

## Menção Honrosa

Atribuímos menção honrosa a

Laura Pereira de Castro

pelo trabalho

"Utilização do método da PTF transportada para a avaliação de mistura entre componentes químicos"

apresentado na "XIX Semana da Matemática e IX Semana da Estatística" da Faculdade de Matemática - UFU.

Uberlândia, 14 de novembro de 2019.

Prof. Dr. Marcio Colombo Fenille  
Diretor da Faculdade de Matemática

Profa. Dra. Maria Imaculada de Sousa Silva  
Coordenadora da XIX SEMAT e IX SEMEST



# Utilização do método da PDF transportada para avaliação de mistura entre componentes químicos

Laura Pereira de Castro  
Universidade Federal de Uberlândia  
Faculdade de Engenharia Mecânica  
[laurapdec@ufu.br](mailto:laurapdec@ufu.br)

João Marcelo Vedovoto  
Universidade Federal de Uberlândia  
Faculdade de Engenharia Mecânica  
[vedovoto@ufu.br](mailto:vedovoto@ufu.br)

## Introdução

O método de função densidade de probabilidade ou Probability Density Function (PDF), vem sendo usado desde 1969, quando Ludgreen derivou, modelou e resolveu a equação do transporte para a PDF conjunta de velocidade. Em seguida, entre 1974 e 1976 Dopazo, O'Brien e Pope derivaram, modelaram e resolveram a equação do transporte para a PDF de composição conjunta. Esse método se baseia na análise de certos pontos do fluxo em cada instante, utilizando da estatística para estima-lo. No presente trabalho isso foi feito por meio do estudo de partículas lagrangianas.

De acordo com Vedovoto[1], há dois métodos para encontrar as funções de densidade, o primeiro é assumir que a função densidade tenha um formato particular parametrizado pelos momentos iniciais. Contudo é um método pouco preciso quando são levados em conta efeitos químicos complexos. Outro método mais eficiente é obter a PDF conjunta diretamente das suas equações de transporte, método chamado de método da PDF conjunta de composição. No presente trabalho foi escolhido o segundo método visando a oportunidade de posteriormente aplicar mais efeitos químicos.

Foi escolhido usar o modelo de fechamento proposto por Villermaux e Deville[6], conhecido como IEM (interaction by exchange with the mean) ou LMSE (linear mean-square estimation) para modelagem do transporte de escalares no espaço de composições. Esse modelo em casos de mistura moleculares se baseia na redução das flutuações escalares, o que remete à tendência instantânea dos escalares à sua média local.

Ademais, foi utilizado o software Cantera[5], para fornecer as propriedades termodinâmicas mais precisas para cada espécie química para em trabalhos futuros complementar a cinética química.

## Modelagem

É proposto como volume de controle um cubo de dimensão  $1\text{ m}^3$ , pelo qual entra  $H_2$  pela esquerda e  $O_2$  pela direita com velocidades constantes  $\vec{V}_{H_2}$  e  $\vec{V}_{O_2}$ , respectivamente. Desse modo, a cada instante de tempo a posição da partícula é atualizada pela equação 1.

$$\vec{X}^n = \vec{X}^{n-1} + \vec{V} \times \Delta t \quad (1)$$

Para análise da composição de cada partícula, foi criada a variável  $\phi$  que foi definida da equação 2, de modo que  $X_i$  é a fração mássica do elemento  $i$  e  $N_s$  é o número de espécies.

$$\phi = \{X_1, X_2, \dots, X_{N_s}\} \quad (2)$$

Utilizando o modelo de fechamento IEM-LMSE chegamos a equação 3, que ao ser discretizada pode ser escrita conforme a equação 4. Sendo  $\omega_\alpha$  a taxa de reação química, que é nula, como esse trabalho está analisando apenas a micromistura, e  $\Omega_m$  é a frequência de mistura definida na equação 5, onde  $C_\Omega$  é uma constante,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão,  $\Gamma_t$  é o coeficiente de difusão turbulento e  $\Delta_G$  é o tamanho do filtro.

$$\frac{d\phi}{dt} = -\Omega_m(\phi - \bar{\phi}) + \omega_\alpha \quad (3)$$

$$\phi^n = \phi^{n-1} + (-\Omega_m(\phi^{n-1} - \bar{\phi}^{n-1}) + \omega_\alpha) \times \Delta t \quad (4)$$

$$\Omega_m = \frac{C_\Omega(\Gamma + \Gamma_t)}{\Delta_G^2} \quad (5)$$

Para a realização dessa simulação foram utilizados o  $C_\Omega$  como 2, o valor geralmente utilizado conforme Haworth [3], o valor de  $\Gamma$  e  $\Gamma_t$  utilizados foram baseados na equação 6, sendo  $\nu$  a viscosidade cinemática e  $Sc$  o número de Schmidt, enquanto o passo de tempo, a velocidade e o  $\Delta_G$  foram definidos de modo empírico.

$$\Gamma = \nu / Sc \quad (6)$$

A partir da equação 4, das condições iniciais e dos parâmetros de simulação explicitados na tabela 1 é possível desenvolver um programa computacional conforme mostrado na figura 1.

