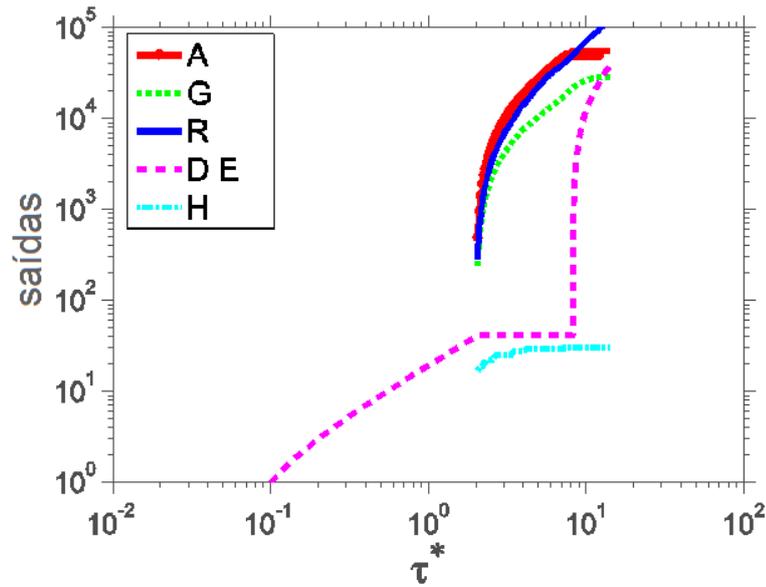


Figura 4-12. Saídas características do ISAT - caso 5. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.

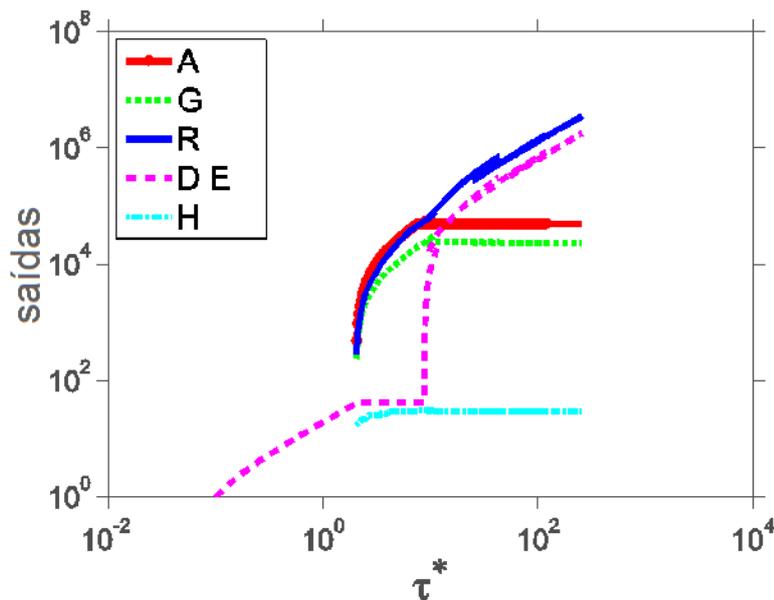


Figura 4-13. Saídas características do ISAT - caso 8. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.

O ganho negativo de tempo de CPU para o caso 5 indica que, com a nova estratégia, a simulação gastou mais tempo de CPU do que a estratégia original nas condições apresentadas. Esse comportamento, indesejável, desaparece ao se aumentar o número máximo de entradas permitidas na árvore binária, como pode ser observado na Tabela 4-8, para o caso 6.

Quando se aumenta apenas o número máximo de entradas permitidas na árvore binária, como acontece com o caso 6 ao ser comparado com o caso 5, tem-se que o ganho no tempo de simulação aumenta consideravelmente, no entanto, os ganhos nos erros diminuem, apesar de ainda assim serem altos. Isso se deve ao fato de o caso 6 permitir recuperações mais acuradas devido ao maior número de registros nas folhas das árvores.

A simulação mostrou que o caso 6 não satura a árvore quando a nova estratégia de tabulação é utilizada, mas satura a árvore quando a estratégia original é utilizada. Isso também comprova a eficiência da nova estratégia, considerando que o uso de memória é menor do que no algoritmo original. Ao se comparar ISAT modificado com ISAT original, para o caso 6, percebe-se que aquele é consideravelmente mais vantajoso em todos os parâmetros de desempenho avaliados, como apresenta a Tabela 4-8; e ainda tem um ganho superior a 10% em termos de memória, já que a árvore binária de busca não alcançou o número máximo de entradas permitidas e portanto, não saturou.

