



**Elder Marino Mendoza Orbegoso**

**Estudo de Modelos de Mistura Estocásticos  
para a Combustão em Escoamentos  
Turbulentos**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Termociências do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio

Orientador: Prof. Luís Fernando Figueira da Silva

Rio de Janeiro  
Setembro de 2007

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



**Elder Marino Mendoza Orbegoso**

**Estudo de Modelos de Mistura Estocásticos  
para a Combustão em Escoamentos  
Turbulentos**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Termociências do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Prof. Luís Fernando Figueira da Silva**

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

**Prof. Fernando de Souza Costa**

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais — INPE

**Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes**

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

**Prof. Angela Ourivio Nieckele**

Departamento de Engenharia Mecânica — PUC-Rio

**Prof. Jose Eugenio Leal**

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico — PUC-Rio

Rio de Janeiro, 14 de Setembro de 2007

Todos os direitos reservados. proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

### **Elder Marino Mendoza Orbegoso**

Graduou-se em Engenharia Mecânica na Universidad Nacional de Trujillo - Peru, trabalhou em empresas de fabricação de estruturas metal-mecânicas e em usina de produção agro-industrial.

#### Ficha Catalográfica

Mendoza Orbegoso, Elder Marino

Estudo de Modelos de Mistura Estocásticos para a Combustão em Escoamentos Turbulentos / Elder Marino Mendoza Orbegoso; orientador: Luís Fernando Figueira da Silva. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Engenharia Mecânica, 2007.

v., 138 f: il. ; 30 cm

1. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Reator Parcialmente Agitado. 3. Função Densidade de Probabilidade. 4. Equação Diferencial Estocástica. 5. Técnica Monte-Carlo. I. Figueira da Silva, Luís Fernando. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. III. Título.

CDD: 621

A Deus, a meus avós Marino e Floriza, e a meus tios Mever e Maritza.

## Agradecimentos

A meu orientador o Professor Luis Fernando pelo apoio, simpatia de sempre, e incentivo para a realização deste trabalho.

Ao Governo Federal do Brasil, à CAPES e à PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

À minha mãe Miriam Ofelia, mulher trabalhadora e corajosa, obrigado pelo seus conselhos, suporte moral e espiritual nos momentos mais transcendentais da minha existência.

À minha nova família Maica Carolin e Andy Samuel; obrigado pelo amor infinito e pela muita paciência que tiveram todo este tempo longe.

A todas as pessoas que ajudaram diretamente em minha estadia no Rio de Janeiro, em especial, a meu companheiro de graduação e pós-graduação David Maldonado Távora, por suas orientações valiosas e sua amizade, a meus professores na graduação, Javier León Lescano e Vilma Mendez Gil, pela ajuda desinteressada.

## Resumo

Mendoza Orbegoso, Elder Marino; Figueira da Silva, Luís Fernando. **Estudo de Modelos de Mistura Estocásticos para a Combustão em Escoamentos Turbulentos**. Rio de Janeiro, 2007. 138p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O presente trabalho tem como finalidade avaliar os diferentes modelos de mistura para o cálculo da combustão de reagentes pré-misturados utilizando a abordagem de Reator Parcialmente Misturado (PaSR). Os modelos de mistura considerados neste trabalho foram os modelos IEM estendido, Langevin e Langevin estendido. Investiga-se aqui o grau de mistura previsto por tais modelos e sua influência sobre as propriedades termoquímicas em um processo de combustão.

A primeira parte deste trabalho consiste na apresentação e avaliação destes modelos de mistura, considerando-se um campo escalar inerte em presença de um campo turbulento homogêneo e isotrópico. Uma vez que estes modelos de mistura envolvem formulações do tipo estocástico, sua implementação foi realizada utilizando o método de Monte Carlo, mediante a utilização de esquemas numéricos adequados à resolução de equações diferenciais estocásticas. Assim, estuda-se a evolução da Função Densidade de Probabilidade (PDF) e das principais propriedades do campo escalar para cada modelo implementado. Os resultados obtidos também são comparados com simulação numérica direta e com resultados analíticos disponíveis. Um ótimo acordo em termos qualitativos e quantitativos é obtido.

A segunda parte deste trabalho utiliza estes modelos para o estudo numérico de um PaSR no qual são modelados os processos difusivos e reativos presentes durante a combustão. O PaSR é usado para avaliar a influência dos modelos de mistura nas propriedades termoquímicas da mistura em uma situação de combustão de tipo pré-misturada, que é modelada utilizando-se uma variável de progresso de uma reação. Os resultados obtidos com os diferentes modelos de mistura são comparados para diferentes regimes de funcionamento do PaSR, mostrando que, em situações de mistura rápida e reação intensa, os diferentes modelos apresentam resultados similares. Porém, nos casos de mistura lenta e reação moderada, discrepâncias importantes são observadas entre os resultados dos modelos; as quais atingem até 65% para o valor médio da variável de progresso da reação.

### Palavras-chave

Reator Parcialmente Agitado. Função Densidade de Probabilidade. Equação Diferencial Estocástica. Técnica Monte-Carlo.

## Abstract

Mendoza Orbegoso, Elder Marino; Figueira da Silva, Luís Fernando. **Study of stochastic mixing models for combustion in turbulent flows**. Rio de Janeiro, 2007. 138p. MSc Thesis — Department of Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The present work evaluates several mixing models for the prediction of premixed combustion in a Partially Stirred Reactor (PaSR). The models considered in this work were the extended IEM, Langevin and extended Langevin models. The degree of mixing and its influence on the thermochemical properties in a combustion process are investigated here.

The first part of this work consists on the presentation and the assessment of these mixing models in which a single scalar field was considered in presence of a homogeneous and isotropic turbulent field. Since these mixing models involve stochastic terms, their implementation is performed by the Monte Carlo method using numerical schemes which solve the corresponding Stochastic Differential Equations (SDE). The evolution of the Probability Density Function (PDF) and the main properties for a single scalar field are studied for each mixing model. The numerical results are compared with Direct Numerical Simulation and available analytical results. Excellent qualitative and quantitative agreements are obtained.

In the second part of this work, mixing models are used for numerical simulation of a PaSR where the diffusive and reactive processes occur. The PaSR is used to assess the mixing model influence on the thermochemical properties of the mixture in a premixed combustion process, which is modeled using a reaction progress variable. The results obtained with the different mixing models are compared in several operating regimes of the PaSR, showing that when mixing is fast and reaction is intense, the different models lead to similar results. However, when mixing is slow and reaction is weak, important discrepancies are observed between the model results, which reach 65%, as far as the averaged reaction progress variable is concerned.

## Keywords

Partially Stirred Reactor. Probability Density Function. Stochastic Differential Equation. Monte-Carlo Technique.

# Sumário

1	Introdução	<b>22</b>
1.1	Motivação	22
1.2	O Problema	24
1.3	Objetivo	26
1.4	Organização do trabalho	26
2	Revisão Bibliográfica	<b>28</b>
2.1	Perspectiva Histórica no Desenvolvimento de Modelos de Mistura para Combustão	28
2.2	Métodos Numéricos para a Resolução de Equações Diferenciais Estocásticas	32
3	A Função de Densidade de Probabilidade na Descrição do Reator Parcialmente Agitado	<b>37</b>
3.1	Considerações Gerais	37
3.2	Equações de Transporte de um Escoamento Turbulento Reativo	38
3.3	Função Densidade de Probabilidade Conjunta	41
3.4	Função Densidade de Probabilidade do Campo Escalar	43
3.5	Modelo Matemático de Reator de Fluxo Contínuo	45
4	Modelagem Matemática do Processo de Mistura	<b>48</b>
4.1	Modelagem da Mistura Escalar Inerte	48
4.2	Propriedades Desejáveis dos Modelos de Mistura	49
4.3	Caracterização e Evolução da PDF de um Campo Escalar Inerte	53
4.4	Modelos de Mistura Clássicos	56
4.5	Modelos de Mistura Recentes	60
4.6	O Reator Parcialmente Agitado	65
4.7	Solução Numérica do PaSR: a Técnica de Monte-Carlo	73
4.8	Métodos Numéricos que Resolvem as Equações Diferenciais Estocásticas	74
5	Resultados e Discussões	<b>78</b>
5.1	Simulação de um Caso Inerte	78
5.2	Simulação do PaSR	96
6	Conclusões e Recomendações	<b>116</b>
	Referências Bibliográficas	<b>119</b>
A	Derivação da Equações de Transporte da PDF	<b>125</b>
A.1	Equações de Transporte	125
A.2	Equação de Transporte da PDF	129
B	Resultados Adicionais	<b>134</b>

## Lista de figuras

- 1.1 *Esquema de um Reator Parcialmente Misturado (PaSR).* 24
- 3.1 *Representação esquemática de um reator de fluxo contínuo, onde  $\dot{m}$  é a vazão mássica dos reagentes que entram no equipamento. Os reagentes são compostos por  $K$  espécies químicas cujas frações mássicas na entrada e na saída são  $Y_k^e$  e  $Y_k^s$  respectivamente.* 45
- 4.1 *PDF inicial do campo escalar  $\phi$  como uma distribuição Beta para  $\langle\phi\rangle = 0,5$  e  $\sigma^2 = 0,2$ .* 55
- 4.2 *Ilustração do tempo de funcionamento do modelo de mistura de Coalescência e Redispersão (CD) ou modelo de Curl.* 58
- 4.3 *Taxa de produção adimensional  $\dot{S}(c)$  em função da variável de progresso da reação,  $c$ , para diferentes valores de energia de ativação reduzida,  $\beta$ , e calor de reação reduzido,  $\alpha$ .* 69
- 4.4 *Média (a) e Desvio padrão (b) da variável de progresso de uma reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para diferentes valores de  $\mathcal{X}$ , resultados obtidos mediante a solução semi-analítica e estacionária de PaSR utilizando o modelo de mistura IEM para valores de  $\alpha = 0.8$  e  $\beta = 15$  (Sabel`nikov e Figueira da Silva, 2002).* 71
- 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.* 79
- 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.* 80
- 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.* 81
- 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.* 82
- 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.* 83

- 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.* 85
- 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  $\langle \omega \rangle = 100$  Hz.; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.* 86
- 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.* 88
- 5.9 *Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura de Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para  $d_o = 1,0$  e  $\langle \omega \rangle = 100$  Hz.; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição Beta.* 89
- 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.* 90
- 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.* 91
- 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.* 92
- 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.* 93
- 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  $\sigma_0^2 = 0,15$ .* 94
- 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  $\sigma_0^2 = 0,15$ .* 95
- 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).* 95

- 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. 96
- 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. 98
- 5.19 Comparação entre a PDFs teóricas para o modelo IEM (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de  $c$  para  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  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. 99
- 5.20 Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  e para os modelos de mistura IEM e EIEM. (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão intensa. 100
- 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  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão intensa. 101
- 5.22 Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  para o modelo de mistura de Langevin estendido (ELM) e para diferentes valores de  $d_0$ . (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão intensa. 102
- 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. 103
- 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. 105
- 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 EIEM. (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão moderada. 106
- 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  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão moderada. 107
- 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  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão moderada. 108

- 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 ( $\mathcal{X} = 0,5$ ).* 110
- 5.29 *Comparação da Média (a) e (c); e Desvio padrão (b) e (d); da variável de progresso da reação c calculados pelos modelos EIEM e ELM com  $d_0 = 0,4$  e  $1$ , como função de  $\mathcal{Y}$  e para mistura rápida ( $\mathcal{Z} = 2$ ) e lenta ( $\mathcal{Z} = 0,5$ ).* 111
- 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 ( $\mathcal{X} = 0,5$ ).* 115
- B.1 *Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo IEM. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$ ; (ii)  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,080$ .* 135
- B.2 *Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo LM para  $d_0 = 0,4$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,035$ ; (ii)  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,030$ .* 135
- B.3 *Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo LM para  $d_0 = 1$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$ ; (ii)  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$ .* 136
- B.4 *Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo EIEM. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,035$ ; (ii)  $\mathcal{Z} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,080$ .* 137
- B.5 *Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo ELM para  $d_0 = 0,4$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$ ; (ii)  $\mathcal{Z} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$ .* 137
- B.6 *Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo ELM para  $d_0 = 1$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,060$ ; (ii)  $\mathcal{Z} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,060$ .* 138

## Lista de tabelas

- 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,  $\mathcal{X} = 2$ .* 113
- 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,  $\mathcal{X} = 0,5$ .* 113
- 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,  $\mathcal{Z} = 2$ .* 114
- 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,  $\mathcal{Z} = 0,5$ .* 114

## Nomenclatura

### Caracteres Latinos

$a$	Parâmetro determinístico dos modelos de mistura.
$A_m$	Constante pré-exponencial da $m$ -ésima reação.
$A^e, A^s$	Área da seção transversal à vazão de entrada/saída do reator.
$A(\alpha)$	PDF fornecida a partir da variável aleatória $\alpha$ .
$A[\phi(t), t]$	Coefficiente de deriva de uma SDE.
$\langle A_j   \Psi \rangle$	Fluxo condicionado de aceleração.
$b$	Parâmetro estocástico dos modelos de mistura.
$B$	Constante determinística do modelo de Langevin (Pope 1985).
$B(\alpha, \beta)$	Função Beta.
$B[\phi(t), t]$	Coefficiente de difusão de uma SDE.
$c$	Variável de progresso de uma reação.
$c_p$	Calor específico médio a pressão constante ( $J/kg$ ).
$C$	Símbolo do combustível.
$C_\phi$	Constante empírica referente ao modelo IEM.
$C_\chi$	Constante equivalente à inversa de $T_\chi$ igual a 1, 6.
$\langle C_k   \Psi \rangle$	Fluxo condicionado de difusão/produção das frações mássicas.
$\langle C_h   \Psi \rangle$	Fluxo condicionado de difusão/produção da entalpia.
$d_0$	Constante que controla intensidade de $\langle \varepsilon_\phi \rangle$ .
$Da$	Número de Damköhler.
$D_k$	Coefficiente de difusão molecular da $k$ -ésima espécie.
$E$	Energia de ativação.
$F_i$	Força aplicada sobre o corpo na $i$ -ésima direção.
$\mathcal{F}_{\alpha j}$	Fluxo difusivo do $\alpha$ -ésimo escalar $\phi_\alpha$ .
$g_i$	Aceleração gravitacional na $i$ -ésima direção.
$G$	Constante estocástica do modelo de Langevin (Pope 1985).

$h$	Tamanho de passo do tempo ( $s$ ).
$h_k$	Entalpia específica da $k$ -ésima espécie ( $J/kg$ ).
$h(\mathbf{x}, t)$	Campo instantâneo da entalpia estática.
$h_t(\mathbf{x}, t)$	Campo instantâneo da entalpia total.
$H$	Variável do espaço amostral correspondente a $h$ .
$J_{kj}$	Fluxo difusivo das frações mássicas.
$\mathbf{J}$	Vetor que representa o fluxo difusivo.
$\mathcal{J}_j$	Fluxo difusivo da entalpia.
$k$	Energia cinética turbulenta.
$k_\phi$	Intensidade das flutuações do campo escalar.
$k_m^f, k_m^r$	Taxas de reação direta e inversa da $m$ -ésima reação.
$K$	Número de espécies químicas.
$K_p$	Constante de equilíbrio químico.
$K_s, K_w$	Constantes ref. aos critérios de convergência forte e fraca.
$Le_k$	Número de Lewis da $k$ -ésima espécie.
$\mathcal{L}$	Escala de comprimento característico do escoamento.
$\dot{m}$	Vazão mássica ( $kg/s$ ).
$m_1, m_2$	Média e variância de $\chi$ .
$M$	Número de reações químicas elementares.
$\mathcal{M}_a$	Número de Mach.
$\mathcal{M}_k$	Símbolo químico da espécie $k$ .
$N$	Número de sub-intervalos.
$N_p$	Número de partículas aleatórias.
$N_e$	Número de pares de partículas escolhidas e substituídas.
$N_{sub}$	Número de partículas escolhidas e substituídas.
$N(\mu, \sigma^2)$	Variável aleatória normalmente distribuída.
$O$	Símbolo do oxidante.
$p(\mathbf{x}, t)$	Campo instantâneo de pressão.
$p'(\mathbf{x}, t)$	Campo das flutuações de pressão.