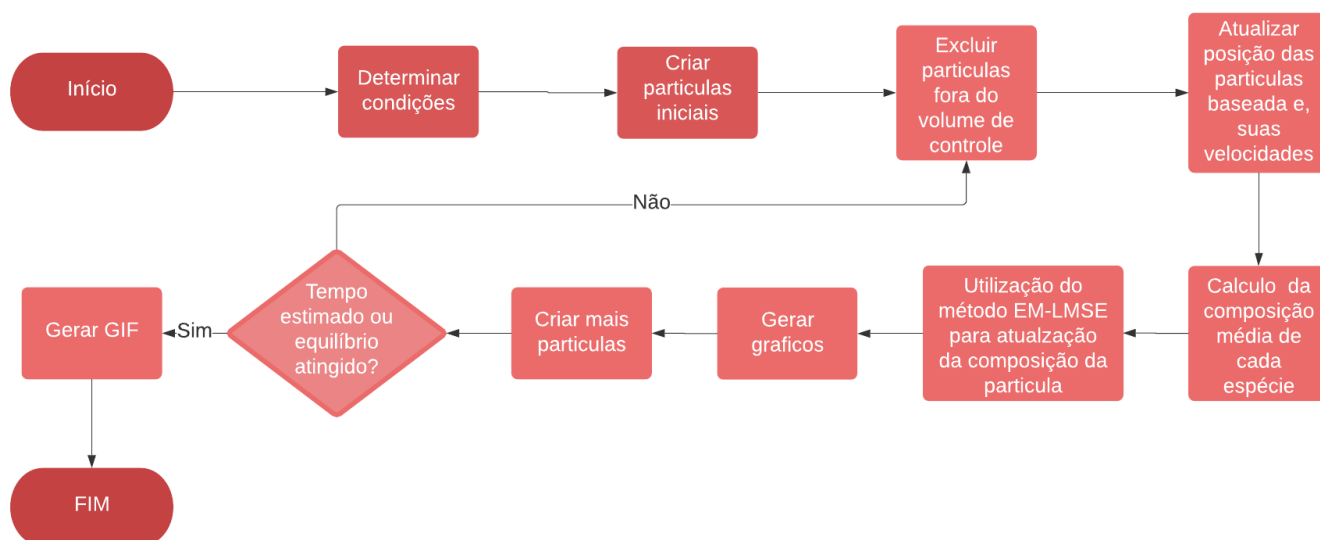


Figura 1: Fluxograma

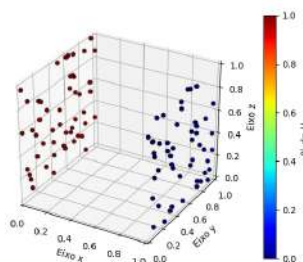
Parâmetro	Valor
$\Delta t$	0.1 s
$\vec{V}_{H_2}$	(0, 0, 0.01) m/s
$\vec{V}_{O_2}$	(0, 0, -0.01) m/s
$C_\Omega$	2
$\Delta_G$	0.1
$\Gamma$	0.001
$\Gamma_t$	0.001

Tabela 1: Parâmetros

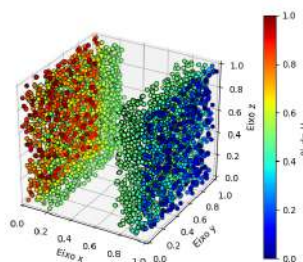
## Resultados e Conclusões

É possível visualizar o volume de controle em função da composição de  $H_2$  nas figuras 2, 3 e 4 nos instantes  $t=0$  s,  $t=25$  s e  $t=50$  s, respectivamente. Contudo, para uma análise quantitativa também foi analisada a distribuição da composição pelo tempo (PDF) nas figuras 5, 6 e 7 nos instantes  $t=0$  s,  $t=25$  s e  $t=50$  s, respectivamente. Portanto,

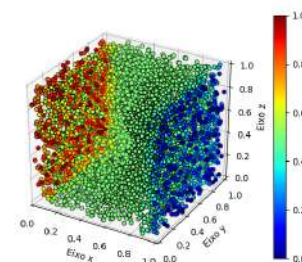
pode-se perceber que conforme esperado, com o variar do tempo a composição média tanto do  $O_2$  quanto do  $H_2$  tendem a média.