Baseado nas simulações dos casos 5 e 6, que diferem apenas pelo número máximo de entradas permitidas na árvore de busca binária, pode-se concluir que esse número deve ser correspondente a uma grande parte da memória disponível no computador, tendo em vista que o caso 6 mostrou-se muito mais rápido de simular do que o caso 5, o qual tem menos entradas na árvore binária. Outra observação importante é que os erros global e médios também são 4 vezes menores, já que a árvore possui uma maior riqueza de composições no caso 6 do que no caso 5.

O caso 9 tem o número de partículas quatro vezes maior do que o caso 8. Os resultados mostram que os ganhos com relação aos erros global e médio são drasticamente aumentados e o ganho relativo ao tempo de simulação diminui, embora ainda seja marginalmente vantajoso em relação ao algoritmo original.

Finalmente, conclui-se da Tabela 4-8 que, em todos os casos analisados, os ganhos em relação à altura da árvore são superiores a 99%, o que representa, para o caso 9, árvores binárias 1000 vezes menores que as do algoritmo original. Esse fato mostra que usando a nova estratégia, tem-se uma árvore binária de busca mais equilibrada e, conseqüentemente, o tempo para percorrê-la é menor do que aquele gasto na estratégia original de tabulação do ISAT.

4.2.2.2. Situação Quase-PSR

No caso 7, apresentado na Tabela 4-7, observa-se que o tempo de residência é cinco vezes maior que nos demais casos, aproximando-se, assim, de um reator do tipo PSR. Nesse caso, a temperatura se estabiliza em um valor alto, próximo à temperatura de combustão adiabática, situação em que a análise dos resultados na Tabela 4-8 mostra que a nova estratégia, aqui proposta, é mais vantajosa que a estratégia original.

No caso 7, a estratégia proposta também leva a ganhos substanciais quando comparada à original, no que tange aos erros global e médio, cujos ganhos são de 52% e 31%, respectivamente, e principalmente à altura da árvore de busca binária, com ganho de 99% e uma árvore que é 102 vezes menor do que aquela da formulação original do algoritmo.

4.2.2.3. Influência do Tempo Inicial de Tabulação

A Figura 4-14 mostra que a temperatura no reator se estabiliza próximo de $6\tau_r$, para o caso 5, que foi simulado com $12\tau_r$. Após $6\tau_r$, o reator entra em regime permanente e temperatura encontra-se em um regime estatisticamente estacionário típico de um PaSR. Nessa seção, a resposta do algoritmo usando a nova estratégia de tabulação é estudada, quando o tempo inicial para começar a preencher a tabela, t_T , varia dentro da zona de regime transiente, que no caso 5, admite-se que vai até $6\tau_r$. as variações realizadas em torno do caso 5 têm seus parâmetros característicos mostrados na Tabela 4-8. O número de partículas no reator é de 1024, e o número de tempos de residência simulados permanece constante e igual a $12\tau_r$. Note-se que o tempo de residência, τ_r , nesse caso é $200\mu\text{s}$.

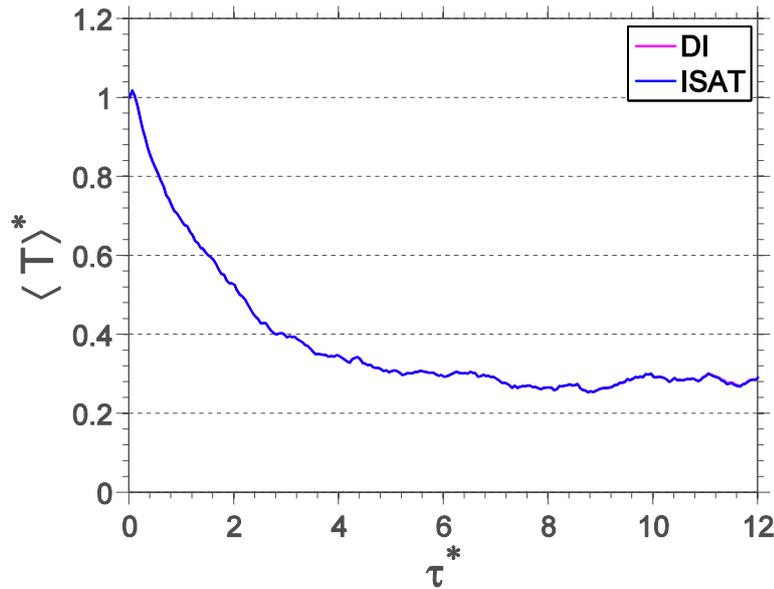


Figura 4-14. Evolução da temperatura reduzida dentro do reator - caso 5.

A Tabela 4-8 apresenta os resultados obtidos com variante do caso 5, alterando apenas o tempo inicial de tabulação. A Figura 4-15 traz o gráfico desses resultados.