$P_\phi(\psi, t)$	PDF de um campo escalar inerte homogéneo $\phi(t)$ .
$P_c(\theta; t)$	PDF de um campo escalar reativo homogéneo $c(t)$ .
$P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)$	PDF conjunta de $c(t)$ e $\chi(t)$ .
$P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t)$	PDF conjunta do escalar $\phi(\mathbf{x}, t)$ .
$P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)$	PDF conjunta do campo vetorial $\Psi(\mathbf{x}, t)$ .
$Pr$	Número de Prandtl.
$q_m$	Velocidade da $k$ -ésima reação.
$Q(\phi)$	Função qualquer de $\phi$ .
$r$	relação mássica oxidante/combustível.
$r_0(t)$	Parâmetro positivo dependente do tempo.
$R_i$	taxa de variação por unidade de volume de $\Phi$ .
$Re$	Número de Reynolds.
$Re_\lambda$	Número de Reynolds na escala de Taylor.
$S_k$	Termo fonte da $k$ -ésima componente de $Y$ .
$S_h$	Termo fonte da entalpia total $h_t$ .
$S_\alpha$	Termo fonte da $\alpha$ -ésima componente de $\phi$ .
$S_4$	Curtose.
$S_6$	Hiper-curtose.
$\dot{S}$	Taxa de produção química adimensional.
$Sc_k$	Número de Schmidt da $k$ -ésima espécie.
$\mathbf{S}$	Vetor que representa o termo de produção.
$s, t, u, v$	Variáveis correspondentes ao tempo ( $s$ ).
$t^*$	Variável correspondentes ao tempo adimensional.
$t_0$	Tempo inicial ( $s$ ).
$T$	Tempo final ( $s$ ), Temperatura ( $K$ ).
$T_0$	Temperatura de entrada ao reator ( $K$ ).
$T_{ad}$	Temperatura de combustão adiabática ( $K$ ).
$T_\chi$	Escala de tempo integral de $\chi$ .

$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$	Campo vetorial das flutuações de velocidade ( $m/s$ ).
$u_i$	$i$ -ésima componente da flutuações de velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ .
$\langle u_i u_j \rangle$	Tensões de Reynolds.
$\langle u_i \phi'_\alpha \rangle$	Fluxos escalares.
$\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$	Campo vetorial da velocidade instantânea ( $m/s$ ).
$\langle \mathbf{U} \rangle$	Velocidade média ( $m/s$ ).
$U_i$	$i$ -ésima componente do campo de velocidade $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ .
$\mathcal{U}$	Escala de velocidade característica do escoamento.
$\mathbf{V}$	Variável do espaço amostral correspondente a $\mathbf{U}$ .
$\forall$	Volume do reator ( $m^3$ ).
$\dot{V}$	Vazão volumétrica ( $m^3/s$ ).
$\mathbf{x}$	Vetor posição ( $m$ ).
$x_i$	$i$ -ésima componente do vetor posição $\mathbf{x}$ .
$X_k$	Fração molar da $k$ -ésima espécie.
$X_C _o, X_O _o$	Frações molares de comb. e ox. na entrada do reator.
$[X_k]$	Concentração molar da $k$ -ésima espécie.
$\mathcal{X}$	Razão entre o tempo de residência e o tempo de mistura.
$Y_k$	Fração mássica da $k$ -ésima espécie.
$Y(\mathbf{x}, t)$	Campo vetorial correspondente às frações mássicas.
$\mathcal{Y}$	Razão entre o tempo de residência e o tempo químico.
$\mathcal{Y}'_1, \mathcal{Y}'_2$	Limites do PSR correspondentes à ignição e à extinção.
$W_k$	Massa molar da $k$ -ésima espécie.
$\bar{W}$	Massa molar média.
$W(s), W(t)$	Processos de Wiener padrão.
$z$	Variável estocástica da freq. turbulenta adimensional.
$\mathcal{Z}$	Razão entre o tempo de residência e o tempo turbulento.

## Caracteres Gregos

$\alpha$	Calor de reação reduzido, Variável aleatória.
$\alpha, \beta$	Parâmetros relacionados à função Beta.
$\beta$	Energia de activação reduzida.
$\beta_m$	Expoente da temperatura da $m$ -ésima reação.
$\gamma_s, \gamma_w$	Ordem de convergência forte e fraca respectivamente.
$\Gamma_\alpha$	Coefficiente difusivo da $\alpha$ -ésima componente de $\phi$ .
$\Gamma$	Variável do espaço amostral correspondente a $Y$ .
$\delta(x)$	Função delta de Dirac.
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker.
$\varepsilon$	Pseudo-dissipação da energia cinética turbulenta.
$\varepsilon_T$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.
$\varepsilon_\phi$	Taxa de dissipação do campo escalar.
$\langle \varepsilon_\phi \rangle$	Taxa de dissipação do campo escalar média.
$\lambda$	Condutividade térmica.
$\mu$	Média o expectância, viscosidade dinâmica.
$\phi(\mathbf{x}; t)$	Campo escalar passivo.
$\phi'(\mathbf{x}; t)$	Flutuação do campo escalar passivo.
$\phi_\alpha$	$\alpha$ -ésima componente do vetor do escalar $\phi$ .
$\langle \phi_\alpha \rangle$	Média do $\alpha$ -ésimo escalar, $\phi_\alpha$ .
$\langle \phi'^2 \rangle$	Variância do campo escalar, $\phi$ .
$\langle \phi'_\alpha \phi'_\beta \rangle$	Covariâncias de segunda ordem.
$\langle \phi   \omega_\phi \rangle$	Média do escalar condicionada à freq. turbulenta do escalar.
$\phi(\mathbf{x}; t)$	Vetor representativo a campos escalares.
$\varphi$	Variável do espaço amostral correspondente a $\chi$ .
$\Phi(\mathbf{x}, t)$	Campo vetorial generalizado.
$\psi$	Variável do espaço amostral correspondente a $\phi$ .
$\psi$	Variável do espaço amostral correspondente a $\phi$ .
$\Psi$	Variável do espaço amostral correspondente a $\Phi$ .

$\nu$	Viscosidade cinemática ( $m^2/s$ ).
$\nu, \nu', \nu''$	Coefficientes estequiométricos.
$\rho$	Densidade ou massa específica ( $m^3/s$ ).
$\sigma$	Desvio padrão.
$\sigma^2$	Variância.
$\sigma_M^2$	Variância máxima.
$\sigma_{\omega\phi}$	Variância condicionada à frequência de mistura.
$\sigma_{M*}^2$	Variância máxima cond. à frequência de mistura.
$\chi(t)$	Variável aleatória normalmente distribuída.
$\tau_c$	Escala de tempo característico da reação química ( $s$ ).
$\tau_m$	Escala de tempo característico do escalar ou da mistura ( $s$ ).
$\tau_t$	Escala de tempo característico da turbulência ( $s$ ).
$\tau_r$	Tempo de residência ( $s$ ).
$\tau_{ij}$	Tensor de tensões.
$\omega$	Frequência instantânea da turbulência ( $s^{-1}$ ).
$\omega_\phi$	Frequência instantânea da mistura ( $s^{-1}$ ).
$\langle \omega \rangle$	Frequência média da turbulência ( $s^{-1}$ ).
$\langle \omega_\phi \rangle$	Frequência média da mistura ( $s^{-1}$ ).
$\Omega(t)$	Parâmetro que controla a queda das flutuações.
$\theta$	Variável do espaço amostral correspondente a $c$ .

#### Símbologia

$\Delta$	Intervalo.
$f(\phi)$	Função de $\phi$ .
$\partial$	Derivada parcial.
$E \phi $	Valor médio de $\phi$ .
$\nabla^2$	Operador Laplaciano.
$\langle \phi \rangle$	Média ou expectância de $\phi$ .
$\Sigma$	Somatória.
$\Pi$	Produtório.

## Abreviações

CD	Coalescência e Dispersão.
DNS	Simulação Numérica Direta.
EDO	Equação Diferencial Ordinária.
SDE	Equação Diferencial Estocástica.
EIEM	Modelo Interação de Troca com a Média Estendido.
ELM	Modelo de Langevin Estendido.
IEM	Modelo de Interação de Troca com a Média.
FP	Fokker-Planck.
LM	Modelo de Langevin.
MC	Modelo de Curl ou de Coalescência-Redispersão.
MCM	Modelo de Curl Modificado.
MCMM	Modelo de Modo de Fechamento por Mapeamento.
PaSR	Reator Parcialmente Agitado.
PDF	Função Densidade de Probabilidade.
PFR	Reator Tipo Pistão.
PSR	Reator Perfeitamente Agitado.
RANS	Média de Reynolds na equação de Navier-Stokes.

*Ya lo ves, hijo, el trabajo y el esfuerzo son indispensables. Esfuérzate, aprovecha todos los instantes de tu vida y verás como ésta te sera dócil y sumisa. Concentra todas tus energías en una sola cosa. No trates de abarcar más de lo que puedas dentro de tus posibilidades o de tu capacidad. Sé incansable y no te dejes arrastrar por inútiles vacilaciones. A veces vale más la tenacidad que el genio, la perseverancia que la capacidad, por que en tanto que el genio y la inteligencia pueden vacilar en la lucha, cansarse y abandonar el terreno, la tenacidad prosigue poco a poco, pero con seguridad, hasta que llega a la meta deseada.*

*No confíes en el día de mañana. Lo que debes hacer, hazlo hoy, Mañana traerá sus problemas, sus afanes y sus preocupaciones. Cumple diariamente tus deberes. Lucha cada día como si fuera el último que fueras a vivir, como si fuera tu última oportunidad de llegar al fin que te propones. Si así obras desde tu juventud, desde ahora, hijo mio estarás echándole los cimientos de tu felicidad en esta tierra y en la venidera. Dijo Bruyère: “La mayoría de los hombres emplean la primera parte de su vida en hacer miserable el resto de ella”. Cuídate de ese peligro. Aléjate de todo aquello que pudiera dejar en ti un motivo de remordimiento. Recuerda que estás frente a la vida. No temas en afrontarla con entereza, con virilidad. Deja que soplen los vientos, quemén los soles y mojen las lluvias. Todo esto te enseña a ser fuerte. Purificará tu cuerpo y tu alma y te habilitará para triunfar.*

**Braulio Pérez Marcio, Cartas a mi hijo.**

# 1 Introdução

## 1.1 Motivação

Os escoamentos turbulentos reativos são encontrados em diversos processos cujas consequências econômicas são importantes. No âmbito da engenharia mecânica, os principais focos de interesses são a predição da eficiência, da transferência de calor e da formação de poluentes em motores de combustão interna, fornos e caldeiras. Estes problemas são de difícil resolução pois as reações químicas envolvidas no processo de combustão são funções não lineares das propriedades termoquímicas da mistura. (Bilger *et al.*, 2005).

Dentre os desafios recentes no estudo de escoamentos turbulentos reativos, um dos principais é o desenvolvimento de modelos computacionais que descrevam adequadamente as interações existentes entre combustão, turbulência e a mistura dos reagentes. Um dos motivadores deste desafio é a crescente preocupação com o impacto dos processos de combustão no meio ambiente. Em particular, a combustão incompleta de hidrocarbonetos nos motores de combustão interna é a maior responsável pela poluição do ar (Chang, 1995).

Dada a complexidade deste objeto de estudo, nos últimos 50 anos modelos matemáticos e numéricos para escoamentos turbulentos reativos foram formulados (Bilger *et al.*, 2005). Um dos objetivos principais destes modelos são descrever o comportamento de sistemas práticos, permitindo assim estabelecer seus principais parâmetros de controle.

Uma das aplicações práticas que envolve a combustão em escoamento turbulento é a análise e o projeto de câmaras de combustão de turbinas a gás. Dentre os requerimentos imprescindíveis no projeto destas câmaras de combustão encontram-se o aumento da eficiência da combustão e a redução das emissões de monóxido de carbono e outras espécies químicas poluentes. Um dos problemas abertos, no que diz respeito a estes dispositivos, é a influência do grau de mistura entre reagentes e produtos de combustão sobre os processos de combustão e, em particular, sobre a formação destes poluentes.

Até recentemente, a influência deste processo de mistura sobre a com-

bustão era pouco estudada. Esta é a razão pela qual a abordagem do Reator Perfeitamente Agitado (*Perfectly Stirred Reactor, PSR*) era utilizada para descrever a evolução termoquímica de processos de combustão na fase de projeto de sistemas (Chen, 1997).

Este tipo de reator modelo consiste de uma câmara de combustão de funcionamento contínuo, na qual combustível e oxidante são introduzidos de tal forma que, por hipótese, mistura turbulenta de alta intensidade, ocorre entre reagentes e produtos de combustão. Isto acarreta uma mistura imediata entre os reagentes que entram no reator e os produtos de combustão lá existentes. Como conseqüência desta hipótese, a velocidade do processo de conversão entre reagentes e produtos é controlada somente pelo equilíbrio entre o tempo característico da cinética da reação química e o tempo de residência dos gases no reator. Este tempo de residência é definido como o valor médio do tempo de permanência dos reagentes no interior do PSR.

No entanto, a hipótese de mistura turbulenta rápida quando comparada à reação química não é necessariamente verificada em muitas aplicações práticas, tais como os motores de combustão interna e as turbinas a gás. Nestes casos, o grau de mistura pode exercer uma forte influência sobre as propriedades termoquímicas na saída do reator.

Para superar a limitação intrínseca do modelo PSR, que considera uma mistura perfeita e instantânea no interior do reator durante o processo de combustão, o modelo de Reator Parcialmente Agitado (*Partially Stirred Reactor, PaSR*) foi desenvolvido. Este modelo é capaz de levar em conta o tempo de micro-mistura entre reagentes e gases queimados, isto é, a presença de flutuações das propriedades termodinâmicas durante o processo de combustão, as quais podem acarretar uma maior taxa de formação de poluentes (Chen, 1997).

A competição existente entre os tempos característicos de residência, de mistura e do processo químico determina o estado termodinâmico dos gases no interior do PaSR. Como será visto a seguir, a influência do modelo de mistura para um Reator Parcialmente Agitado (PaSR) e de seu acoplamento com os modelos detalhados da cinética química da combustão sobre a formação de espécies poluentes é um problema aberto, uma vez que modelos capazes de descrever o processo de mistura ainda se encontram em fase de desenvolvimento.

Até recentemente, os modelos desenvolvidos para descrever o fenômeno de mistura ignoraram os efeitos difusivos devido, principalmente, à dificuldade na sua incorporação. A ausência de métodos de discretização numérica adequados e a indisponibilidade de computadores suficientemente rápidos foram

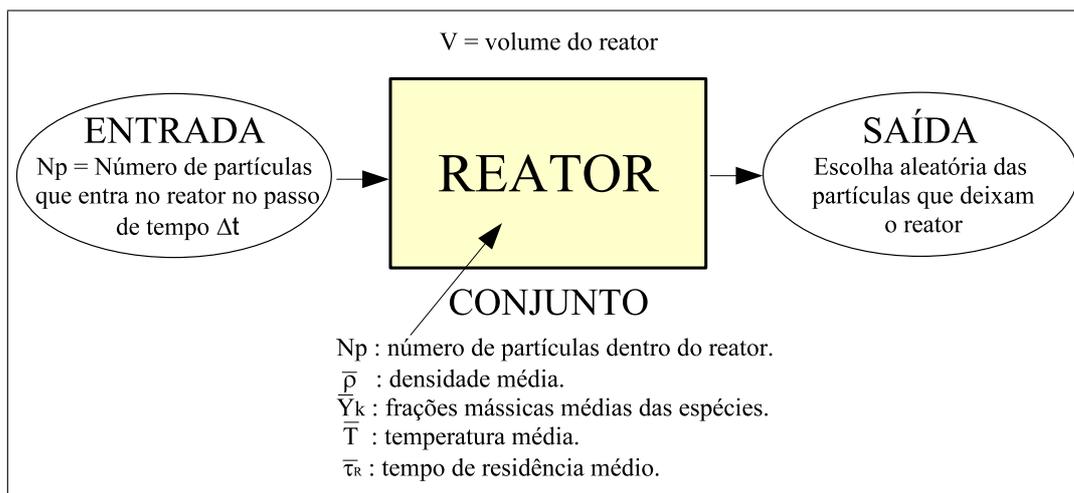


Figura 1.1: *Esquema de um Reator Parcialmente Misturado (PaSR).*

os impedimentos adicionais que dificultaram o estudo do fenômeno de micro mistura.

Dada a natureza turbulenta do escoamento no interior do PaSR, muitos dos modelos que foram desenvolvidos para descrever os processo de mistura são baseados em técnicas estocásticas. Estas procuram descrever a função densidade de probabilidade (PDF) do tipo conjunta das propriedades termodinâmicas no interior do PaSR (Pope, 1985). A equação de transporte desta PDF contém termos fechados que descrevem os processos de entrada e de saída de gases do reator e a reação química, o que constitui a principal vantagem desta formulação. Entretanto, nesta equação a mistura micro-molecular média, isto é, o resultado macroscópico do processo de difusão molecular requer o uso de um modelo apropriado.

