

6 Comentários Finais

No presente trabalho, simulações do escoamento quimicamente inerte foram realizadas com os objetivos principais de verificar a equivalência estatística das formulações da PDF do campo escalar nos referenciais euleriano e lagrangeano, de analisar o desempenho da paralelização do método de Monte Carlo e de avaliar os resultados das simulações de grandes escalas, mediante análises da estrutura do escoamento inerte e comparações com os dados experimentais.

A verificação da equivalência estatística entre as formulações baseadas nos referenciais euleriano e lagrangeano foi realizada mediante comparações do primeiro e segundo momentos estatísticos centrados de um escalar passivo inerte. Os resultados obtidos mostraram um bom acordo entre as duas abordagens, o que assegurou a adequada implementação numérica das equações de transporte e a robustez do mecanismo de troca de informações entre a malha euleriana e as partículas lagrangeanas.

Uma vez garantido o bom funcionamento do modelo, a paralelização do programa computacional no referencial lagrangeano foi realizada com base na estratégia de decomposição de domínios, já empregada no referencial euleriano. As maiores dificuldades na realização desta tarefa foram associadas aos mecanismos de envio e recebimento das informações das partículas entre os processadores, uma vez que a quantidade de dados a ser transmitida é variável ao longo das simulações, resultando na necessidade de redimensionamento dos vetores que armazenam estes dados a cada passo de tempo. A solução encontrada foi a utilização de vetores contendo mais espaço do que aquele ocupado pelo número efetivamente utilizado de partículas, o que permitiu a troca de dados, porém com uma demanda de memória computacional mais elevada. Além disto, o algoritmo desenvolvido é baseado em buscas, sobre todas as partículas, que determinam aquelas que exce-

dem as fronteiras dos subdomínios computacionais e necessitam ser transportadas para os processadores vizinhos. Acredita-se que este processo em conjunto com o envio das partículas, uma-a-uma, resulta em um grande *overhead* de comunicação. Assim, é possível que a baixa aceleração demonstrada pela técnica desenvolvida neste trabalho esteja relacionada a estes dois pontos principais citados acima, os quais seriam os primeiros candidatos a uma investigação mais aprofundada, objetivando uma otimização de desempenho.

As simulações realizadas para as análises da estrutura do escoamento inerte utilizaram duas configurações diferentes de condições de contorno de entrada, uma vez que os experimentos forneciam informações da evolução transversal das componentes da velocidade média e dos tensores de Reynolds somente para uma seção localizada 39 mm a jusante da entrada da seção de ensaios. O objetivo principal foi determinar qual delas forneceria resultados em melhor concordância com os dados medidos por Moreau (1977), em particular, em termos das propriedades da turbulência.

As condições de contorno de entrada *C1* foram baseadas em evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média, que aproximou o comportamento de uma camada de mistura, e as condições de contorno de entrada *C2* foram fornecidas por evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média típicas de escoamentos turbulentos totalmente desenvolvidos em canais. As condições de entrada turbulentas foram prescritas por flutuações aleatórias, caracterizadas por distribuições gaussianas com média nula e variância unitária.

Em ambos os casos, as análises da estrutura do escoamento inerte acusaram a existência de um amortecimento das componentes R_{11} , R_{13} e R_{33} do tensor de Reynolds na região imediatamente a jusante da entrada do domínio de cálculo. Em geral, uma distância de cerca de um quarto do canal foi necessária para a amplificação das instabilidades no escoamento e para o conseqüente desenvolvimento da turbulência na camada de mistura. Fora da região de influência da camada de mistura, os cálculos apresentaram valores mais baixos da componente R_{11} do tensor de Reynolds, quando comparados com aqueles medidos experimentalmente. Entretanto, entre as duas condições de contorno de entrada, a condição *C2* apresentou uma concordância ligeiramente melhor em termos desta componente e, por este motivo, foi escolhida para as simulações dos casos reativos.

Acredita-se que a baixa estimativa das propriedades da turbulência na região fora da influência da camada de mistura pode estar relacionada à técnica simplificada de geração de condições de contornos turbulentas utilizada neste trabalho. Recomenda-se, para trabalhos futuros, o emprego de flutuações de velocidade na entrada do domínio de cálculo que forneçam um espectro de energia turbulenta mais realista, contendo as fases corretas entre os modos de flutuação. Referências pertinentes a procedimentos desta natureza podem ser encontradas em Smirnov et al.(2001), Klein et al.(2003), Sagaut (2005) e Spode (2006).

Para trabalhos futuros, também seria interessante manter a utilização de malhas computacionais uniformes e empregar modelos de viscosidade sub-malha menos dissipativos do que o modelo de Smagorinsky. Uma vez que escoamentos com presença de camadas de mistura são caracterizados por apresentar taxas de energia cinética variáveis espacialmente, acredita-se que a utilização de modelos dinâmicos, tais como o Smagorinsky Dinâmico (Germano et al. 1991), no qual o valor da constante do modelo varia em função do tempo e do espaço, forneceria uma melhor descrição da evolução das propriedades da turbulência.

Em relação à sensibilidade dos resultados as malhas computacionais utilizadas, notou-se que os três níveis de refinamento adotados, obtidos pelo emprego de 500.000, 800.000 e 1.600.000 volumes de controle, forneceram resultados semelhantes em termos dos valores médios do campo de velocidade e temperatura e em termos do rms das flutuações de velocidade. Entretanto, a malha escolhida para as simulações dos casos reativos foi aquela contendo 1.600.000 volumes de controle, em razão da escolha das condições de contorno de entrada *C2*, nas quais a parede de 1 mm de espessura que divide a entrada de gases frescos e queimados também é representada.