É importante notar que a simulação para $t_T=8\tau_r$, onde o regime permanente já havia sido atingido, não saturou a árvore e por isso não aparece na tabela. Essa situação apresentou ganho em termos de memória de 28,2%; no que diz respeito ao tempo de processamento, o ganho foi de 21,4% e os ganhos em relação aos erros ultrapassaram 99%.

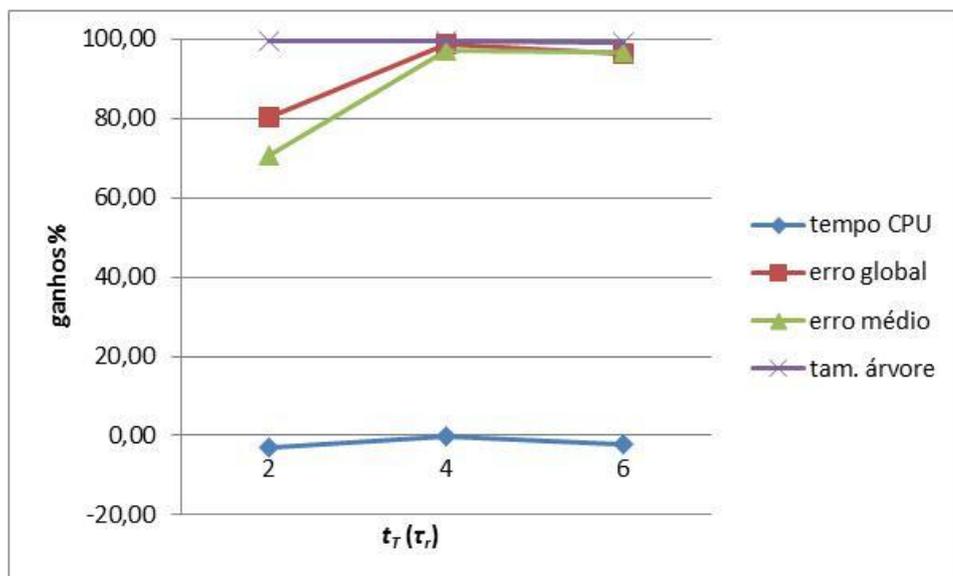


Figura 4-15. Ganhos em relação ao aumento do tempo inicial de tabulação – caso 5 e suas variações.

A Tabela 4-8 mostra que a nova estratégia leva aproximadamente o mesmo tempo para simular que a original, no entanto os ganhos em relação aos erros médio e global são bastante altos, chegando a atingir mais de 98%. O tamanho das árvores binárias é drasticamente reduzido, tendo apenas 1% do tamanho das árvores binárias da formulação anterior.

O caso 8 é semelhante ao caso 5, no entanto foi simulado com tempo total de $120\tau_r$, um valor dez vezes maior do que o utilizado no caso 5. Lembrando que o reator se estabiliza próximo de $6\tau_r$, a resposta do algoritmo é agora estudada quando o tempo inicial de tabulação, t_T , varia dentro da zona de regime transiente, e um pouco depois de entrar no regime permanente. Essa variação vai de $2\tau_r$ até $16\tau_r$.

A Tabela 4-7 apresenta os parâmetros de simulação de variantes do caso 8, que consiste em alterar apenas o tempo inicial de tabulação, t_T , o tempo total de simulação é de $120\tau_r$. Os ganhos correspondentes a essa variação de t_T são apresentados na Tabela 4-8 e na Figura 4-17.

A Figura 4-16 mostra as saídas características do algoritmo para diferentes valores de t_T indicando as variantes do caso 8. A Tabela 4-11 apresenta os valores numéricos dessas saídas para os casos 8 a 8d.