A figura 1.1 ilustra um Reator Parcialmente Misturado (PaSR), neste modelo idealizado de reator, que simula um processo de combustão a pressão constante, a vazão mássica dos reagentes que atravessam o reator será aqui representada por um fluxo de partículas estocásticas. Durante seu trânsito através do reator, as partículas são submetidas aos processos simultâneos de reação e mistura.

## 1.2

### O Problema

Uma forma de resolver a equação de transporte da PDF é mediante a abordagem estocástica utilizando-se a técnica de Monte Carlo. O desenvolvimento dos métodos estocásticos de Monte Carlo permitiu obter soluções para problemas práticos, como exemplo, a caracterização das chamas em um bico de Bunsen turbulento. (Bilger *et al.*, 2005).

O principal inconveniente desta abordagem é que os *Modelos de Mistura* existentes não representam adequadamente a realidade física do fenômeno de micro-mistura e sua influência sobre a evolução no tempo da PDF. Recentemente Subramaniam e Pope (1998) e Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) formularam novos modelos de mistura visando representar o fenômeno da micro-mistura. Note-se que os modelos de mistura clássicos, tais como o modelo de interação de troca com a média (IEM) e os modelos de Curl (CM) e Curl Modificado (MCM), foram utilizados para estudo do processo de combustão no PaSR (Correa, 1995).

As principais características dos modelos de mistura *clássicos* na solução da equação de transporte da PDF que descreve o PaSR são as seguintes (Bilger *et al.*, 2005):

- Ausência da propriedade de *localidade* na representação do processo de mistura.
- A excessão do modelo IEM, os modelos baseados na interação de partículas (modelos de Curl e Curl modificado) não apresentam um acoplamento direto entre a reação e a mistura.
- Os modelos *clássicos* não representam as flutuações da taxa de dissipação escalar e de sua influência sobre a extinção do processo de combustão.

Além disso, as aplicações destes modelos de mistura, na simulação numérica de um PaSR para a predição das propriedades termoquímicas em casos práticos do processo de combustão, como no caso da combustão pré-misturada de  $H_2$  e  $CO$  (Correa,1993), muitas vezes são discordantes. A discordância dos resultados é a mais pronunciada para baixas frequências de mistura (Correa, 1995).

Essas características dos modelos de mistura *clássicos* (IEM, CM e MCM) impedem a correta descrição dos fenômenos da combustão em escoamento turbulentos utilizando a abordagem da PDF transportada. No entanto, nos últimos anos, desenvolveram-se diversos modelos de misturas (tais como os modelos de Langevin, EIEM e ELM), os quais superam algumas das deficiências dos modelos de mistura clássicos. Porém, a utilização destes modelos em presença de combustão ainda não foi realizada.

### 1.3

#### Objetivo

O presente trabalho tem por objetivo principal implementar e avaliar diversos modelos de mistura desenvolvidos para o cálculo da combustão turbulenta pré-misturada, utilizando a abordagem Reator Parcialmente Agitado (PaSR). Em particular, será examinada a influência do grau de mistura sobre o processo de combustão.

Uma vez que o Reator Parcialmente Misturado (PaSR) oferece o meio mais adequado para o teste do desempenho dos modelos de mistura em situações reativas, os modelos de micro-mistura desenvolvidos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) serão analisados considerando-se a abordagem matemática do PaSR. Estes modelos são o modelo IEM estendido (EIAM), o modelo de Langevin (LM) e o modelo de Langevin estendido (ELM).

A escolha dos modelos de mistura desenvolvidos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) foi feita porque estes modelos são capazes de reproduzir com maior fidelidade o processo de micro-mistura de um escalar quimicamente inerte do que os modelos clássicos. Espera-se, assim, uma melhor predição do processo de combustão turbulenta no qual o fenômeno de mistura seja determinante. Esta é a razão pela qual um novo modelo matemático de um PaSR generalizado será formulado incluindo o modelo IEM clássico, além dos modelos de mistura desenvolvidos por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001).

A simulação do novo modelo de PaSR realizada neste trabalho necessita de métodos numéricos que sejam capazes de resolver Equações Diferenciais Estocásticas (*Stochastic Differential Equations, SDE's*) não lineares. Este é o motivo pelo qual um objetivo adicional é a escolha e a implementação de um método numérico que resolva numericamente de maneira mais eficiente e com uma boa precisão o modelo do PaSR.

### 1.4

#### Organização do trabalho

O presente trabalho é dividido em seis capítulos. No segundo capítulo, apresentam-se os resultados de uma pesquisa bibliográfica abordando, o desenvolvimento dos modelos de mistura, desde o trabalho pionero de Curl (1963) até aqueles modelos desenvolvidos recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001). Também é apresentada uma breve revisão bibliográfica correspondente aos métodos numéricos que resolvem as equações diferenciais estocásticas (SDEs).

O terceiro capítulo descreve a formulação geral das equações de transporte da mecânica dos fluidos, necessária à derivação da equação de trans-

porte da PDF em sua forma mais geral. Em seguida, mediante algumas transformações matemáticas e hipóteses restritivas, esta equação da PDF transportada é simplificada para o caso da operação de um PaSR. Este capítulo é complementado com as equações formuladas no apêndice A.

No quarto capítulo são apresentadas formulações matemáticas dos modelos de mistura mais comumente utilizados na modelagem da combustão em escoamentos turbulentos e dos modelos de mistura desenvolvidos recentemente por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Além disso, propõe-se uma formulação que descreve a operação de um PaSR levando em conta os modelos de Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Neste capítulo também é apresentado o método de solução numérica que utiliza a técnica de Monte Carlo para a resolução das SDEs que desenvolvem a operação do PaSR

O quinto capítulo apresenta os resultados obtidos com os modelos de mistura formulados no quarto capítulo para o caso de uma mistura binária e inerte. Em seguida, são apresentados os resultados obtidos mediante a técnica de Monte Carlo, para o caso do funcionamento de um PaSR levando em conta os modelos de mistura propostos por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Alguns resultados adicionais são reportados no apêndice B.

Finalmente, no sexto e último capítulo, são apresentadas as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

## 2

### Revisão Bibliográfica

#### 2.1

#### Perspectiva Histórica no Desenvolvimento de Modelos de Mistura para Combustão

Curl (1963), em seu trabalho pioneiro, derivou a função de densidade de probabilidade (*Probability Density Function, PDF*) que tentava descrever o processo de difusão de um escalar reativo, que foi reescrita posteriormente sob a forma de modelo estocástico equivalente por Spielman e Levenspiel (1965).

O modelo dinâmico para a função densidade de probabilidade (PDF) postulado por Curl (1963) tinha como objetivo descrever as interações entre partículas de fluido em um sistema líquido bifásico no interior de um reator químico. Este modelo assume que as partículas que descrevem as propriedades no sistema são de igual tamanho e possuem igual probabilidade de coalescer. Imediatamente após a coalescência de um par de partículas, duas novas partículas são formadas cujos valores das propriedades são a média das propriedades das partículas iniciais.

Este processo de coalescência e redispersão modela a mistura turbulenta no fluido. No caso da mistura entre dois fluidos com temperaturas distintas, este modelo prevê que a temperatura média será atingida imediatamente após a ocorrência de coalescência e redispersão. Porém, de acordo com o processo físico da transferência de calor por difusão, a temperatura média somente é atingida para tempos infinitamente grandes. Assim, é fácil constatar que o modelo de Curl fornece resultados que são fisicamente inaceitáveis (Dopazo, 1979).

Além disso, ao derivar o modelo estocástico equivalente ao modelo de Curl, demonstra-se facilmente que a PDF do escalar que se mistura é composta somente de funções delta de Dirac (Pope, 1982). O número de funções delta tende ao infinito, porém sem resultar em uma distribuição contínua (Pope, 1982). Além destas deficiências, o modelo de Curl apresenta outras que serão detalhadas nos capítulos a seguir. Entretanto, este modelo tem servido de base para o desenvolvimento de modelos de mistura mais sofisticados.

Os fundamentos da utilização do método da PDF no desenvolvimento de modelos de turbulência e de convecção turbulenta de campos escalares foram propostos por Lundgren (1967) e Monin (1967) os quais, independentemente, modelaram a equação de transporte da função de densidade de probabilidade para a velocidade do escoamento. Esta abordagem consiste na derivação, a partir das equações de continuidade e de conservação de quantidade movimento para um fluido newtoniano, de uma equação de transporte para a função de densidade de probabilidade em um único ponto (uni-ponto) do campo de velocidade. Esta equação de transporte da PDF possui termos difusivos e de gradiente de pressão abertos. Modelos foram propostos para representar estes termos.

Posteriormente, Hill (1969) derivou a equação de transporte da função de densidade de probabilidade da concentração de espécies para um escoamento turbulento submetido a uma reação química irreversível de segunda ordem. Neste caso, o único termo aberto é o transporte difusivo, o qual representa a mistura turbulenta do escalar considerado como, por exemplo, fração mássica, concentração, temperatura, entalpia, etc.

Dopazo e O'Brien (1974) propuseram um modelo simples para o termo difusivo da equação de transporte da função de densidade de probabilidade para um escalar. Este modelo é baseado na estimação linear da média quadrada, (*Linear Square Mean Estimation, LMSE*). Este modelo de mistura, possibilita a determinação da evolução das espécies químicas reativas submetidas a um campo turbulento homogêneo.

O Modelo *LSME*, também conhecido como Modelo de Interação pela Troca com a Média (*Interaction by Exchange with the Mean, IEM*, Correa, 1993), prediz que a forma da PDF de um escalar não reativo em escoamento turbulento homogêneo permanece inalterada no tempo durante o processo de mistura. Conseqüentemente, para uma escolha arbitrária de uma PDF inicial, sua forma não apresentará qualquer tipo de relaxação. Este comportamento incorreto é resultado do fato que o modelo *IEM* não contém nenhuma informação sobre a forma da distribuição, levando em conta apenas o valor médio do escalar (Pope, 1985).

Por outro lado, evidências experimentais (Warhaft e Lumley, 1978) e de Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation, DNS*), (Eswaran e Pope, 1988), sugerem que a PDF de um campo escalar passivo em turbulência homogênea deveria tender assintoticamente a uma forma Gaussiana partindo-se de qualquer distribuição inicial. O advento da *DNS* permitiu estudos da evolução da PDF de um campo escalar inerte, os quais demonstraram que a PDF evolui através de uma série de formas “universais” que são

similares a uma PDF de tipo Beta. Além disto, mostrou-se que a taxa de dissipação escalar depende fortemente da distribuição estatística do escalar nas diversas escalas de comprimento das flutuações turbulentas. (Fox, 2003).

Dopazo (1979) e Janicka, *et al.* (1979) propuseram, independentemente, uma modificação do modelo de Curl, a qual introduz uma ponderação arbitrária da evolução das composições das partículas durante o processo de mistura. Estes autores escolheram trabalhar com uma ponderação que corresponde a uma variável aleatória uniformemente distribuída. Este modelo de mistura foi chamado Modelo Modificado de Curl (MCM).

No caso de turbulência homogênea, o Modelo Modificado de Curl (Dopazo, 1979; Janicka, *et al.*, 1979) fornece uma relaxação de qualquer PDF inicial, arbitrariamente escolhida, para uma distribuição que, em termos qualitativos, aproxima-se à Gaussiana. Porém os momentos estatísticos da PDF de maior ordem que a variância calculados pelo Modelo Modificado de Curl não aproximam os momentos de uma distribuição Gaussiana, e tendem ao infinito (Pope, 1982).

Para superar a deficiência apresentada pelo Modelo Modificado de Curl, Pope (1982) desenvolveu um modelo estocástico melhorado que resulta em PDF's que são mais próximas de uma Gaussiana. O modelo proposto por Pope é similar ao Modelo Modificado de Curl, exceto pela escolha das partículas a serem misturadas. Esta escolha é realizada por intermédio de uma variável aleatória que descreve o tempo transcorrido entre a mistura de duas partículas. Para modelar tal processo, define-se uma função de distribuição desta "idade", a qual influencia a escolha das partículas a serem misturadas. Com esta técnica, é possível obter momentos de ordens superiores mais próximos aos de uma Gaussiana do que com os modelos precedentes. Porém, este modelo proposto por Pope (1982), da mesma forma que os demais modelos que envolvem interação entre partículas, como o caso dos modelos de Curl Simples e Curl Modificado, leva a alguns questionamentos relativos à representação discreta do processo difusivo, a qual é um fenômeno contínuo.

Na procura de modelos que melhor representem os processos difusivos, Harworth e Pope (1985) propuseram um modelo para representar a PDF da velocidade para o transporte turbulento como sendo um processo estocástico de Langevin. Este processo estocástico linear é de natureza Markoviana e descreve a velocidade de uma partícula de fluido submetida a um movimento Browniano (Gardiner, 1990). O modelo de Langevin fornece bons resultados para o campo de velocidade e tem sido utilizado na determinação do transporte difusivo da velocidade em escoamentos turbulentos homogêneos (Fox, 2003).

Simultaneamente, Pope (1985) propôs a utilização do Modelo de Lange-

vin para descrever campos escalares. Com este modelo é possível garantir que a relaxação de uma PDF, de forma inicial arbitrária, ocorra assintoticamente para uma forma Gaussiana. Porém este modelo, que é baseado no processo Wiener, o qual descreve o movimento Browniano, pode levar a valores do escalar situados fora da faixa de variação permitida pela física do processo de mistura.

Cabe resaltar que o Modelo de Langevin é constituído de dois termos, o primeiro, determinístico, descreve o decaimento da variância e, neste caso, é modelado pela relaxação linear em torno da média. O segundo é o termo difusivo aleatório, responsável pela relaxação da PDF para uma forma Gaussiana para tempos assintoticamente grandes. (Dopazo, 1994).

Diferentes modelos foram propostos adotando, como base de partida, o modelo de Langevin. Valiño e Dopazo (1990) propuseram um modelo de mistura chamado Modelo Binomial de Amostragem (*Binomial Sampling Model*). Em seguida, Valiño e Dopazo (1991) propuseram o Modelo Binomial de Langevin (*Binomial Langevin Model*). Enquanto o primeiro destes é uma combinação do Modelo *IEM* e de um processo estocástico de tipo degrau (*Jump*) resultando assim em uma evolução descontínua; o segundo envolve uma mudança determinística do *IEM* e um processo de difusão baseado em uma evolução contínua não diferenciável. Ambos os modelos de mistura fornecem a evolução da PDF de um campo escalar passivo inerte qualitativamente e quantitativamente corretos.

Chen *et al.* (1989) propuseram um modelo de mistura para o fechamento de um campo escalar denominado Modelo de Modo de Fechamento por Mapeamento (*Mapping Closure Mode Model, MCMM*). Pope (1991) interpretou este modelo em termos de partículas e realizou a sua implementação estocástica utilizando o Método de Monte Carlo para um campo escalar passivo. Valiño (1991b) e Valiño e Gao (1992) estenderam a implementação deste modelo para um campo escalar reativo. O modelo *MCMM* realiza o mapeamento de um campo escalar sobre um campo de referência Gaussiano. Este campo de referência é estacionário e a função de mapeamento desenvolve-se no tempo.

O modelo *MCMM*, quando aplicado ao caso de um escalar inerte submetido a um campo turbulento estatisticamente homogêneo e isotrópico, leva a resultados que são próximos daqueles obtidos por Eswaran e Pope (1988) por Simulação Numérica Direta (DNS). O modelo *MCMM* possui como principal vantagem ser um modelo de mistura que é local no espaço da composição, além de satisfazer os critérios da conservação da média, da queda da variância, o princípio da delimitação, da faixa de variação do escalar, e relaxação em direção a uma Gaussiana. Porém, este modelo apresenta dificuldades quanto a sua ge-

neralização para campos escalares múltiplo ou reativos, devido à ausência de unicidade dos mapeamentos. Além disto, o seu custo computacional é muito maior do que os demais modelos aqui apresentados.

Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) e Soulard *et al.* (2004) formularam o Modelo Estendido da Interação mediante a Transferência com a Média (*Extended Interaction by Exchange with the Mean, EIEM*) e o Modelo Estendido de Langevin (*Extended Langevin Model, ELM*). No caso do modelo *EIEM*, a modificação que se faz com respeito ao modelo clássico *IEM* é a substituição da frequência de mistura média por um processo estocástico intermitente. Como resultado deste procedimento, as partículas de fluido possuem sua própria frequência e comportam-se como se pertencessem a diferentes estruturas turbulentas.