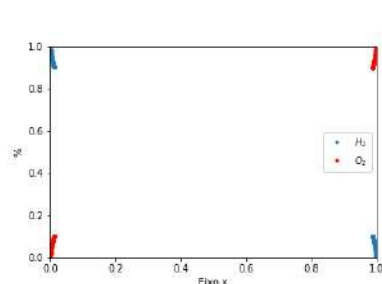
**Figura 2:** Visualização 3D em t=0 s



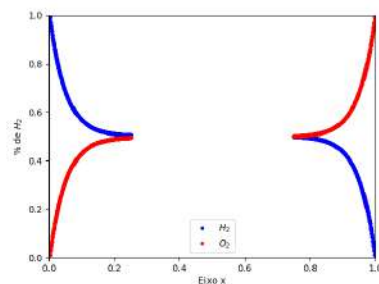
**Figura 3:** Visualização 3D em t=25 s



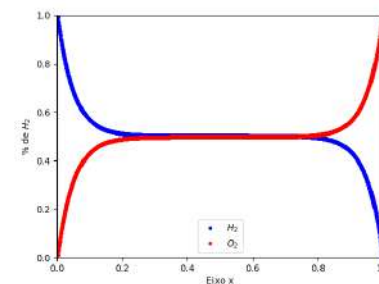
**Figura 4:** Visualização 3D em t=50 s



**Figura 5:** Composição em t=0 s

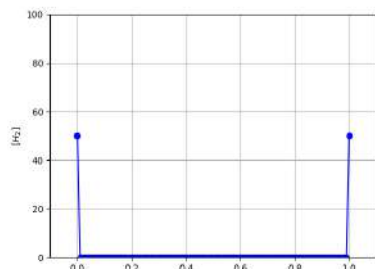


**Figura 6:** Composição em t=25 s

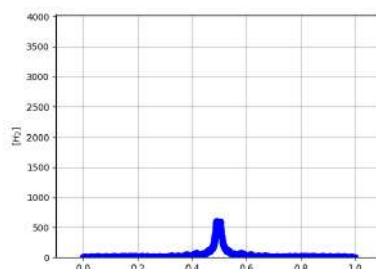


**Figura 7:** Composição em t=50 s

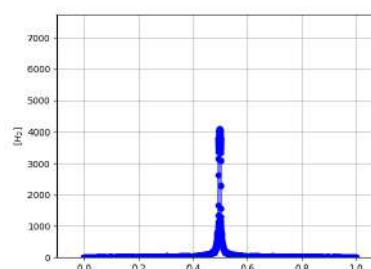
Por fim, é possível analisar a função distribuição acumulada nas figuras 8, 9 e 10 e a função densidade real do problema nas figuras 11, 12 e 13.



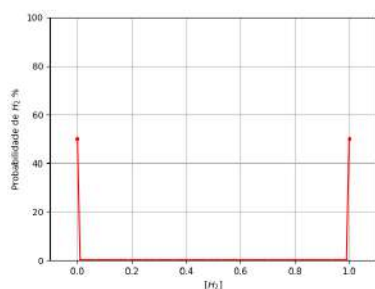
**Figura 8:** Função CDF em t=0 s



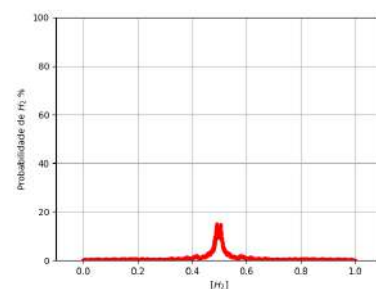
**Figura 9:** Função CDF em t=25 s



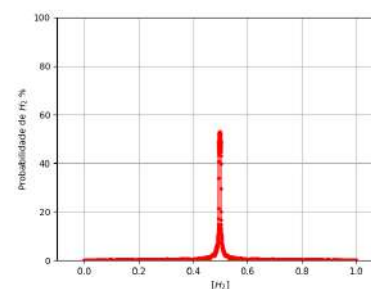
**Figura 10:** Função CDF em t=50 s



**Figura 11:** Função PDF em t=0 s



**Figura 12:** Função PDF em t=25 s



**Figura 13:** Função PDF em t=50 s

## Referências

- [1] João Marcelo Vedovoto, *Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using hybrid LES / PDF methodology*, tese de doutorado, UFU-FEMEC, 2011.
- [2] Stephen B. Pope, *PDF methods for turbulent reactive flows*, Progress in Energy and Combustion Science, 1985.
- [3] Daniel C. Haworth, *Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows*, Progress in Energy and Combustion Science, 2010.
- [4] Paul J. Colucci, Farhad A. Jaber, Peyman Givi e Stephen B. Pope, *Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows*, Physics of Fluids, 1998.
- [5] David G. Goodwin and Raymond L. Speth, Harry K. Moffat e Bryan W. Weber, *Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes*, Version 2.4.0, 2018, <https://www.cantera.org> acessado: 28/09/2019.
- [6] Emmanuel Villermaux e J. C. Devillon, *Representation de la coalescence et de la redispersion des domaines de segregation dans un fluide par un modele d'interaction phenomenologique*, Second International Symposium on Chemical Reaction Engineering, 1972.