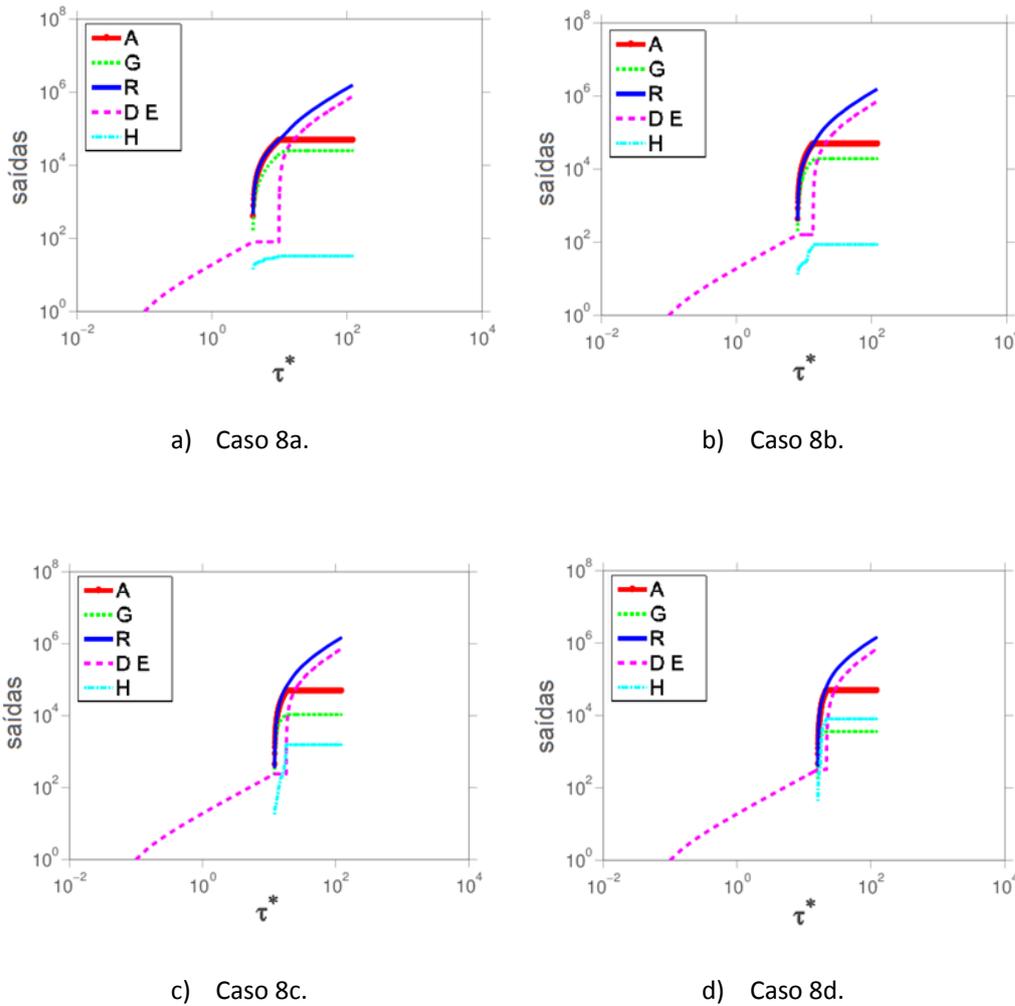


Figura 4-16. Saídas características do ISAT – variantes do caso 8. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore.

Em uma árvore binária, o tempo de busca de informações na tabela ISAT varia com a altura da árvore, desse modo, o custo de busca em uma árvore perfeitamente balanceada é da ordem do logaritmo binário do número de folhas. Quanto mais desbalanceada estiver uma árvore, mais este custo de busca se aproxima de uma busca sequencial em um vetor, que é da ordem do número de folhas.

As variantes do caso 8 exemplificam como a altura da árvore tem grande influência no tempo de processamento do algoritmo. Considerando os casos 8 a 8d, a Tabela 4-11 apresenta o número de operações realizadas durante a simulação. Sabe-se que o número de adições em todos os casos é o mesmo, pois a árvore ficou saturada; considerando o número de recuperações iguais para todos eles, é possível observar que o número de crescimentos e de avaliações direta, as

quais são operações caras, diminuem conforme o t_T aumenta. O caso 8d tem 7 vezes menos crescimentos na árvore do que o caso 8, no entanto, sua árvore é 267 vezes maior do que aquela do caso 8.

Sabe-se, ainda, que o tempo para realizar uma adição, um crescimento ou uma avaliação direta não varia em função do tamanho da árvore, porém o tempo para realizar uma recuperação é proporcional ao tamanho da mesma. A Tabela 4-11 mostra que, para o caso 8d, que possui a maior árvore, o tempo médio para se realizar uma recuperação na árvore binária de busca é cerca de 200 vezes maior do que no caso 8, que possui a menor altura de árvore.

Ao analisar o tempo de CPU desses dois casos, observa-se que o tempo de CPU do caso 8d é 40% maior do que no caso 8. Esse acréscimo no tempo faz com que o ganho no caso 8d, seja muito menor que no caso 8.

Tabela 4-11. Valores numéricos para as saídas características - caso 8 e suas variações.