Da mesma forma que o modelo *EIEM*, no modelo de mistura *ELM* a frequência de mistura média é modificada e o processo estocástico intermitente que descreve sua distribuição obedece a uma PDF do tipo log-normal. Esta distribuição é conhecida por representar a transferência estatística estacionária entre as escalas de um espectro turbulento desenvolvido, o qual é usualmente utilizado para modelar a frequência do movimento turbulento. (Pope e Chen, 1990).

Na aplicação do modelo Estendido da Interação mediante a Transferência com a Média (*EIEM*), Sabel`nikov *et al.* (2005) implementaram este modelo para a simulação numérica da auto-ignição e a formação de fuligem em um processo de combustão pulverizada de óleo Diesel. Os resultados obtidos foram qualitativamente melhores do que o modelo *IEM* no que diz respeito à distribuição da temperatura média durante a autoignição e à evolução das concentrações máximas de fuligem. Também foi demonstrado que a predição do atraso de ignição, da variância do escalar e das concentrações de fuligem podem ser melhorados utilizando-se o modelo *EIEM*. Porém, ainda não foi realizada uma implementação estocástica do modelo Estendido de Langevin *ELM* aplicado à combustão em escoamento turbulento.

## 2.2

### Métodos Numéricos para a Resolução de Equações Diferenciais Estocásticas

Os modelos de mistura que envolvem processos difusivos tais como o modelo de Langevin, o modelo *IEM* Estendido (*EIEM*) e o Modelo de Langevin Estendido (*ELM*) (Sabel`nikov e Gorokhovski, 2001) podem ser interpretados mediante a utilização da equação de *Fokker-Planck (FP)* a qual descreve a evolução temporal da PDF  $P_\phi(\psi, t)$  de uma variável aleatória de natureza

Markoviana  $\phi$  (Soulard *et al.*, 2004) e que corresponde à abordagem Euleriana da variável aleatória (Heinz, 2003). A formulação geral da equação de *Fokker-Planck* é (Gardiner, 1990):

$$\frac{\partial P_\phi(\psi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \psi} \{A[\phi(t), t] P_\phi(\psi, t)\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \{B[\phi(t), t] P_\phi(\psi, t)\}. \quad (2-1)$$

Nesta equação  $\psi$  representa o espaço amostral da variável aleatória  $\phi$ , as funções  $A[\phi(t), t]$  e  $B[\phi(t), t]$  são chamados coeficientes de deriva (*drift*) e de difusão (*diffusive*), respectivamente. Se  $A$  é uniforme, este coeficiente resulta em um deslocamento da PDF no espaço da variável  $\phi$  com uma velocidade  $A$ . O coeficiente  $B$  está relacionado ao espalhamento da PDF no espaço amostral  $\psi$ .

Porém, quando aplicadas a escoamentos turbulentos reativos, a equação de *Fokker-Planck* descreve a evolução da PDF conjunta de um grande número de variáveis aleatórias, neste caso, a variável uni-dimensional,  $\phi$ , torna-se multi-dimensional,  $\Phi$ , a qual faz com que a equação de *Fokker-Planck* torne-se extremamente complicada, até impossível de resolver (Heinz, 2003). Como consequência, sua solução numérica só é viável nos casos em que o número de variáveis aleatórias é pequeno.

Outra forma de escrever os modelos de mistura de Langevin, *EIEM* e *ELM* é mediante o uso das *Equações Diferenciais Estocásticas (SDE)*, que são equações diferenciais que contêm termos determinísticos e aleatórios. Esta formulação, equivalente à equação de *Fokker-Planck* (Eq. 2-1), pode ser escrita sob a forma de uma equação diferencial estocástica, de acordo com a interpretação de Itô (Gardiner, 1990):

$$d\phi(t) = A[\phi(t), t] dt + \{B[\phi(t), t]\}^{1/2} dW(t). \quad (2-2)$$

Nesta equação,  $W(t)$  é uma variável aleatória que depende continuamente de  $t$ , e descreve o *Movimento Browniano Padrão* ou o *Processo Wiener Padrão*, a qual deve de satisfazer principalmente três condições (Higham, 2001):

1.  $W(0) = 0$  com probabilidade 1.
2. Para  $0 \leq s \leq t \leq T$  a variável aleatória dada pelo incremento de  $W(t) - W(s)$  é normalmente distribuída com média zero e variância  $t - s$ ; isto é,  $W(t) - W(s) \sim \sqrt{t - s} N(0, 1)$ , onde  $N(0, 1)$  representa a variável aleatória normalmente distribuída com média igual a zero e variância unitária.
3. Para  $0 \leq s \leq t \leq u \leq v \leq T$ , os incrementos  $W(t) - W(s)$  e  $W(v) - W(u)$  são independentes.

A Eq. (2-2) pode ser utilizada para descrever qualquer tipo de processo difusivo. Foi Itô (1942) quem a formulou pela primeira vez como uma tentativa de representar processos difusivos, desenvolvendo assim um método probabilístico como alternativa ao método analítico empregado na época. Posteriormente, Itô demonstrou que as soluções destas SDEs descrevem os processos do tipo Markovianos com trajetórias contínuas e desenvolveu o cálculo estocástico para poder estudar estas soluções. Na atualidade, o cálculo de Itô fornece ferramentas que permitem construir processos de difusão como soluções de equações diferenciais estocásticas (Guerra, 2005).

No entanto, no caso geral, as equações diferenciais estocásticas são impossíveis de serem resolvidos pelas técnicas analíticas. Somente se conseguem soluções para os casos mais simples e restritos. Assim, a alternativa para se obter soluções para SDEs é a utilização das ferramentas numéricas de discretização, cujo desenvolvimento é objeto de pesquisas recentes.

A principal dificuldade na obtenção de soluções numéricas das SDEs é o controle dos erros de discretização pois, devido à sua natureza, o termo difusivo aleatório propaga este tipo de erro. Nos casos de equações diferenciais estocásticas não lineares, como por exemplo, os que descrevem os modelos de mistura de Langevin e Langevin Modificado em presença de combustão, esta propagação pode comprometer a solução numérica.

A avaliação qualitativa e quantitativa do método numérico para resolver SDEs é baseada nos critérios de convergência e de estabilidade. A convergência, em geral, está associada à eficiência do método numérico em obter soluções aproximadas com o menor custo computacional. A estabilidade está relacionada com a capacidade de representação das soluções discretizadas com respeito às exatas.

Um método numérico possui *convergência de ordem forte* igual a  $\gamma_s$  se existe uma constante  $K_s$  tal que (Higham, 2001):

$$E |\phi_N - \phi(t_N)| \leq K_s \Delta t^{\gamma_s}. \quad (2-3)$$

Onde o termo  $E$  representa o valor médio,  $\phi_N$  é a aproximação de  $\phi(t_N)$  no tempo  $T$  depois de  $N$  passos de tempo uniformes de valor  $\Delta t$ . A *convergência de ordem forte* mede a taxa com a qual a “média do erro” do método numérico decai quando o número de passos do tempo  $N$  tende para o infinito, isto é quando  $\Delta t \rightarrow 0$ .

Uma alternativa também utilizada que testa a queda da “média dos erros” é a *convergência de ordem fraca*. Se diz que um método numérico apresenta *convergência de ordem fraca* igual a  $\gamma_w$  se existe uma constante  $K_w$  tal que, para toda função,  $f$ ,

$$|Ef(\phi_N) - Ef[\phi(t_N)]| \leq K_w \Delta t^{\gamma_w}, \quad (2-4)$$

onde a função  $f$  na Eq. (2-4) deve de ser do tipo *suave e polinomial*. Usualmente, esta função  $f$  é escolhida da forma mais simples, isto é, como por exemplo, uma função identidade  $f(\phi) = \phi$ .

O método numérico mais simples para a resolução de SDEs é o método de *Euler Estocástico Explícito* ou *Euler-Maruyama*, que consiste em uma generalização do esquema do tipo *Euler Explícito* (Higham e Kloeden, 2001). Este método numérico possui uma convergência forte de ordem  $\gamma_s = 0,5$  e convergência fraca de ordem  $\gamma_w = 1$ , o que revela a fraqueza do método numérico com respeito ao demais modelos que serão descritos posteriormente.

Além da convergência lenta, o método numérico de Euler-Maruyama apresenta uma região de estabilidade extremamente limitada. De fato, só é possível obter soluções aceitáveis para casos nos quais as equações diferenciais estocásticas são quase lineares, isto é, quando os coeficientes de deriva  $A[\phi(t), t]$  e difusão  $B[\phi(t), t]$  são quase constantes. Na maior parte de situações práticas, este método não é particularmente satisfatório e o uso de métodos numéricos que apresentem ordem de convergência mais elevada é recomendado (Kloeden, *et al.*, 2003).

O método de *Euler Implícito* de resolução das SDEs, contrariamente ao do método de Euler Implícito para EDOs, apresenta fortes instabilidades para valores do passo de tempo relativamente grandes (Milstein *et. al.*, 1998). Isto acontece devido à natureza do processo Wiener, que pode adotar valores em toda faixa dos números reais  $(-\infty, +\infty)$  no caso de equações diferenciais estocásticas nas quais ambos os termos, o determinístico e o estocástico, são não lineares (Kloeden e Platen, 1992).

Para superar a dificuldade da instabilidade apresentada pelo método de Euler Implícito em resolver SDEs, Milstein *et. al.* (1998) propuseram um método numérico denominado “Método Implícito Balanceado”. Este método numérico parte do método numérico de Euler-Maruyama ao qual se adiciona uma *implicitude parcial*, conseguindo-se desta forma que a propagação de erros oriunda do termo estocástico seja controlável, quando comparado aos métodos de Euler Explícito e Implícito.

Porém, este método não trata de forma implícita o termo determinístico. No caso dos modelos de mistura de Langevin, EIEM e ELM acoplados à uma descrição da combustão pela lei de Arrhenius, é indispensável tratar a SDE por método implícito de modo a evitar o aparecimento de instabilidades numéricas.

Burrage e Tian (2001) propuseram um método numérico para resolver SDEs que são “rígidas” (*Stiff Stochastic Differential Equations*), o qual foi de-

nominado método de Euler Composto. Este método resulta de uma combinação do método de Euler Semi-implícito e do método de Euler Implícito. O método de Euler Composto consiste em definir um critério de estabilidade a cada passo de tempo que determina a escolha do método numérico a ser utilizado, isto é, Euler Semi-implícito ou Euler Implícito, garantido desta forma uma região de estabilidade muito maior que a dos métodos anteriormente descritos.

Recentemente, Tian e Burrage (2001) desenvolveram e avaliaram diferentes métodos numéricos do tipo Explícito, Semi-implícito e Implícito para as Equações Diferenciais Estocásticas baseados na sua discretização de acordo com a sua expansão em série de Taylor. A equação modelo utilizada para testar os diferentes métodos numéricos e esquemas de discretização foi uma equação diferencial estocástica do tipo linear na componente de deriva adicionado de um ruído branco multiplicativo na componente difusiva. Em concordância com a definição proposta por Tian e Burrage (2001), o *método de Euler-Taylor Implícito* é definido a partir de expansão em série de Taylor de primeira ordem e apresenta uma ordem de convergência forte igual a 0,5. O *método de Milstein-Taylor Implícito* é obtido a partir da expansão de Taylor truncada na segunda ordem e apresenta, assim uma ordem de convergência do tipo forte igual a 1.

Os métodos numéricos de Euler-Taylor, Milstein-Taylor, e Taylor foram assim desenvolvidos para esquemas do tipo implícito. Em seguida, foram avaliadas suas respectivas restrições e propriedades de estabilidade. Os resultados numéricos reportados por Tian e Burrage (2001) demonstram que os métodos numéricos de Milstein-Taylor e Euler-Taylor do tipo implícito são métodos numéricos promissores para resolução de equações diferenciais estocásticas não lineares, como é o caso das formulações estocásticas que envolvem o fenômeno da combustão.

### 3

## A Função de Densidade de Probabilidade na Descrição do Reator Parcialmente Agitado

A utilização da equação de transporte da função de densidade de probabilidade (PDF) permite uma completa descrição dos escoamentos turbulentos reativos. Este capítulo começa com a formulação geral das equações de transporte da mecânica dos fluidos, necessárias à derivação da equação de transporte da função densidade de probabilidade conjunta do campo de velocidade e escalar de tipo uni-ponto. Em seguida, são introduzidas transformações matemáticas e hipóteses restritivas as quais permitem chegar à formulação da PDF para um campo escalar, formulação esta utilizada para a descrição matemática do PaSR.

### 3.1

#### Considerações Gerais

A diversidade de escalas de comprimento e de tempo que apresentam os escoamentos turbulentos é, na maioria de casos práticos, impossível de resolver mediante utilização de Simulação Numérica Direta (DNS) das equações de transporte. Isto ocorre pois o esforço computacional necessário é proporcional a  $Re^{9/4}$ , onde  $Re$  é o número de Reynolds (Heinz, 2003). O problema da modelagem computacional da turbulência torna-se mais difícil quando considerado o processo de combustão, o qual envolve uma extensa faixa de escalas de comprimento e de tempo que interagem com aquelas características da turbulência (Chang, 1995). Isto faz com que a solução das equações de transporte por meio da DNS apresente um alto custo computacional, e sejam assim restritas a pequenos valores de números de Reynolds e Damköler (Dopazo, 1994).

Nestes últimos trinta anos, a equação de transporte da Função de Densidade de Probabilidade (PDF) tem sido uma ferramenta poderosa na modelagem de escoamentos turbulentos reativos (Pope, 1985). Uma das principais vantagens da utilização dos métodos da PDF para a descrição de escoamentos turbulentos reativos é que todas as estatísticas das propriedades do tipo uni-ponto do escoamento são descritas. Os processos de convecção e de produção química são tratados de forma exata e não requerem fechamento. Desta forma,

os esquemas detalhados para a descrição da cinética das reações químicas podem ser utilizados sem dificuldade (Fox, 2003).

Por outro lado, os efeitos do gradiente das flutuações de pressão e, principalmente, da difusão molecular precisam de modelo. Cabe resaltar que estes dois processos não afetam os valores médios da velocidade e das propriedades escalares de forma direta (Pope e Chen, 1990). Note-se que, devido à sua natureza, os modelos de micro-mistura podem ser validados por comparação da DNS, o que constitui uma vantagem das formulações estocásticas sobre as convencionais.

## 3.2

### Equações de Transporte de um Escoamento Turbulento Reativo

O ponto de partida da presente análise de escoamentos turbulentos reativos são equações de transporte da mecânica dos fluidos reativos, as quais compreendem as equações de continuidade, de quantidade de movimento, de fração de massa das espécies químicas e de energia.

#### 3.2.1

##### Equações de transporte de massa e de quantidade de movimento

As equações de transporte de massa e quantidade de movimento em coordenadas cartesianas são, respectivamente,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_j} = 0, \quad (3-1)$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i, \quad j = 1, 2, 3, \quad (3-2)$$

onde  $p$  é a pressão,  $\tau_{ij}$  o tensor de tensões viscosas dado pela Eq. (A-5) e  $F_i$  são as forças do corpo, que incluem as forças devido à aceleração gravitacional, as forças eletromagnéticas, etc.  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$  é o vetor de velocidade. Utilizou-se a notação indicial de tensores formuladas por Einstein para a representação destas equações.

Um parâmetro adimensional que é obtido a partir da equação de transporte do campo de velocidade é o número de Reynolds

$$Re = \frac{\mathcal{U}\mathcal{L}}{\nu}, \quad (3-3)$$

onde  $\mathcal{U}$  é a escala de velocidade característica do escoamento e  $\mathcal{L}$  a escala de comprimento característico do objeto de estudo e  $\nu$  é a viscosidade cinemática. Este parâmetro adimensional pode ser interpretado como a razão entre intensidades do transporte convectivo e do transporte molecular, isto é, a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas. O número de Reynolds é um parâmetro

importante na determinação do estado do escoamento, de modo geral escoamentos com baixos números de Reynolds são laminares, enquanto escoamentos com números de Reynolds elevados encontram-se em estado turbulento.