Uma vez definidas a malha computacional, as respectivas condições de contorno do domínio de cálculo e o número de partículas empregado no método de Monte Carlo, as simulações dos casos reativos foram realizadas. A análise da estrutura do escoamento reativo se concentrou, primeiramente, em descrever as influências da turbulência sobre a combustão, mediante uma avaliação das propriedades das chamas, tais como as espessuras instantâneas e médias da chama turbulenta. Os efeitos da variação da riqueza da mistura, com o conseqüente aumento da velocidade de propagação das chamas, e os efeitos da interação entre os movimentos turbulentos e as reações químicas também foram investigados.

Os resultados obtidos indicam que o método LES-PDF é capaz de representar alguns dos efeitos dos movimentos turbulentos sobre as reações químicas, em particular, os processos de dobramento e estiramento das frentes de chama. Em algumas regiões, descontinuidades nas frentes de chama foram verificadas; em outras, processos de distribuição das chamas pela atividade turbulenta foram sugeridos. Os efeitos do aumento da riqueza da mistura foram representados, de modo que, a posição da chama turbulenta estabilizada, caracterizada por uma riqueza da mistura da ordem de 0,8, e a região de ancoramento na parede superior do canal, em um primeiro momento apresentaram bom acordo com os dados medidos experimentalmente por Magre et al. (1988). Os valores das espessuras instantânea e média da chama turbulenta estabilizada apresentaram boa concordância com os dados experimentais, a primeira resultando entre 5 e 10 cm e a segunda em torno de 10 cm.

Os resultados obtidos refletiram o comportamento da combustão turbulenta pré-misturada tipicamente encontrado nos regimes de chamas espessas. Isto pode estar relacionado ao fato de que o acoplamento de processos como o de convecção, dissipação e produção do campo escalar foram descritos de maneira satisfatória pelas equações de transporte da PDF, as quais, utilizadas em conjunto com LES, permitiram uma representação mais detalhada da interação entre turbulência e combustão do que aquelas normalmente fornecidas pelos métodos baseados em média de Reynolds.

Os efeitos da combustão sobre a turbulência foram evidenciados mediante uma visualização do campo médio da componente longitudinal da velocidade, o qual indicou a existência de uma aceleração do escoamento na região da frente de chama, devida à expansão volumétrica dos gases, associada às reações químicas. A visualização da distribuição da componente R_{11} do tensor de Reynolds mostrou um aumento das flutuações de velocidade na região da frente de chama. De acordo com Magre et al (1988), acredita-se que a combustão produz turbulência, principalmente, por efeitos de cisalhamento, uma vez que os gradientes transversais da componente longitudinal da velocidade média são elevados na região da chama turbulenta média. A existência de vorticidade gerada pela combustão foi sugerida, entretanto, as análises não foram conclusivas, sendo que investigações mais aprofundadas sobre este fenômeno devem ser realizadas em trabalhos futuros.

As comparações das evoluções transversais da componente longitudinal da velocidade média indicaram boa concordância dos cálculos com o experimento até a seção localizada em $x = 351\text{mm}$. A partir deste ponto, as medições apresentam evoluções mais uniformes do que os resultados calculados. Convém ressaltar que o trabalho de Moreau (1977) não informa o nível de incertezas associadas às medições experimentais.

As comparações das evoluções transversais do rms da componente longitudinal da velocidade flutuante mostraram que a combustão intensificou a flutuação da velocidade a montante da frente de chama, sendo que esta intensificação atenuou o problema de baixa estimativa da turbulência fora da região de influência da camada de mistura, evidenciado quando das simulações dos casos inertes. As influências da combustão sobre a turbulência nesta região podem estar relacionadas às flutuações da densidade, ocasionadas pela intermitência dos gases frescos e gases queimados em determinadas regiões da frente de chama, as quais resultariam em flutuações de pressão que induziriam ao aumento do movimento turbulento. Cabe ressaltar que esta argumentação apenas indica a possibilidade da ocorrência destes fenômenos, sendo que análises mais detalhadas visando comprová-los fogem do escopo deste trabalho

As comparações das PDFs da temperatura para seções transversais situadas em $x = 42$ e 122 mm , mostraram uma concordância razoável entre os resultados obtidos e os dados medidos. Em particular, comparações satisfatórias foram obtidas nas regiões de predominância de gases frescos ou de gases queimados, nas quais as PDFs apresentaram tendências monomodais. Nas regiões caracterizadas pela intermitência dos gases frescos e queimados, nas quais as PDFs experimentais são tipicamente bimodais, observou-se uma maior discrepância, de modo que os cálculos apresentaram distribuições mais uniformes. Estas discrepâncias podem estar relacionadas a diferenças de posição das chamas em relação à localização de extração dos dados. Ou seja, pequenas diferenças no ângulo de estabilização das chamas podem estar induzindo a estes resultados.

Outra possibilidade levantada para explicar as discrepâncias observadas diz respeito à escolha do modelo de micro-mistura utilizado na equação de transporte da PDF. Em trabalhos futuros, seria interessante avaliar a influência do modelo de micro-mistura mediante o uso de um modelo que levasse em consideração uma equação de transporte para a frequência de mistura turbulenta de cada partícula

estocástica. Uma escolha natural poderia ser o modelo IEM estendido, ou EIEM, utilizado por Orbegoso e Figueira da Silva, (2009). Também recomenda-se, para trabalhos futuros, a inclusão de esquemas detalhados de cinética química da combustão, tais como aqueles baseados em tabulação adaptativa *in Situ* (Pope, 1997). A inclusão deste esquema permitiria uma descrição da evolução das espécies químicas e dos radicais envolvidos na combustão, viabilizando a investigação da formação de poluentes, tais como, por exemplo, aqueles associados a radicais CO e NO (Bilger et al., 2005).