	CASO				
	8	8a	8b	8c	8d
Nº adições	50000	50000	50000	50000	50000
Nº crescimentos	23317	24902	19359	10653	3586
Nº recuperações	1565218	1541295	1520430	1440795	1404992
Nº avaliações diretas	778144	759562	704130	710631	671661
Altura da árvore	30	33	86	1560	8023
Tempo méd. recup (s)	$6,39 \times 10^{-7}$	$1,29 \times 10^{-6}$	$1,32 \times 10^{-6}$	$3,40 \times 10^{-5}$	$1,26 \times 10^{-4}$

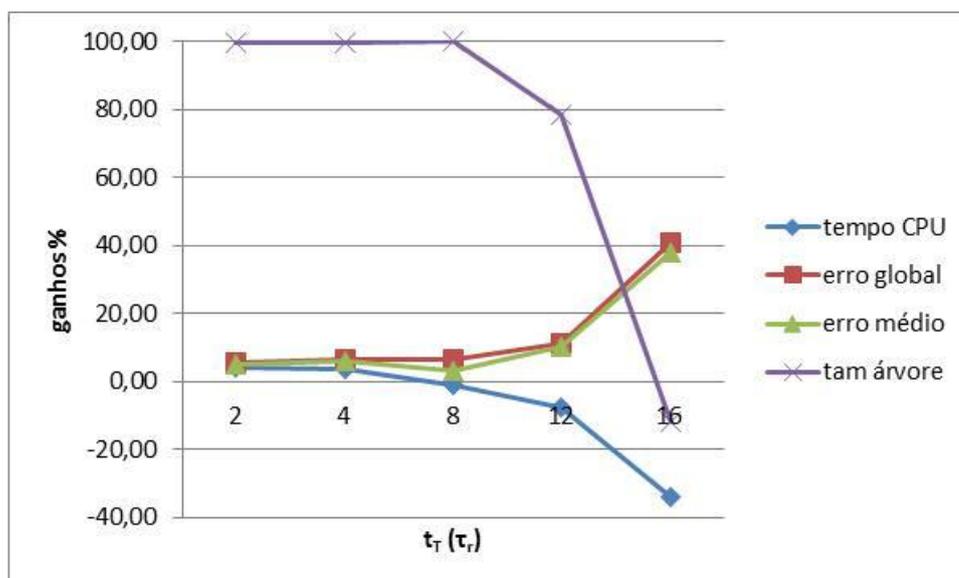


Figura 4-17. Ganhos em relação ao aumento do tempo inicial de tabulação – caso 8 e suas variações.

Os ensaios realizados com a nova estratégia de tabulação apresentaram uma diminuição de até 3 ordens de grandeza na altura da árvore quando o tempo para iniciar a tabulação não ultrapassa $8\tau_r$. Essa diminuição da altura gerou uma árvore mais “balanceada” que a anterior e isso se refletiu no menor tempo de simulação do algoritmo.

A Figura 4-17, que mostra graficamente os resultados da Tabela 4-8, permite verificar que, após $t_T=8\tau_r$, o tempo de simulação aumenta quando se usa a nova estratégia de tabulação, ao se comparar com a estratégia original. Em $t_T=16\tau_r$, o tempo gasto no processamento do algoritmo com a nova estratégia é cerca de 30% maior do que a original, esta situação é esperada já que houve muitas avaliações diretas, considerando que t_T é elevado e assim, a nova estratégia se torna desvantajosa. Essa situação também é associada à grande altura da árvore binária; com $t_T=16\tau_r$, a árvore tem sua altura maior do que a do algoritmo original.

A Figura 4-18 mostra que até $8\tau_r$, a curva da temperatura apresenta pequena flutuação temporal em torno do valor médio, no entanto, as Figura 4-19 e Figura 4-20, mostram que após $8\tau_r$, há uma maior flutuação na curva da temperatura. A amplitude da flutuação dos valores calculados para a temperatura e para a variância está diretamente relacionada com a quantidade de estados termodinâmicos possíveis no reator. Logo, quanto maior for a diversidade de composições químicas que uma partícula pode assumir, maior será a quantidade

de pontos tabulados no ISAT. Ademais, o fato de a árvore ter grande altura pode indicar uma direção preferencial de evolução das composições dentro do reator, a qual pode ser a qual pode ser a situação de regime estacionário.