Quando o escoamento encontra-se em estado turbulento, o campo de velocidade flutua aleatoriamente no espaço e no tempo em torno do seu valor médio  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ :

$$\langle \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) dt. \quad (3-4)$$

A flutuação do campo de velocidade em torno a sua média é

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) - \langle \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) \rangle, \quad (3-5)$$

o que permite definir a energia cinética do movimento turbulento como

$$k \equiv \frac{1}{2} \langle \mathbf{u} \bullet \mathbf{u} \rangle = \frac{1}{2} \langle u_i u_i \rangle. \quad (3-6)$$

Pode ser mostrado que a energia cinética da turbulência é dissipada a nível molecular (Pope, 2000). O parâmetro que caracteriza este fenômeno de dissipação é a taxa de dissipação da energia turbulenta média  $\langle \varepsilon_T(\mathbf{x}, t) \rangle$ , a qual é definida por

$$\langle \varepsilon_T(\mathbf{x}, t) \rangle = \frac{1}{2} \nu \left\langle \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle. \quad (3-7)$$

Nos estudos de turbulência, outra grandeza freqüentemente utilizada, é a pseudo-dissipação da energia cinética da turbulência

$$\langle \varepsilon(\mathbf{x}, t) \rangle = \nu \left\langle \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\rangle, \quad (3-8)$$

a qual se relaciona com a taxa de dissipação da energia cinética da turbulência por

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon_T \rangle - \nu \frac{\partial^2 \langle u_i u_j \rangle}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (3-9)$$

Neste trabalho, a pseudo-dissipação será considerada como representativa da taxa de dissipação da energia cinética da turbulência, pois

- Estudos de DNS em turbulência isotrópica mostram que as propriedades estatísticas de  $\langle \varepsilon \rangle$  são mais favoráveis do que as de  $\langle \varepsilon_T \rangle$  (Pope e Chen, 1990).
- Os valores de  $\langle \varepsilon \rangle$  e  $\langle \varepsilon_T \rangle$  são diferentes somente pelo fator  $\nu (\partial^2 \langle u_i u_j \rangle / \partial x_i \partial x_j)$ , o qual é zero em presença de turbulência homogênea e, em geral, varia inversamente com o número de Reynolds.

### 3.2.2

#### Turbulência do Campo Escalar

A evolução de um campo escalar simples que pode representar a fração mássica, a entalpia, temperatura, etc.  $\phi(\mathbf{x}, t)$ , submetido a um campo de velocidade  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$  é dada por

$$\frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial t} + U_j \frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial x_j} = -\frac{\partial \mathcal{F}_{\alpha j}}{\partial x_j} + S_\alpha(\phi), \quad \alpha = 1, \dots, K + 1, \quad (3-10)$$

onde,  $\mathcal{F}_{\alpha j}$  representa o fluxo molecular do escalar  $\phi_\alpha$  e  $S_\alpha(\phi)$  é o termo fonte, a ser definido mais adiante. Considerando que a difusão molecular é governada pela lei de Fick, tem-se

$$\mathcal{F}_{\alpha j} = -\rho \Gamma_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j}, \quad (3-11)$$

onde,  $\Gamma_\alpha$  representa o coeficiente difusivo do escalar  $\phi_\alpha$ . Substituindo a Eq. (3-11) na Eq. (3-10), obtém-se

$$\frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial t} + U_j \frac{\partial \rho \phi_\alpha}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \Gamma_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_j} \right) + S_\alpha(\phi), \quad \alpha = 1, \dots, K + 1. \quad (3-12)$$

No caso em que o escalar representa a fração mássica das espécies químicas, o termo fonte do escalar é o termo de produção química, o qual é uma função não linear do escalar.

O valor médio do escalar,  $\langle \phi_\alpha(\mathbf{x}, t) \rangle$  é de forma análoga à Eq. (3-4). A flutuação do campo escalar em torno à média  $\phi'_\alpha(\mathbf{x}, t)$  é dada por

$$\phi'_\alpha(\mathbf{x}, t) = \phi_\alpha(\mathbf{x}, t) - \langle \phi_\alpha(\mathbf{x}, t) \rangle, \quad \alpha = 1, \dots, K + 1, \quad (3-13)$$

É usual introduzir a variável  $k_\phi$ , a intensidade das flutuações do campo escalar  $\phi_\alpha$ ,

$$k_\phi = \langle \phi'_\alpha \phi'_\alpha \rangle, \quad (3-14)$$

a qual é utilizada para caracterizar as flutuações do campo escalar  $\phi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ . A intensidade destas flutuações é influenciada pela mistura molecular. A taxa de redução destas flutuações é  $\langle \varepsilon_\phi \rangle$ , que é a taxa de dissipação do campo escalar  $\phi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ , definido como

$$\langle \varepsilon_\phi \rangle = \Gamma \left\langle \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial x_j} \frac{\partial \phi'_\alpha}{\partial x_j} \right\rangle, \quad (3-15)$$

onde  $\Gamma_\alpha$  é o coeficiente difusivo do escalar  $\phi_\alpha$ .

### 3.3

#### Função Densidade de Probabilidade Conjunta

Dado um campo vetorial  $\Phi(\mathbf{x}, t) = [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t), \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}, t)]$  como o conjunto do campo de velocidade, de fração mássica das espécies e da entalpia, sua função densidade de probabilidade conjunta,  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{U}, \mathbf{Y}, h}(\mathbf{V}, \Gamma, H; \mathbf{x}, t)$  é definida como a probabilidade de um evento onde os campos aleatórios de velocidade  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$  das frações mássicas  $\mathbf{Y}(\mathbf{x}, t)$  e da entalpia  $h(\mathbf{x}, t)$  em um ponto  $\mathbf{x}$  e no instante do tempo  $t$  encontram-se na vizinhança diferencial de valores fixos do espaço amostral  $\mathbf{V}$ ,  $\Gamma$  e  $H$ , isto é

$$\begin{aligned} P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)d\Psi &\equiv Prob\{\Psi \leq \Phi(\mathbf{x}, t) < \Psi + d\Psi\} \\ &\equiv Prob(\{\mathbf{V} \leq \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) < \mathbf{V} + d\mathbf{V}\} \cap \\ &\quad \{\Gamma \leq \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t) < \Gamma + d\Gamma\} \cap \{H \leq h(\mathbf{x}, t) < H + dH\}). \end{aligned} \quad (3-16)$$

O lado direito desta equação é a probabilidade de que, as variáveis aleatórias  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$  e  $\mathbf{Y}(\mathbf{x}, t)$  e  $h_t(\mathbf{x}, t)$  se encontrarem no intervalo de valores do *espaço amostral* do vetor de velocidade  $\mathbf{V}$  e  $\mathbf{V} + d\mathbf{V}$ , do vetor das frações mássicas  $\Gamma$  e  $\Gamma + d\Gamma$ , e da entalpia  $H$  e  $H + dH$  respectivamente, para cada realização do escoamento turbulento reativo.

A equação de transporte para a PDF conjunta  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)$ , a qual é derivada no Apêndice A, escreve-se:

$$\begin{aligned} \rho(\Psi) \left[ \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + V_j \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right] &= -\frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] \\ - \frac{\partial}{\partial \Gamma_k} [\rho(\Psi) \langle C_k | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] &- \frac{\partial}{\partial H} [\rho(\Psi) \langle C_h | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)]. \end{aligned} \quad (3-17)$$

Nesta equação, os termos  $\langle A_j | \Psi \rangle$ ,  $\langle C_k | \Psi \rangle$  e  $\langle C_h | \Psi \rangle$  são chamados *Fluxos Condicionados* e representam termos condicionais de aceleração e difusão/produção das frações mássicas e entalpia, respectivamente. Note-se que  $A_j$ ,  $C_k$  e  $C_h$  encontram-se definidos no apêndice A pelas equações (A-17), (A-18) e (A-19), respectivamente.

Da Eq. (3-17), pode-se perceber que a PDF conjunta de velocidade e escalar evolui (i) no espaço real  $\mathbf{x}$  devido às flutuações do campo de velocidade  $\mathbf{V}$ ; (ii) no espaço de fase da velocidade devido ao termo da aceleração condicionado  $\langle A_j | \Psi \rangle$ ; (iii) no espaço de fase das frações mássicas, devido ao termo da difusão/reação condicionada  $\langle C_k | \Psi \rangle$ ; (iv) e no espaço de fase da entalpia total, devido ao termo da difusão/fonte condicionado de  $\langle C_h | \Psi \rangle$ .

A equação de transporte das frações mássicas [Eq. (A-3)], é

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{kj}}{\partial x_j} + S_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (3-18)$$

onde  $J_{kj}$  é o fluxo difusivo das frações mássicas e  $S_k$  representa o termo de produção da  $k$ -ésima espécie química.

Mediante hipóteses simplificadoras detalhadas no apêndice A, a equação de transporte da entalpia total é

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j h_t}{\partial x_j} = -\frac{\partial \mathcal{J}_j}{\partial x_j} + S_h, \quad (3-19)$$

onde  $\mathcal{J}_j$  é o fluxo difusivo da entalpia e  $S_h$  representa o termo fonte da entalpia, também descritos no apêndice A. Note-se que as Eq. (3-18) e (3-19) apresentam a mesma estrutura, isto é, ambas possuem um termo transiente, um termo convectivo, um termo difusivo e um termo de fonte. Portanto, pode se definir uma única equação que descreve o transporte seja das frações mássicas, seja da entalpia total. Esta equação é chamada de equação de transporte do escalar, Eq. (3-10). No presente caso,  $\alpha$  representa a fração mássica das espécies que compõem a mistura e a entalpia total, ou seja,  $\alpha = 1, \dots, k + 1$ .

Desta forma, é possível reescrever a equação de transporte da PDF para  $\Phi$ , [Eq. (3-17)] de uma forma mais compacta

$$\rho(\Psi) \left[ \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + V_j \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} [\rho(\Psi) \langle \Theta_{\alpha} | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)], \quad (3-20)$$

onde  $\psi_{\alpha}$  representa a variável do espaço amostral do campo escalar. Para utilizar a Eq. (3-20), precisa-se definir os termos dos *fluxos condicionados*, isto é, os termos médios da aceleração condicionada e da difusão/fonte do escalar condicionada, respectivamente, cuja forma instantânea é dada pelas Eqs (A-17), (A-18) e (A-19).

$$\rho(\psi) \langle A_i | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} | \Psi \right\rangle - \left\langle \frac{\partial p'}{\partial x_i} | \Psi \right\rangle - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \rho(\psi) g_i. \quad (3-21)$$

$$\rho(\psi) \langle \Theta_{\alpha} | \Psi \rangle = -\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_{\alpha j}}{\partial x_j} | \Psi \right\rangle + S_{\alpha}(\psi). \quad (3-22)$$

Note-se que  $F_i$  que representa as forças do corpo na Eq. (3-2), foi simplificada de modo a considerar apenas  $\rho(\psi) g_i$ , isto é, a força exercida pela aceleração da gravidade.

Os dois primeiros termos do lado direito da Eq. (3-21) são abertos, e correspondem aos efeitos da taxa da dissipação viscosa e das flutuações da

pressão. O fechamento destes termos é o principal desafio para a descrição da turbulência pela abordagem da PDF. Da mesma forma, o primeiro termo do lado direito da Eq. (3-22) também é aberto e corresponde aos efeitos da difusão molecular. O fechamento deste termo é o principal desafio para a descrição da mistura turbulenta (Fox, 2003). Note-se que o termo de produção química na Eq. (3-16) aparece sob forma fechada, contrariamente ao que ocorre no caso dos modelos RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*) para escalares reativos (Pope, 1985).

O desenvolvimento da equação de transporte da PDF conjunta de velocidade e escalar  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)$  tem como principal vantagem que, uma vez conhecida esta PDF, o valor médio de qualquer função  $Q(\Phi)$  das variáveis aleatórias  $\Phi$  pode ser calculado por integração:

$$\langle Q(\Phi) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi. \quad (3-23)$$

Em particular, os momentos estatísticos de segunda ordem da velocidade e do escalar associados à abordagem RANS são conhecidos. Em particular, podem ser determinados a velocidade média  $\langle \mathbf{U} \rangle$ , o escalar  $\alpha$  médio  $\langle \phi_{\alpha} \rangle$ , as tensões de Reynolds  $\langle u_i u_j \rangle$ , as covariâncias de segunda ordem  $\langle \phi'_{\alpha} \phi'_{\beta} \rangle$ , os fluxos escalares  $\langle u_i \phi'_{\alpha} \rangle$  e o termo de produção química  $\langle S_{\alpha}(\phi) \rangle$ . Além disso, os momentos estatísticos de maior ordem também estão disponíveis tais como as correlações triplas de velocidade  $\langle u_i u_j u_k \rangle$ .

Portanto, a solução da equação de transporte da PDF, proporciona mais informações do que as disponíveis nos modelos RANS de segunda ordem, sem envolver o problema de fechamento do termo de produção.

Entretanto, os valores médios de funções não lineares da velocidade e/ou de gradientes escalares requerem informação bi-ponto, a qual não se encontra em  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)$ . Em particular, a taxa de dissipação escalar, Eq. (3-15), não pode ser calculada a partir desta.

Como consequência, os termos de transporte molecular condicionado e o termo de flutuação de pressão presentes nas Eqs (3-21) e (3.22) precisam ser modelados (Pope, 1985).

### 3.4

#### Função Densidade de Probabilidade do Campo Escalar

Muitas das aplicações dos métodos de transporte da PDF envolvem apenas o transporte da PDF do campo escalar,  $P_{\phi}(\psi; \mathbf{x}, t)$ . A principal vantagem desta abordagem é sua simplicidade, quando comparada a do transporte da PDF conjunta,  $P_{U,\phi}(\mathbf{V}, \psi; \mathbf{x}, t)$ , (Pope, 1994a).

A abordagem de transporte da PDF do campo escalar requer, adicionalmente, que o modelo de transporte de turbulência seja acoplado para fornecer o campo de velocidade e as escalas características de tempo e de comprimento. Ainda assim, a equação de transporte da PDF do escalar permite determinar exatamente todos os momentos estatísticos uni-ponto do escalar. Em particular, o termo médio de produção  $\langle S_\alpha(\phi) \rangle$  é facilmente obtido.

Segundo Fox (2003), para cálculos de escoamentos turbulentos reativos, a escolha do modelo de turbulência não influi de modo crucial na determinação das estatísticas do escalar. Assim, o transporte da PDF da composição fornece uma abordagem que, em termos computacionais, é ligeiramente mais barata do que a da PDF conjunta da velocidade e do escalar.

A função densidade de probabilidade do campo escalar,  $P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t)$ , pode ser derivada integrando-se a função densidade de probabilidade conjunta da velocidade e escalar,  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{U},\phi}(\mathbf{V}, \psi; \mathbf{x}, t)$ , sobre o espaço amostral da velocidade

$$P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{\mathbf{U},\phi}(\mathbf{V}, \psi; \mathbf{x}, t) d\mathbf{V}. \quad (3-24)$$

Integrando-se a equação de transporte da PDF conjunta do campo de velocidade e escalar, Eq. (3-20), sobre a variável do espaço de amostragem da velocidade e considerando por simplicidade, o caso particular de densidade  $\rho$ , a viscosidade dinâmica  $\mu_l$  e o coeficiente de difusividade  $\Gamma_\alpha$  do escalar  $\alpha$  como constantes, (Fox, 2003), obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\langle U_j | \psi \rangle P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t)] \\ &= - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\langle \Gamma_\alpha \nabla^2 \phi_\alpha | \psi \rangle P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \frac{1}{\rho} S_\alpha(\psi) P_\phi(\psi; \mathbf{x}, t) \right]. \end{aligned} \quad (3-25)$$

A PDF do campo escalar evolui sob a influência (i) do transporte convectivo devido à velocidade condicionada, (ii) do transporte no espaço da composição devido à mistura molecular condicionada (micro-mistura) e (iii) do termo de produção química.

Embora a PDF conjunta do campo escalar não leve ao problema de fechamento associado ao termo de produção química, esta PDF não contém nenhuma informação do campo de velocidade e, portanto, precisa-se de um modelo de turbulência para fornecer esta informação.

Esta PDF também não contém informação do transporte escalar devido às flutuações da velocidade. Assim, para descrever o transporte de escalar sob o efeito da turbulência precisa-se de um modelo.

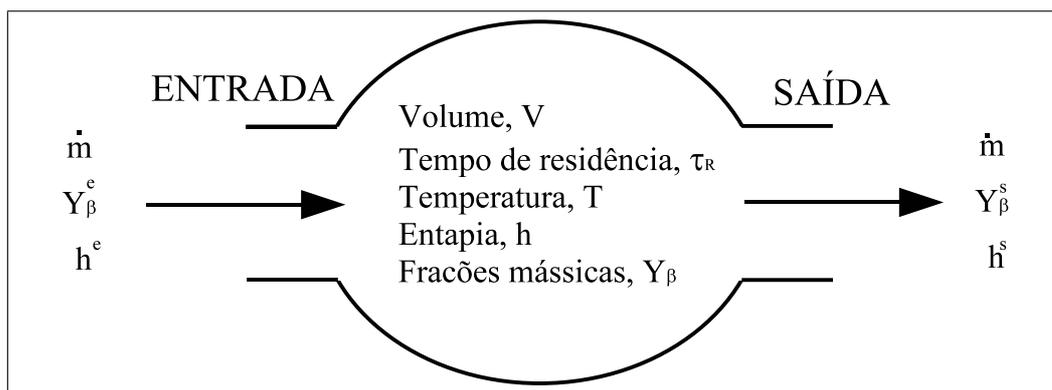


Figura 3.1: Representação esquemática de um reator de fluxo contínuo, onde  $\dot{m}$  é a vazão mássica dos reagentes que entram no equipamento. Os reagentes são compostos por  $K$  espécies químicas cujas frações mássicas na entrada e na saída são  $Y_k^e$  e  $Y_k^s$  respectivamente.