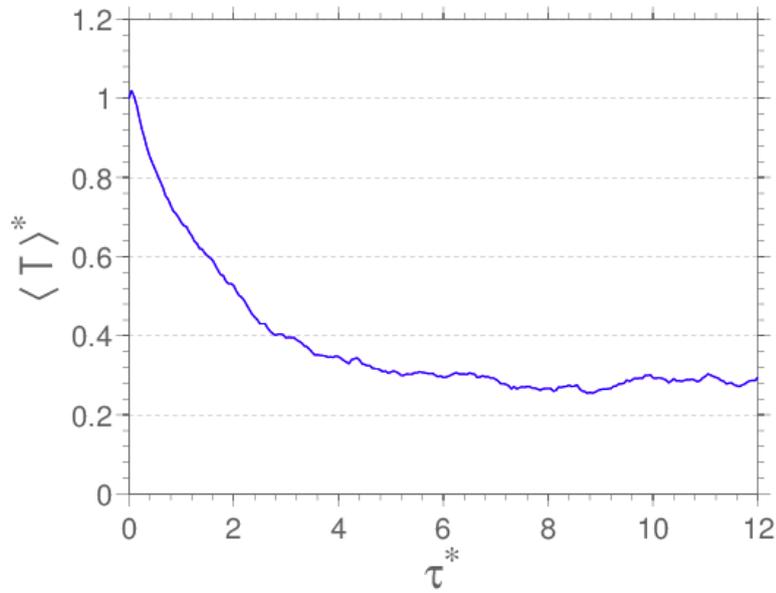


Figura 4-18. Zoom da curva de temperatura até 12 tempos de residência - caso 8.

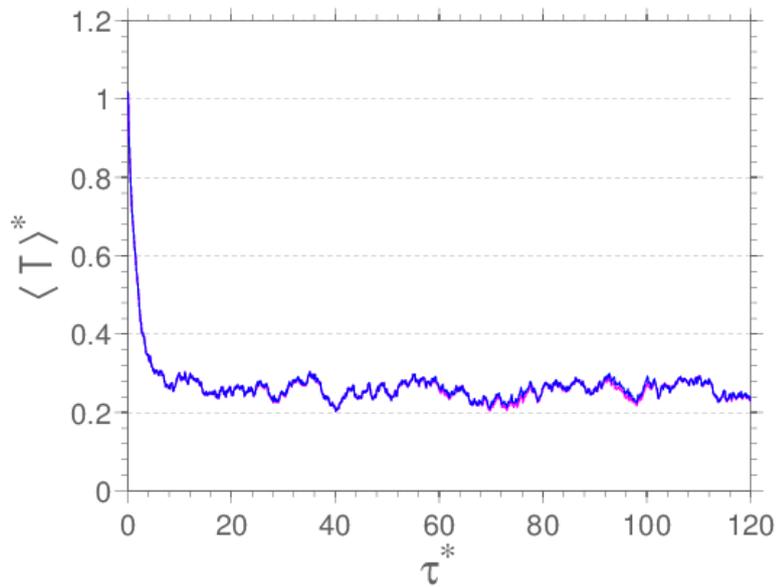


Figura 4-19. Evolução da temperatura no reator - caso 8.

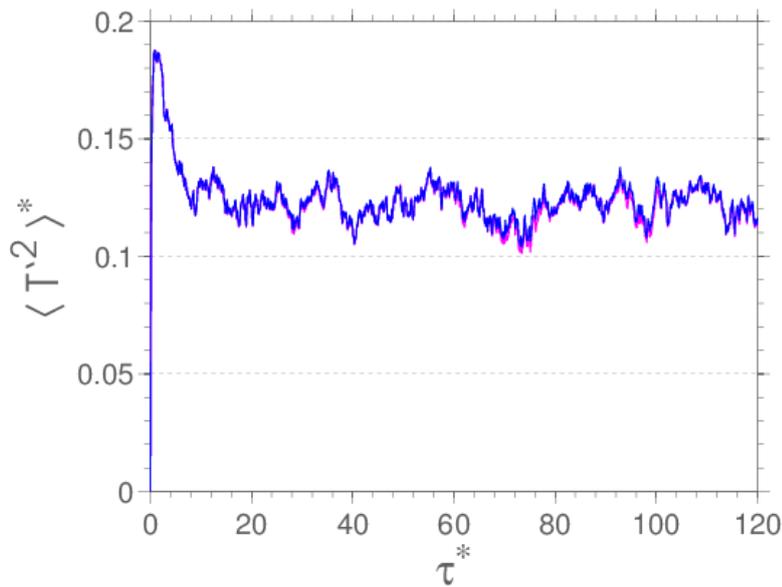


Figura 4-20. Variância da temperatura calculada como: $\langle T'^2 \rangle^* = \frac{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}{(T_{eq} - T_{in})^2}$. Caso 8.

Os ganhos no erro máximo e no global apresentam comportamentos semelhantes, aumentando à medida que o tempo de início da tabulação aumenta e atingido o máximo ganho com $t_T = 16\tau_r$. Isso ocorre porque muitas integrações diretas, as quais fornecem o valor exato e não aproximado do mapa de reação, foram realizadas.