Por fim, a PDF transportada não contém nenhuma informação com respeito à taxa de dissipação do escalar e o seu acoplamento com o campo turbulento. Como consequência, precisa-se de um modelo de mistura para determinar o efeito da difusão molecular.

### 3.5

#### Modelo Matemático de Reator de Fluxo Contínuo

Um reator de fluxo contínuo é um equipamento que, em termos gerais, estabelece condições apropriadas para que as transformações químicas desejadas ocorram, para logo permitir a remoção contínua dos produtos destas transformações (reações) químicas. A figura 3.1 ilustra uma representação esquemática de um reator de fluxo contínuo.

Na operação do reator em regime permanente, combustível e oxidante são continuamente fornecidos, alimentando assim o processo da combustão. Como consequência deste processo, a temperatura dos gases confinados no reator aumenta consideravelmente. Finalmente, os produtos de combustão deixam o reator.

Este modelo simplificado representa o funcionamento de diversos sistemas práticos tais como câmaras de combustão de turbinas a gás, fornos, etc.

#### 3.5.1

##### Reator Perfeitamente Agitado (PSR)

A abordagem do Reator Perfeitamente Misturado (*Perfectly Stirred Reactor*, PSR) tem sido utilizada para estudar a evolução química de vários processos, inclusive a combustão (Chen, 1997). A particularidade que apresenta o reator perfeitamente misturado (PSR) é que, em regime permanente, os

reagentes são introduzidos de tal forma que a intensa mistura turbulenta faz com que as propriedades dos gases dentro do reator sejam homogêneas. Isto significa que a conversão dos reagentes em produtos é controlada somente pelo processo de reação química e não pelo processo de mistura. Desta forma, o tempo de residência é o principal parâmetro de controle deste sistema (Zeldovich *et al.*, 1985)

$$\tau_r = \frac{\rho \forall}{\dot{m}}, \quad (3-26)$$

onde,  $\dot{m}$  é a vazão mássica dos reagentes que entram no reator,  $\forall$  é o volume do reator e  $\rho$  é a densidade dos gases no interior do reator.

Neste sistema, se o tempo de residência for grande quando comparado com a escala de tempo das reações químicas, ocorre o regime de combustão intensa, no qual as concentrações dos produtos de combustão aproximam-se do estado de equilíbrio termoquímico. De forma contrária, se o tempo de residência for curto diante do tempo químico, tem-se o regime de combustão fraca, no qual as propriedades dos gases de saída são praticamente idênticas às de entrada.

Embora o PSR possa prover informações relevantes quanto à cinética dos processos de combustão, muitas aplicações práticas desviam-se significativamente da situação idealmente misturada. No caso em que a taxa de mistura turbulenta não é rápida, quando comparada à cinética das reações químicas dos processos de combustão, o grau de mistura pode ter um forte impacto nas propriedades do fluido no interior do reator (Chang, 1995). Para avaliar os efeitos da natureza de segregação, isto é, os efeitos de não mistura, sobre as propriedades termodinâmicas dentro do reator, modelos de Reator Parcialmente Agitados (*Partially Stirred Reactor*, PaSR) foram propostos (Correa, 1993).

### 3.5.2 Reator Parcialmente Agitado (PaSR)

A característica mais importante de um Reator Parcialmente Agitado (*Partially Stirred Reactor*, PaSR) é a natureza segregada, ou não misturada, dos fluidos, ou seja, as moléculas constituintes dos fluidos reativos não se encontram difundidos completamente a nível molecular. Cabe resaltar porém, que devido à agitação turbulenta, os valores médios das propriedades termoquímicas são supostos uniformes no interior do reator (Banerjee e Ierapetritou, 2003).

O propósito da abordagem do PaSR é explorar a influência da micro-mistura sobre as propriedades termoquímicas dos processos de combustão. A abordagem matemática do PaSR pode ser realizada partindo da equação de

transporte da uma função de densidade de probabilidade do campo escalar, (Eq. 3-25). Utilizando a hipótese de que a PDF é uniforme no interior do reator, isto é

$$\int_{\mathcal{V}} P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\mathcal{V} = \mathcal{V} \cdot P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; t), \quad (3-27)$$

Com a ajuda do teorema da divergência, para integrar o segundo termo da Eq. (3-25) sobre o volume do reator, temos

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial x_j} [\langle U_j \rangle + \langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle] P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t) d\mathcal{V} \\ &= A^s [\langle U_j \rangle + \langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle] P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)^s - A^e [\langle U_j \rangle + \langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle] P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; \mathbf{x}, t)^e, \end{aligned} \quad (3-28)$$

onde  $A^e$  e  $A^s$  são, respectivamente, as áreas da seção transversal à vazão volumétrica à entrada e saída do reator. Uma vez que a vazão volumétrica que entra e sai do reator é admitida constante, tem-se

$$A^s [\langle U_j \rangle + \langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle]^s = A^e [\langle U_j \rangle + \langle u_j | \boldsymbol{\psi} \rangle]^e = \dot{\mathcal{V}}. \quad (3-29)$$

Substituindo as Eqs. (3-27), (3-28) e (3-29) na integração da Eq. (3-26) sobre o volume do PaSR, e levando em conta que  $\tau_r = \rho \mathcal{V} / \dot{m} = \mathcal{V} / \dot{\mathcal{V}}$ , a equação de transporte da PDF que descreve o funcionamento de um PaSR é (Chen, 1997)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_r} [P_{\phi}^e(\boldsymbol{\psi}) - P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; t)] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} [\langle \Gamma_{\alpha} \nabla^2 \phi_{\alpha} | \boldsymbol{\psi} \rangle P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; t)] - \frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left[ \frac{1}{\rho} S_{\alpha}(\boldsymbol{\psi}) P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; t) \right], \end{aligned} \quad (3-30)$$

onde,  $P_{\phi}(\boldsymbol{\psi}; t)$  é a PDF conjunta do campo escalar  $\phi(\mathbf{x}, t)$ . Na Eq. (3-30) o primeiro e o terceiro termos representam, respectivamente, os efeitos da convecção (vazão através do reator) e da reação química. Estes termos aparecem de forma fechada e não requerem modelo. Porém, o segundo termo do lado direito da Eq. (3-30), o qual representa o efeito da micro mistura, necessita ser modelado. Seu tratamento será objeto do próximo capítulo.

## 4

### Modelagem Matemática do Processo de Mistura

Como foi visto no Cap. 3, o termo difusivo da equação de transporte da PDF para um PaSR (Eq. 3-30) é um termo aberto. Para fechá-lo, é necessário dispor de modelos que representem de forma mais adequada o processo de mistura a nível molecular. Este capítulo começa pela simplificação da Eq. (3-30) para o caso de um escalar não reativo submetido a um campo de velocidade estatisticamente homogêneo e isotrópico. Esta situação simplificada permite a análise das diferentes propriedades dos modelos de mistura. Em seguida, são introduzidos três modelos de mistura *clássicos*: o modelo de mistura de Coalescência e Dispersão (CD), o modelo de Curl Modificado (MCM) e o modelo de Interação pela Troca com a Média (IEM). Finalmente, são apresentados os novos modelos de mistura formulados recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) e que são o Modelos IEM estendido (EIEM), o modelo de Langevin (LM) e o modelo de Langevin Estendido (ELM).

#### 4.1

##### Modelagem da Mistura Escalar Inerte

Os três termos do lado direito da equação de transporte da PDF para um PaSR (Eq. 3-30) descrevem, respectivamente, os processos de entrada-saída do escoamento (forçamento), a mistura molecular e o processo da reação química (Sabel'nikov e Figueira da Silva, 2002). No caso do presente estudo da influência da escolha do modelo de mistura molecular do escalar inerte quando submetido a um escoamento turbulento estatisticamente estacionário, os processos convectivos e de reação química não são levados em conta.

Assim, a equação que descreve a evolução da PDF de um escalar inerte submetido a um escoamento turbulento estacionário é,

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)] . \quad (4-1)$$

Cabe lembrar que o termo  $\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle$  descreve a evolução no espaço amostral do escalar  $\phi$  devido ao efeito da mistura molecular, razão pela qual é usualmente chamado de termo de micro-mistura (Chen, 1997). Este termo é aberto e, portanto, necessita ser modelado.

A intensidade das flutuações,  $k_\phi$ , e a taxa de dissipação do escalar,  $\varepsilon_\phi$ , são definidos como (Pope, 1985):

$$k_\phi = \phi'^2, \quad (4-2)$$

$$\varepsilon_\phi = \Gamma \left( \frac{\partial \phi'}{\partial x_j} \frac{\partial \phi'}{\partial x_j} \right), \quad (4-3)$$

onde,  $\Gamma$  é o coeficiente de difusão do escalar. Após algumas transformações, a Eq. (4-1) pode ser reescrita em função da taxa de dissipação do escalar condicionada  $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$  (Dopazo, 1979; Pope, 2000):

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = - \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} [\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)]. \quad (4-4)$$

Das Eqs. (4-1) e (4-4) obtém-se uma relação entre o laplaciano escalar condicionado e a taxa de dissipação do escalar condicionada,

$$\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle = \frac{1}{P_\phi(\psi; t)} \frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)], \quad (4-5)$$

a qual é verificada apenas para altos número de Reynolds, nos casos em que o campo escalar pode ser considerado como estatisticamente homogêneo (Fox, 2003), isto é, que o gradiente do escalar médio é nulo.

Uma das principais dificuldades na elaboração de um modelo de mistura provém das interações complexas existentes entre os campos turbulentos de velocidade e escalar. Estas interações conduzem à existência de estruturas escalares distribuídas em um amplo espectro de escalas, as quais interagem umas com outras. A mistura molecular propriamente dita acontece no menor nível deste espectro, sua intensidade depende do valor local do gradiente de escalar. De modo geral, estas estruturas são distribuídas no espaço e no tempo de forma não uniforme, uma vez que o valor do gradiente escalar também flutua fortemente de uma estrutura para outra. Deste modo, o processo de mistura apresenta características intermitentes (Soulard, 2005).

## 4.2

### Propriedades Desejáveis dos Modelos de Mistura

Antes de apresentar os modelos de mistura, serão estabelecidas algumas restrições que estes modelos devem atender. Algumas destas podem ser deduzidas das equações de conservação. As demais provêm de resultados da DNS e de observações experimentais (Pope 2000). O trabalho de Subramaniam e Pope (1998) apresenta em detalhe uma discussão das propriedades desejáveis dos modelos de mistura, resumidos a seguir.

### 4.2.1

#### Conservação da Média

Para um número de Reynolds elevado, o valor da média do escalar  $\langle \phi \rangle$  não é diretamente afetado pelo processo de mistura. Para demonstrar esta restrição, considere-se a equação de transporte do escalar inerte  $\phi$  em presença de um campo de velocidade turbulenta  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$  no caso de densidade constante,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (4-6)$$

A evolução da composição média do escalar  $\langle \phi \rangle$ , é dada por

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \phi' \rangle}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2 \langle \phi \rangle}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (4-7)$$

onde o termo  $\langle u_j \phi' \rangle$  é chamado fluxo turbulento do escalar. Este termo é o principal responsável da mistura rápida observada em escoamentos turbulentos. Note-se que, para elevados número de Reynolds, o lado direito da Eq. (4-7) é desprezível em relação aos demais termos desta equação. Por outro lado, a equação de transporte da PDF conjunta de  $\Phi$  (Eq. 3-20), pode ser multiplicada pela variável  $\psi$  e integrada no espaço amostral  $\Psi = [\mathbf{V}, \psi]$  para se obter,

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \phi' \rangle}{\partial x_j} = \langle \Theta \rangle, \quad (4-8)$$

onde  $\langle \Theta \rangle$  representa os termo do transporte molecular. Note-se que foi utilizada a hipótese de um escalar simples e inerte. Levando em conta a similitude das equações (4-7) e (4-8), verifica-se que,

$$\langle \Theta \rangle = 0. \quad (4-9)$$

No caso em que o escalar passivo e inerte encontra-se submetido a um campo turbulento homogêneo de velocidade e escalar, isto é, na ausência de gradientes dos valores médios da velocidade  $\langle \mathbf{U} \rangle$  e do escalar  $\langle \phi \rangle$ , e, considerando um sistema de coordenadas escolhido de tal forma que  $\langle \mathbf{U} \rangle = 0$ , tem-se

$$\frac{d \langle \phi \rangle}{dt} = 0, \quad (4-10)$$

ou seja, um modelo de mistura não deve afetar o valor da média do campo escalar.

### 4.2.2

#### Decaimento da Variância

Os modelos de mistura devem ser capazes de representar redução das heterogeneidades da distribuição do escalar ao longo do tempo. Para este fim,

será mostrado aqui que o modelo deve conter informações referentes à taxa de dissipação do escalar,  $\varepsilon_\phi$ . A equação que representa a evolução da variância das flutuações no tempo pode ser obtida ao multiplicar a Eq. (4-6) por  $\phi$  e aplicando-se em seguida o operador da média e a hipótese da homogeneidade de  $\mathbf{U}$  e de  $\phi$ .

$$\frac{d\sigma^2}{dt} = \frac{d\langle\phi'^2\rangle}{dt} = -2\langle\varepsilon_\phi\rangle, \quad (4-11)$$

onde,  $\varepsilon_\phi$  é dado pela Eq. (4-3). Note-se que, uma vez que o valor da taxa de dissipação escalar sempre é positivo, a variância do escalar,  $\sigma^2 = \langle\phi'^2\rangle$ , sempre diminuirá com o tempo (Dopazo, 1994).

### 4.2.3 Delimitação

Os campos escalares considerados nos escoamentos turbulentos reativos são, em geral, delimitados (Pope, 1985). Por exemplo, seja  $\phi$  a variável da fração mássica de uma espécie química, cujos valores possíveis devem encontrar-se entre 0 e 1. Esta região restrita constitui o espaço amostral do campo escalar.

Um modelo de mistura que leve a campos escalares fora da região permissível pode violar fundamentos físico-químicos, como a estequiometria e o balanço de massa (Fox, 2003). Nos casos que envolvem um conjunto de escalares, os limites da região permissível podem ser complicados e dependentes do tempo. Os primeiros modelos de mistura baseados na equação de Langevin (Valiño e Dopazo, 1990) apresentam dificuldades com respeito a esta restrição. A fim de garantir a delimitação, o coeficiente de difusão do modelo deve ser zero nos limites permissíveis do escalar e, simultaneamente, seu coeficiente de deriva deve “apontar” para o interior da região permissível.

### 4.2.4 Linearidade e Independência

A equação de transporte de um conjunto de escalares em presença de um campo turbulento, Eq. (3-12), é linear com respeito a estes campos escalares somente se o coeficiente de difusão for idêntico para todos os campos escalares,  $\Gamma_\alpha = \Gamma$ . Isto traz como consequência que uma transformação linear aplicada aos escalares passivos não modifica a equação da evolução destes escalares transformados. Um modelo de mistura deve preservar a propriedade de linearidade.

Além disso, a média de  $K$  escalares passivos não deve ser afetada pela inclusão de um  $(K+1)$ -ésimo escalar, pois um modelo de mistura deve preservar

o princípio de independência (Soulard, 2005). Cabe resaltar que estes critérios de linearidade e independência são válidos para escalares inertes que possuem coeficientes de difusão idênticos.

#### 4.2.5

##### Relaxação para uma Gaussiana

O campo escalar  $\phi$  é uma propriedade macroscópica do fluido cuja distribuição é controlada pelas grandes escalas do movimento, não sendo afetado pela intermitência das pequenas escalas. Como consequência deste fato, acredita-se que a PDF de um campo escalar inerte deve evoluir assintoticamente para uma forma Gaussiana, a qual é independente das condições iniciais. De fato, evidências experimentais (Warhaft e Lumley, 1978) e de Simulação Numérica Direta DNS (Eswaran e Pope, 1988) confirmam esta suposição.

Porém, experimentos realizados nos anos 90 mostraram que a PDF pode exibir um comportamento não Gaussiano. Os experimentos de Majda e Kramer (1999) e a Simulação Numérica Direta (DNS) de Jaber *et al.* (1996) demonstram a existência de um decréscimo da PDF mais lento que o Gaussiano para grandes valores das flutuações do escalar. Assim, a PDF apresenta extremidades mais alongadas do que a Gaussiana. Este comportamento foi atribuído à presença das grandes escalas, também conhecido como *intermitência das grandes escalas*.

Assim, devido à intermitência das grandes escalas, a tendência da PDF para uma Gaussiana não aparenta ser uma característica intrínseca do processo da mistura (Soulard, 2005), e não deveria ser restrição imposta aos modelos de mistura. Este ponto controverso ainda não foi esclarecido.

#### 4.2.6

##### Localidade

Uma partícula de fluido deve se misturar com partículas de fluido no espaço físico e no espaço de fase do escalar. Porém, diversos modelos de mistura existentes não são locais no espaço do escalar. O não respeito a esta restrição pode fazer com que, durante a mistura, partículas cruzem a zona de reação (Subramaniam e Pope, 1998). Como consequência, a taxa de reação não será corretamente prevista, por exemplo, no caso de chamadas de difusão.

#### 4.2.7

##### Dependência das Escalas de Comprimento do Campo Escalar

O trabalho experimental de Warhaft e Lumley (1978), mostra que a queda da variância, para o caso de um escalar passivo inerte submetido a um

campo turbulento homogêneo e isotrópico, possui uma dependência das escalas de comprimento do campo escalar. Os resultados da Simulação Numérica Direta (DNS) de Eswaran e Pope (1988), também exibem esta dependência.

Uma conclusão importante destes trabalhos é que, enquanto a escala de comprimento inicial do campo escalar em análise for pequena, o fenômeno difusivo na mistura se desenvolve mais rápido, o que faz com que a variância do escalar decaia rapidamente. Este efeito só pode ser observado caso o modelo de mistura represente as escalas de comprimento associadas ao campo escalar (Subramaniam e Pope, 1998).

Uma vez que, a taxa de dissipação escalar controla o decaimento da variância do escalar, um modelo adequado da taxa da dissipação do escalar é crucial para a correta predição da forma da PDF de um campo escalar.

### 4.3

#### Caracterização e Evolução da PDF de um Campo Escalar Inerte

Para fins de comparação entre os diferentes modelos de mistura, será considerado um campo turbulento de velocidade estatisticamente homogêneo,  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ , que permanece inalterado com o tempo. Seja  $\phi(\mathbf{x}, t)$  um campo simples de um escalar inerte submetido a este escoamento turbulento homogêneo e isotrópico, e seja  $P_\phi(\psi; t)$  a PDF de  $\phi$ . Neste caso, a PDF evolui no tempo devido ao efeito da mistura molecular, tal como descrito pela Eq. (4-1). Para avaliar o desempenho de diferentes modelos de mistura em ausência de reação química, serão utilizados momentos estatísticos.

A média de um campo escalar,  $\langle \phi \rangle$ , é definida como

$$\mu(t) = \langle \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi P_\phi(\psi; t) d\psi, \quad (4-12)$$

enquanto que a variância,  $\sigma^2$ , é

$$\sigma^2(t) = \langle \phi'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \langle \phi \rangle)^2 P_\phi(\psi; t) d\psi. \quad (4-13)$$

De forma análoga, o  $m$ -ésimo momento centrado,  $\mu_m(t)$ , é dado por

$$\mu_m(t) = \langle \phi'^m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \langle \phi \rangle)^m P_\phi(\psi; t) d\psi. \quad (4-14)$$

Um parâmetro importante na avaliação dos modelos de mistura é a *Curtose*,  $S_4$ , o qual mede o grau de achatamento de uma distribuição. Este parâmetro pode ser definido como sendo a razão entre o quarto momento centrado e o quadrado da variância

$$S_4 = \frac{\mu_4}{(\sigma^2)^2} = \frac{\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^4 \rangle}{\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle^2}. \quad (4-15)$$

De modo análogo, define-se a *Hiper-curtose*,  $S_6$ , como sendo a razão entre o sexto momento centrado e o cubo da variância.

$$S_6 = \frac{\mu_6}{(\sigma^2)^3} = \frac{\langle(\phi - \langle\phi\rangle)^6\rangle}{\langle(\phi - \langle\phi\rangle)^2\rangle^3}. \quad (4-16)$$

No caso de uma distribuição Gaussiana tem-se  $S_4 = 3$  e  $S_6 = 15$  (Pope, 1982). Assim, se os valores calculados de  $S_4$  e  $S_6$  por um modelo de mistura, no caso de um campo escalar inerte submetido a um campo turbulento isotrópico, não tendam assintoticamente a estes valores, tem-se uma indicação de inadequação do modelo (Pope, 1982).

Neste estudo, duas condições iniciais são consideradas para a PDF, as quais procuram representar uma mistura binária. A primeira condição inicial clássica, corresponde a campos escalares completamente segregados, isto é

$$P_\phi(\psi; 0) = p_0\delta(\psi) + p_1\delta(\psi - 1). \quad (4-17)$$

Nesta equação,  $p_0$  e  $p_1$  representam respectivamente as probabilidades de encontrar  $\phi = 0$  e  $\phi = 1$  no volume considerado. Devido à condição de normalização da PDF, tem-se que  $p_0 + p_1 = 1$ . Por simplicidade, e sem perda de generalidade, será utilizado que  $p_0 = p_1 = \langle\phi(\mathbf{x}, 0)\rangle = 1/2$ .

No presente caso de uma mistura binária homogênea, a média do escalar permanece constante, ou seja,  $\langle\phi(\mathbf{x}, t)\rangle = \langle\phi(\mathbf{x}, 0)\rangle = p_1$ . Além disto, a variância inicial do escalar é de  $\sigma^2(0) = \langle\phi'^2(\mathbf{x}, 0)\rangle = p_1(1 - p_1)$ . Note-se que, segundo a Eq. (4-11), a variância tende assintoticamente para zero, isto é  $\sigma^2(t \rightarrow \infty) = \langle\phi'^2(\mathbf{x}, \infty)\rangle = 0$ , o que tem por consequência

$$P_\phi(\psi; \infty) = \delta(\psi - p_1). \quad (4-18)$$

A outra PDF que será utilizada como condição inicial para simulação de uma mistura binária homogênea de um escalar inerte, é a distribuição do tipo Beta (Heinz, 2003),

$$P_\phi(\psi; 0) = \frac{1}{\mathbf{B}(\alpha, \beta)}\psi^{\alpha-1}(1 - \psi)^{\beta-1}, \quad (4-19)$$

onde  $\mathbf{B}(\alpha, \beta)$ , é chamada função *Beta*

$$\mathbf{B}(\alpha, \beta) = \int_0^1 s^{\alpha-1}(1 - s)^{\beta-1} ds. \quad (4-20)$$

Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  estão relacionados com a média e a variância da PDF pelas seguintes expressões:

$$\alpha = \langle\phi\rangle \left[ \frac{\langle\phi\rangle(1 - \langle\phi\rangle)}{\sigma^2} - 1 \right]. \quad (4-21)$$

$$\beta = (1 - \langle\phi\rangle) \left[ \frac{\langle\phi\rangle(1 - \langle\phi\rangle)}{\sigma^2} - 1 \right]. \quad (4-22)$$

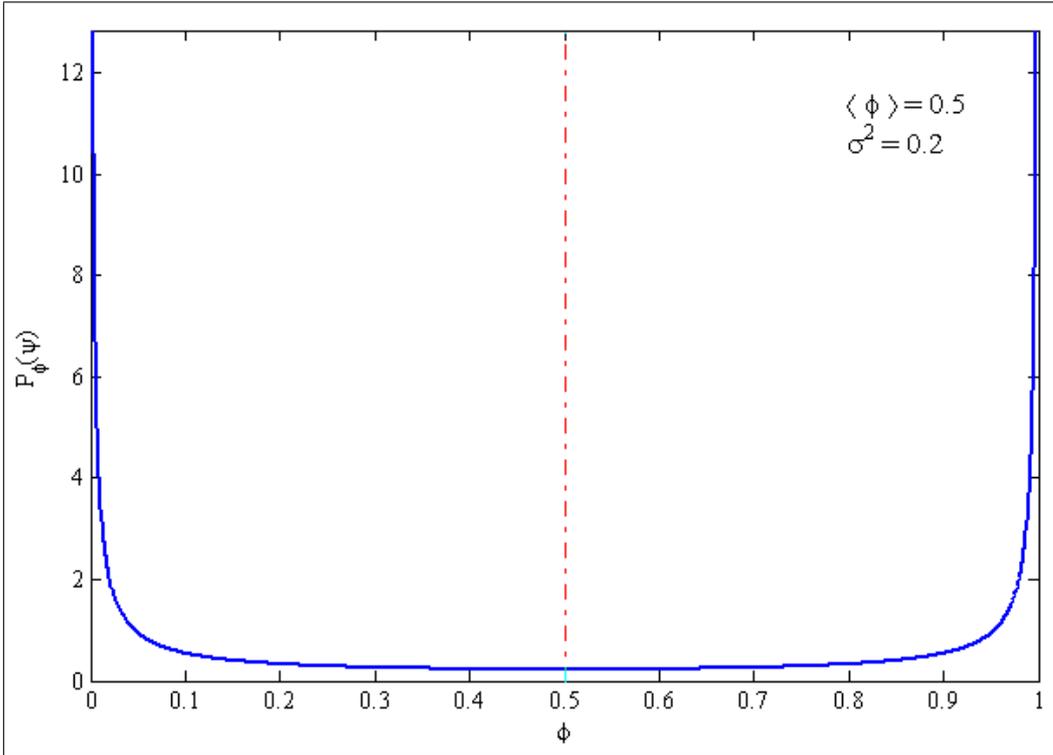


Figura 4.1: PDF inicial do campo escalar  $\phi$  como uma distribuição Beta para  $\langle \phi \rangle = 0,5$  e  $\sigma^2 = 0,2$ .

A figura 4.1 mostra uma PDF do tipo Beta para valores escolhidos de  $\langle \phi \rangle$  e  $\sigma^2$ . Partindo desta condição inicial, a evolução da PDF do escalar inerte devida à mistura será examinado no Cap. 6.

Os modelos de mistura considerados neste estudo requerem a especificação da frequência média do escalar  $\langle \omega_\phi \rangle$ , a qual é usualmente relacionada à taxa de dissipação escalar média  $\langle \varepsilon_\phi \rangle$ , como parâmetro importante na evolução temporal da PDF,

$$\langle \omega_\phi \rangle = \frac{1}{\tau_m} \equiv \frac{\langle \varepsilon_\phi \rangle}{\sigma^2} = \frac{\langle \varepsilon_\phi \rangle}{\langle \phi'^2 \rangle}, \quad (4-23)$$

onde  $\tau_m$  é a escala do tempo característico do escalar, também chamada escala do tempo característico da mistura. Spalding (1971), propôs que as escalas de tempo turbulento de velocidade,  $\tau_t$ , e de um escalar,  $\tau_m$ , são proporcionais, isto é,

$$\tau_m = \frac{\tau_t}{C_\phi}, \quad (4-24)$$

no âmbito de modelo  $k - \varepsilon$  para turbulência,

$$\langle \omega_\phi \rangle = C_\phi \langle \omega \rangle = C_\phi \frac{\langle \varepsilon \rangle}{k}, \quad (4-25)$$

onde  $\langle \omega \rangle$  é a frequência turbulenta do campo de velocidade e  $C_\phi$  é uma constante empírica, cujo valor habitual é 1. Note-se que os trabalhos de

Béguier *et al.* (1978), Warhaft e Lumley (1978) e Eswaran e Pope (1988) mostram claramente que  $C_\phi$  não é uma constante universal.

Substituindo a Eq. (4-23) na Eq. (4-11), obtém-se nova equação para a taxa de decaimento da variância

$$\frac{d\langle\phi'^2\rangle}{dt} = -2\langle\phi'^2\rangle\langle\omega_\phi\rangle. \quad (4-26)$$

Dado um valor inicial  $\langle\phi'^2(0)\rangle$ , e no caso em que  $\langle\omega_\phi\rangle$  é constante, a evolução da variância apresenta a solução exata

$$\langle\phi'^2(t)\rangle = \langle\phi'^2(0)\rangle \exp[-2\langle\omega_\phi\rangle t]. \quad (4-27)$$

Desta equação, percebe-se que a variância apresenta um decaimento do tipo exponencial, o qual leva a valores nulos apenas quando  $t \rightarrow \infty$ . Se a PDF  $P_\phi(\psi, t)$  de um campo escalar  $\phi$  for uma Gaussiana,

$$P_\phi(\psi; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle\phi'^2\rangle}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(\psi - \langle\phi\rangle)^2}{\langle\phi'^2\rangle}\right]. \quad (4-28)$$

Então, esta será integralmente determinada pela média  $\langle\phi\rangle$ , e pela variância  $\langle\phi'^2\rangle$  em qualquer instante.

Os diferentes modelos estudados neste trabalho serão analisados de acordo com a forma da PDF obtida e seus momentos estatísticos. Acredita-se que um bom modelo de mistura deve levar a uma distribuição contínua que tende assintoticamente para uma Gaussiana quando o tempo tende a infinito.

#### 4.4

#### Modelos de Mistura Clássicos

Desde que Hill (1969) derivou pela primeira vez a equação de transporte da PDF da concentração de espécies para um escoamento turbulento submetido a uma reação química irreversível, ficou clara a necessidade de fornecer modelos que representem o termo aberto do transporte difusivo (micro-mistura).

Os primeiros modelos propostos, como por exemplo, o de *interação entre partículas* Curl (1963); Dopazo (1979); Janicka, *et al.* (1979); Pope (1982); ou os modelos do tipo de *Relaxação entorno à média* Dopazo e O'Brien (1974); Valiño e Dopazo (1990); Valiño e Dopazo (1991); ainda são utilizados em diversas simulações de escoamentos turbulentos reativos. Estes modelos clássicos foram desenvolvidos a partir de duas abordagens teóricas equivalentes. Na primeira abordagem, modelos de mistura do tipo estocástico que descrevem a combustão em um escoamento turbulento estatisticamente homogêneo foram formulados por Flagan e Appleton (1974), Pratt (1979), Pope (1982), Valiño e Dopazo (1990) e Valiño e Dopazo (1991). Na segunda, as equações di-

ferenciais que descrevem a evolução da PDF das concentrações dos reagentes, foram estudados por Dopazo e O'Brien (1974), Dopazo (1979), Janicka, *et al.* (1979) e Pope (1981a).

Neste trabalho só serão discutidos os modelos de mistura clássicos mais simples, estes são o modelo de Curl (CM), o modelo de Curl Modificado (CMC) e o modelo de Interação pela troca com a média (IEM).

#### 4.4.1

##### Modelo de Curl ou de Coalescência e Dispersão

O primeiro e o mais simples modelo de mistura é o modelo de Curl (CM), também chamado modelo de Coalescência e Dispersão. Neste modelo, a PDF  $P_\phi(\psi; t)$ , é representada por um conjunto de  $N_p$  partículas estocásticas. A média,  $\langle Q(\phi) \rangle$ , de qualquer função bem comportada do campo do escalar  $\phi$  pode ser obtida mediante a seguinte equação,

$$\langle Q(\phi) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Q(\psi) P_\phi(\psi; t) d\psi, \quad (4-29)$$

a qual pode ser aproximada, quando se utiliza uma técnica Monte-Carlo, por

$$\langle Q(\phi) \rangle \approx \frac{1}{N_p} \sum_{n=1}^{N_p} Q(\phi^{(n)}). \quad (4-30)$$

A principal fraqueza da simulação estocástica pelo método de Monte-Carlo é que o erro estatístico envolvido nesta aproximação é proporcional a  $N_p^{-1/2}$ . Assim, um grande número de partículas é necessário para atingir pequenos valores deste erro (Peters, 2000).