4.3. Estudo da Nova Estratégia de Tabulação – Algoritmo Modificado – CH₄/ar

Nesta seção, o mecanismo GRI3.0 é utilizado no estudo da combustão do metano com ar. As condições de teste são apresentadas na Tabela 4-12. Observa-se da Tabela 4-12 que as condições de teste para os casos 1 e 2 diferem pelo valor atribuído à tolerância de erro do ISAT e pelas condições iniciais dos gases presentes no reator. Testes com valor de tolerância de erro igual a 10^{-3} apresentaram dificuldade para ignitar o reator e manter um regime estatisticamente estacionário. No caso 1 a tolerância do erro é 10 vezes maior que a do caso 2 e a composição dos gases queimados dentro reator foram calculados na condição isoentálpica para aquela pressão e temperatura. No caso 2 os gases iniciais dentro do reator têm a mesma composição dos gases de entrada, ou seja,

sua riqueza vale 1. Nos dois casos, o tempo de residência é o mesmo e a temperatura é de 2.230 K.

O caso 3 tem o dobro do tempo de residência dos outros dois casos, e se aproxima de uma situação PSR na qual a temperatura dentro do reator é próxima à temperatura de combustão adiabática. O tempo para iniciar a tabulação e o tempo total de simulação são menores do que nos casos anteriormente estudados, no entanto a razão t_T/τ^* é idêntica para os três casos estudados na combustão do metano com ar.

Os casos 2 e 3 diferem pelo valor atribuído ao tempo de residência das partículas dentro do reator e pelo tempo total e inicial de tabulação. O número de partículas e as condições iniciais dos gases de entrada se repetem nos três casos, assim como os tempos característicos do reator e o número máximo de entradas permitidas na árvore binária, que é de 60.000.

A Tabela 4-13 traz os ganhos no tempo de CPU, no erro global na altura da árvore e na quantidade de avaliações diretas realizadas e a Figura 4-21 apresenta as saídas características para os casos 1, 2 e 3 da combustão do metano com ar.

Ao comparar os resultados usando a nova estratégia de tabulação com os resultados originais, tem-se um ganho no erro global de aproximadamente 30% no caso 1, ou seja, a acurácia para essa condição melhora consideravelmente. A altura da árvore apresenta ganhos em torno de 23%, esse ganho, baixo quando comparado aos casos estudados na seção 4.2, deve-se ao fato de a árvore gerada pelo algoritmo original também ser pequena, indicando árvores binárias de busca mais balanceadas.

Quando a tolerância é diminuída, o ganho de altura da árvore, obtido com a nova estratégia é significativo. Os casos 2 e 3 apresentam ganhos expressivos na altura da árvore binária, isso porque a nova estratégia gerou uma árvore de busca 350 vezes menor do que a estratégia original no caso 2 e 500 vezes menor no caso 3, indicando que as árvores ficaram mais balanceadas com a nova estratégia de tabulação. No caso 1, o tempo de CPU se manteve praticamente inalterado com a nova estratégia. Nos casos 2 e 3, o ganho em termos de tempo de CPU é levemente melhor do que no caso 1.

Tabela 4-12. Condições iniciais usadas nos casos simulados para a combustão da mistura CH₄/ar.

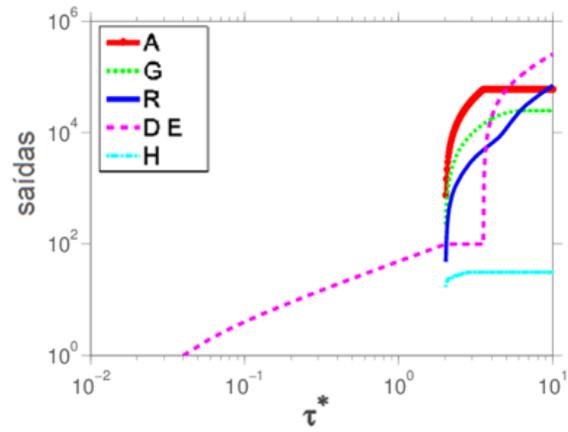
	CASO		
	1	2	3
Tolerância de erro ISAT- ε_{tol}	$1,00 \times 10^{-4}$	$1,00 \times 10^{-5}$	$1,00 \times 10^{-5}$
Riqueza inicial	1,0	1,0	1,0
Temperatura dos gases de entrada (K)	300	300	300
Pressão dos gases de entrada (atm)	1	1	1
Condição dos gases dentro do reator	Isoentálpico	Riqueza=1	Riqueza=1
Temperatura gases dentro do reator (K)	2230	2230	2230
Tempo de mistura (ms) - τ_m	1	1	1
Tempo de emparelhamento (ms) - τ_p	1	1	1
Tempo de residência (ms) - τ_r	5	5	10
Nº partículas - n_p	1024	1024	1024
Tempo tab. inicial - t_T	$2\tau_r$	$2\tau_r$	$1\tau_r$
Tempo total simul. - τ^*	$10\tau_r$	$10\tau_r$	$5\tau_r$

Tabela 4-13. Ganho calculado para cada caso avaliado com o algoritmo modificado em relação ao algoritmo original.

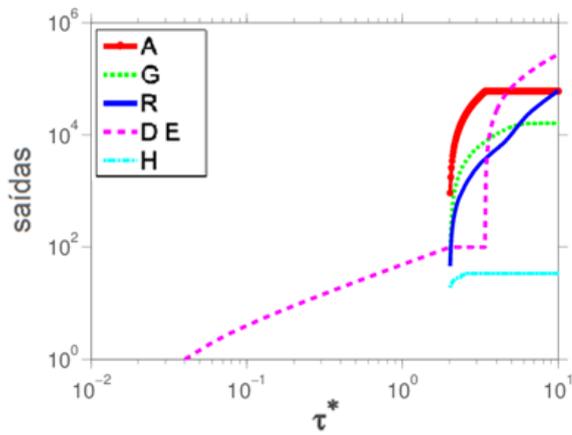
GANHO %	CASO		
	1	2	3
Tempo de CPU	-1,2	2,7	3,2
Erro global	29,5	3,9	21,5
Altura da árvore	22,5	99,7	99,8
Nº avaliações diretas	18,8	21,2	18,3

Outra observação interessante é o ganho em relação ao número de avaliações diretas feitas pelo código. Mesmo introduzindo um atraso na tabulação feita pelo ISAT, ou seja, fazendo com que ele realize mais avaliações diretas nos instantes iniciais, tem-se que o número total dessas avaliações é menor quando se usa a nova estratégia de tabulação do que com o algoritmo original. Para os três casos de combustão do metano com ar avaliados, encontra-se um ganho da ordem de 20%. Ao se realizar menos operações demoradas, como as avaliações diretas, o tempo total de simulação também diminui.

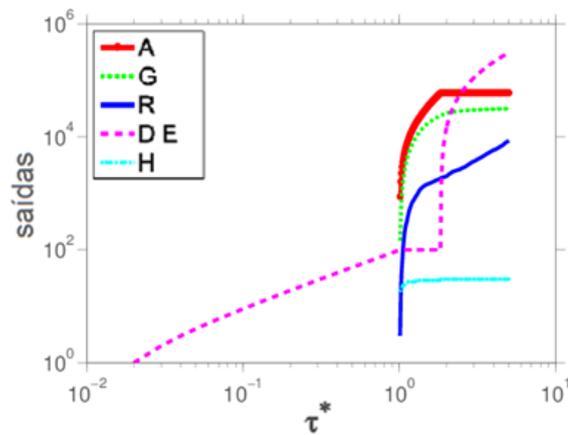
Considerando os três casos avaliados, tem-se um ganho para o erro global menor do que o apresentado para a combustão do CO/O₂, esse comportamento se repete no ganho em relação ao tempo de CPU. No entanto, com exceção do caso 1, o ganho na altura da árvore se mantém no mesmo patamar daquele apresentado pela maioria dos casos de combustão do CO/O₂ (Tabela 4-6, Tabela 4-8 e Tabela 4-13).



a) Caso 1.



b) Caso 2.



c) Caso 3.

Figura 4-21. Saídas características do ISAT. A=adições, G=crescimentos, R=recuperações, DE=avaliações diretas, H=altura da árvore – CH₄/ar.

Para as condições analisadas na combustão do CH₄/ar, a Tabela 4-14 apresenta o tempo médio de cada operação realizada pelo ISAT, medido durante as simulações e usando um processador IntelCore2 de 2,13GHz. Nesses casos, a recuperação de uma informação na árvore binária é 3 ordens de grandeza mais rápida do que a avaliação direta das equações.

Tabela 4-14. Tempos médios das operações características do ISAT, no caso da combustão CH₄/ar.

Saídas Características	Tempo (μs)
Adição	10 ³
Crescimento	10 ¹
Recuperação	10 ⁻²
Avaliação Direta	10 ¹

Deve-se atentar ao fato de que esses são valores médios e que, enquanto o tempo gasto com a adição, o crescimento e a avaliação direta são valores aproximadamente constantes, o tempo gasto na recuperação varia com cada caso simulado, uma vez que é proporcional ao tamanho da árvore binária.

Por fim, conclui-se que o uso da nova estratégia de tabulação no algoritmo ISAT é vantajoso no que diz respeito, principalmente à altura da árvore binária e à acurácia, e como consequência, influencia positivamente a memória ocupada pelo programa durante a execução do mesmo, o tempo de processamento e a precisão dos resultados.