No âmbito do modelo CM, o processo de mistura é representado por uma seqüência de passos de tempo  $\Delta t$ , ( $\Delta t \langle \omega_\phi \rangle \ll 1$ ), onde pares de partículas são aleatoriamente escolhidos do conjunto de partículas que representa o domínio em análise. O número de pares de partículas escolhidos, é igual a  $N_e = \beta \Delta t \langle \omega_\phi \rangle N_p$ , onde  $\beta = 2$  é uma constante que garante a condição de que  $\langle \phi'^2 \rangle$  decai a taxa  $\langle \omega_\phi \rangle$ , (Pope, 1982). Dados um par de partículas  $n$  e  $m$ ,

$$\phi^{(n)}(t) = \phi_a, \quad \phi^{(m)}(t) = \phi_b. \quad (4-31)$$

No modelo CM, a mistura é realizada pela troca dos valores de  $\phi$

$$\phi^{(n)}(t + \Delta t) = \phi_a^*, \quad \phi^{(m)}(t + \Delta t) = \phi_b^*, \quad (4-32)$$

onde,

$$\phi_a^* = \phi_b^* = \frac{1}{2} (\phi_a + \phi_b). \quad (4-33)$$

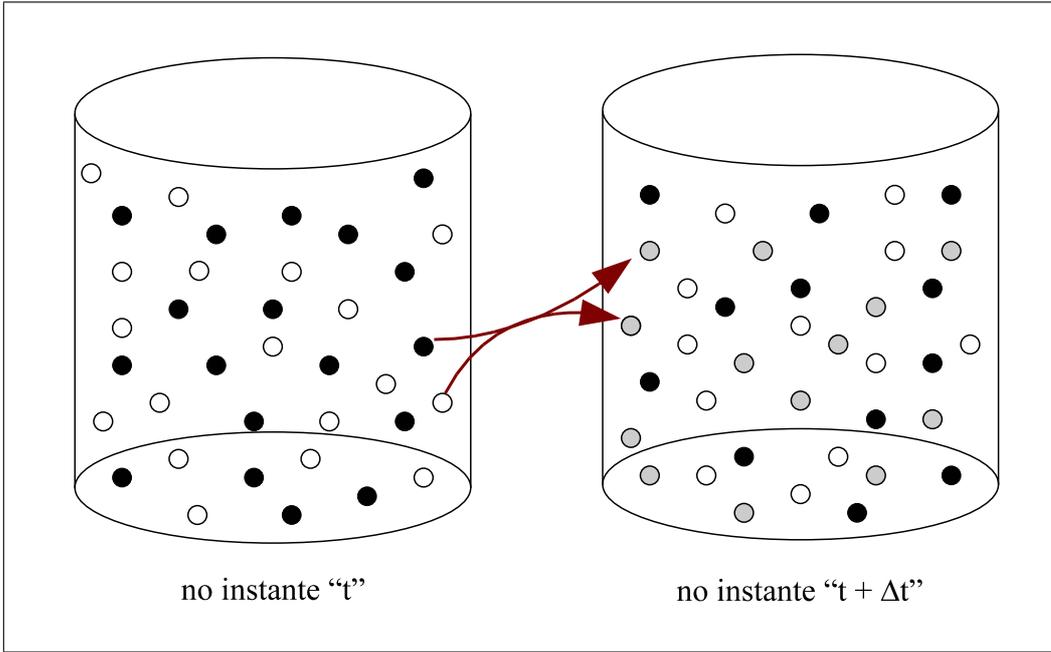


Figura 4.2: Ilustração do tempo de funcionamento do modelo de mistura de Coalescência e Redispersão (CD) ou modelo de Curl.

Este processo de mistura é realizado para cada par de partículas escolhidas. Para as partículas não escolhidas, os valores de  $\phi$  permanecem inalterados.

Cabe notar que este modelo de mistura preserva o valor médio

$$\frac{1}{2}(\phi_a^* + \phi_b^*) = \frac{1}{2}(\phi_a + \phi_b), \quad (4-34)$$

enquanto que a variância diminui com o tempo

$$\phi_a^{*2} + \phi_b^{*2} = \phi_a^2 + \phi_b^2 - \frac{1}{2}(\phi_a - \phi_b)^2 \leq \phi_a^2 + \phi_b^2. \quad (4-35)$$

Uma deficiência importante deste modelo pode ser constatada no caso em que a PDF inicial é composta por funções delta. Neste caso o número de funções delta tende ao infinito com o tempo, e uma distribuição contínua nunca é atingida, o que é claramente inaceitável. Entretanto, este modelo serve de base para o desenvolvimento de modelos de mistura mais realistas.

#### 4.4.2 Modelo de Curl Modificado

Dopazo (1979) e Janicka, *et al.* (1979), independentemente, sugeriram uma modificação para o modelo de Curl que resulta em uma PDF contínua, que consiste em substituir a Eq. (4-33) por

$$\phi_a^* = (1 - \alpha)\phi_a + \frac{1}{2}\alpha(\phi_a + \phi_b), \quad (4-36)$$

$$\phi_b^* = (1 - \alpha)\phi_b + \frac{1}{2}\alpha(\phi_a + \phi_b), \quad (4-37)$$

onde o papel do parâmetro  $\alpha$  controla o grau de mistura. Note-se que para  $\alpha = 0$  a mistura não acontece e que com  $\alpha = 1$  o modelo de Curl é obtido. Qualquer que seja o valor fixo de  $\alpha$  ( $0 < \alpha < 1$ ) subsiste o problema da discontinuidade que apresenta o modelo simples de Curl (CM) quanto a PDF inicial é uma função composta de deltas de Dirac. Porém, se  $\alpha$  for prescrito sob a forma de uma variável aleatória com uma PDF contínua,  $A(\alpha)$ , então o modelo de Curl modificado resulta em PDF's contínuas (Pope, 1982).

A escolha mais simples da PDF  $A(\alpha)$  sugerida por Dopazo (1979) e Janicka, *et al.* (1979), é

$$A(\alpha) = 1. \tag{4-38}$$

Note-se que o modelo de Curl corresponde a  $A(\alpha) = \delta(1 - \alpha)$ . Pope (1982) propôs relações funcionais para  $A(\alpha)$  baseadas na descrição da evolução da idade (*age-biased*) das partículas. Estas variantes não serão abordadas neste trabalho.

### 4.4.3 Modelo IEM/LMSE

O modelo IEM foi proposto independentemente em diferentes contextos por diversos autores (Soulard, 2005). De um lado, Villermaux e Devillon, (1972) utilizaram o modelo IEM para a modelização de reatores homogêneos. Por outro lado, Dopazo e O'Brien (1974) propuseram este modelo para a substituição do termo difusivo presente na equação de transporte de uma PDF conjunta do escalar.

O modelo IEM assume uma relaxação linear do escalar para seu valor médio

$$\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle = -\langle \omega_\phi \rangle (\psi - \langle \phi \rangle), \tag{4-39}$$

que, quando substituída na Eq. (4-1), resulta na equação de transporte da PDF correspondente ao modelo IEM:

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \omega_\phi \rangle (\psi - \langle \phi \rangle) P_\phi(\psi; t)]. \tag{4-40}$$

O comportamento deste modelo pode ser melhor apreciado no contexto Lagrangeano, isto é, seguindo a trajetória de uma partícula de fluido. O valor do escalar,  $\phi$ , evolui de acordo com a lei da relaxação determinística (Gardiner, 1990):

$$d\phi = -\langle \omega_\phi \rangle (\phi - \langle \phi \rangle) dt. \tag{4-41}$$

No espaço amostral do escalar  $\psi$ , as partículas se deslocam em direção à média  $\langle\phi\rangle$  com uma velocidade proporcional à sua distância de  $\langle\phi\rangle$  neste espaço amostral. Portanto, as partículas convergem para a posição  $\psi = \langle\phi\rangle$  quando  $t \rightarrow \infty$ .

Este modelo é muito utilizado em simulações que envolvem combustão em escoamento turbulento, devido à sua simplicidade e ao baixo custo computacional. Porém, este modelo não inclui nenhuma informação correspondente aos gradientes escalares, o que traz como consequência que a PDF sempre mantém sua forma original (Pope, 1985).

## 4.5

### Modelos de Mistura Recentes

A necessidade de modelar a taxa de dissipação do escalar,  $\varepsilon_\phi$ , e a interação complexa existente entre os campos turbulentos de velocidade e de escalar dificultam a descrição do processo de micro-mistura. Esta interação leva à existência de estruturas escalares distribuídas em um amplo espectro de escalas, as quais interagem umas com as outras.

Com o intento de melhorar a descrição física do fenômeno difusivo-dissipativo da mistura, Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) formularam três novos modelos de micro-mistura, estes são o modelo de Langevin (LM), o modelo IEM Estendido (EIEM) e o modelo de Langevin Estendido (ELM).

#### 4.5.1

##### Modelo de Langevin

O modelo de Langevin é baseado na soma de dois termos, um termo determinístico o qual é equivalente ao modelo IEM, e um termo estocástico associado a um processo Wiener. Pope (1985), propôs pela primeira vez um modelo de mistura do tipo Langevin aplicado a campos escalares, o qual atende à maioria das propriedades desejáveis que um modelo de mistura deve possuir, em particular no que diz respeito à obtenção de PDFs que tendem assintoticamente para uma Gaussian:

$$d\phi = G\langle\omega_\phi\rangle(\phi - \langle\phi\rangle)dt + \sqrt{B\langle\omega_\phi\rangle\langle\phi'^2\rangle}dW. \quad (4-42)$$

Porém, o modelo proposto por Pope (1985) viola o princípio da delimitação. Nesta equação  $G$  e  $B$  são as constantes do modelo e  $dW$  representa o processo Wiener. O segundo termo do lado direito desta equação acarreta uma mudança aleatória de  $\phi$  com média zero e variância  $B\langle\omega_\phi\rangle\langle\phi'^2\rangle dt$ .

Este modelo procura representar a transferência da variância do escalar devida às grandes escalas através do termo determinístico, e a dissipação

escalar nas pequenas escalas através do termo estocástico.

O modelo do tipo Langevin proposto por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) pode ser representado por uma combinação das Eqs. (4-1) e (4-4):

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = - [1 + r_0(t)] \frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)] + r_0(t) \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} [\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)], \quad (4-43)$$

que respeita a propriedade da delimitação. Na Eq. (4-43),  $r_0(t)$  é um parâmetro positivo arbitrário. Esta equação possui um termo difusivo no qual intervém a taxa de dissipação condicionada do escalar  $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$ , e um termo de deriva no qual aparece o laplaciano condicionado do escalar  $\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle$ . A equação diferencial estocástica equivalente é (Gardiner, 1990):

$$d\phi = (1 + r_0(t)) \langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle dt + \sqrt{2r_0(t) \langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle} dW. \quad (4-44)$$

Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) utilizaram o modelo IEM para  $\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle$  e um modelo algébrico para  $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$

$$\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle = -\langle \omega_\phi \rangle (\psi - \langle \phi \rangle), \quad (4-45)$$

$$\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle = \langle \omega_\phi \rangle \frac{\sigma^2}{\sigma_M^2 - \sigma^2} \psi (1 - \psi), \quad (4-46)$$

onde  $\sigma_M^2$  é a variância máxima do campo escalar  $\phi$ . A propriedade de delimitação é garantida devido à função limitante  $\psi(1 - \psi)$ . Esta função limitante, facilmente justificada no caso de um escalar simples (Soulard *et al.*, 2004), ainda não foi estendida para casos multi-escalares. Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) definem

$$r_0(t) = d_0 \frac{\sigma_M^2 - \sigma^2}{\sigma_M^2}, \quad (4-47)$$

o que resulta em

$$d\phi = - \left( 1 + d_0 \frac{\sigma_M^2 - \sigma^2}{\sigma_M^2} \right) \langle \omega_\phi \rangle (\phi - \langle \phi \rangle) dt + \sqrt{2d_0 \frac{\sigma^2}{\sigma_M^2} \langle \omega_\phi \rangle \phi (1 - \phi)} dW, \quad (4-48)$$

ou de, forma compacta,

$$d\phi = -a \langle \omega_\phi \rangle (\phi - \langle \phi \rangle) dt + \sqrt{2b \langle \omega_\phi \rangle \phi (1 - \phi)} dW. \quad (4-49)$$

onde

$$a = 1 + d_0 \left( \frac{\sigma_M^2 - \sigma^2}{\sigma_M^2} \right). \quad (4-50)$$

$$b = d_0 \frac{\sigma^2}{\sigma_M^2}. \quad (4-51)$$

Note-se que o valor de  $d_0$  controla a relaxação da PDF, para  $d_0 = 0$  o modelo IEM é recuperado.

A equação da evolução da variância, que pode ser derivada da Eq. (4-49), demonstra que esta é função monótona decrescente do tempo que não depende da escolha de  $d_0$ . Uma vez que  $r_0(t = 0) = 0$  e  $r_0(t \rightarrow \infty) = d_0$ , o modelo de Langevin (LM) proposto por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) tende para o modelo IEM para tempos infinitamente longos, garantindo assim a invariância da forma assintótica da PDF.

#### 4.5.2 Modelos IEM Estendido e de Langevin Estendido

Os modelos IEM estendido (EIEM) e Langevin estendido (ELM) também foram propostos por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Estes modelos tem como base os modelos IEM e Langevin. Uma distribuição de frequência de mistura é introduzida de modo a representar o espectro de frequências próprias de um escoamento turbulento (Soulard, 2005). Para este fim, considera-se um processo estocástico intermitente,  $\omega_\phi$ , de modo que cada partícula de fluido possui sua própria frequência e comporta-se como se pertencesse a diferentes estruturas.

Nos modelos estendidos formulados por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001), o valor do escalar não relaxa para o valor médio global do escalar, mas sim para um escalar característico da estrutura turbulenta.

A evolução da concentração de uma partícula de fluido descrita pelo modelo EIEM é dada por

$$d\phi = -\omega_\phi (\phi - \langle \phi | \omega_\phi \rangle) dt. \quad (4-52)$$

Este modelo possui duas diferenças com respeito ao modelo IEM

- A frequência de mistura média,  $\langle \omega_\phi \rangle$ , substituída por um processo estocástico,  $\omega_\phi$ , de modo que uma faixa de escalas do tempo é levada em consideração durante o processo de mistura.
- O escalar médio  $\langle \phi \rangle$ , é substituído por sua média condicionada  $\langle \phi | \omega_\phi \rangle$  o que garante a conservação das média,  $\langle \phi \rangle$ .

Aplicando-se o operador média na Eq. (4-52), tem-se

$$d\langle \phi \rangle = -\langle \omega_\phi \phi \rangle dt + \langle \omega_\phi \langle \phi | \omega_\phi \rangle \rangle dt = 0, \quad (4-53)$$

pois, de acordo com a fórmula de Bayes,  $\langle \omega_\phi \phi \rangle = \langle \omega_\phi \langle \phi | \omega_\phi \rangle \rangle$ , o que justifica a substituição de  $\langle \phi | \omega_\phi \rangle$  por  $\langle \phi \rangle$ .

O modelo de Langevin estendido (ELM), também resulta da substituição, na Eq. (4-49), da frequência média pelo seu valor instantâneo, o que leva a

$$d\phi = -a\omega_\phi (\phi - \langle \phi | \omega_\phi \rangle) dt + \sqrt{2b\omega_\phi \phi (1 - \phi)} dW. \quad (4-54)$$

$$a = 1 + d_0 \left( \frac{\sigma_{M^*}^2 - \sigma_{\omega_\phi}^2}{\sigma_{M^*}^2} \right). \quad (4-55)$$

$$b = d_0 \frac{\sigma_{\omega_\phi}^2}{\sigma_{M^*}^2}. \quad (4-56)$$

Pode ser demonstrado que a variância,  $\sigma_{\omega_\phi}^2$ , é representada por

$$\sigma_{\omega_\phi}^2 = \langle \phi^2 | \omega_\phi \rangle - \langle \phi | \omega_\phi \rangle^2, \quad (4-57)$$

onde, a variância máxima,  $\sigma_{M^*}^2$ , é definida como

$$\sigma_{M^*}^2 = \langle \phi | \omega_\phi \rangle (1 - \langle \phi | \omega_\phi \rangle). \quad (4-58)$$

A frequência de mistura estocástica,  $\omega_\phi$ , é característica de uma estrutura escalar. Um modelo que descreve a frequência da dissipação escalar instantânea é (Soulard *et al.*, 2004)

$$\omega_\phi = \frac{\varepsilon_\phi}{\sigma^2}, \quad (4-59)$$

onde  $\sigma^2$  representa a variância instantânea não condicionada que mede as flutuações do campo escalar. Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) propuseram utilizar um modelo no qual a frequência de mistura do escalar é proporcional à frequência turbulenta,  $\omega = \varepsilon/k$ :

$$\omega_\phi = \Omega\omega, \quad (4-60)$$

onde  $\Omega(t)$  é uma função que deve respeitar o decaimento da variância,  $\sigma^2$ , que ocorre em presença de turbulência homogênea. A função  $\Omega(t)$  é determinada ao comparar a Eq. (4-11), equação exata da queda da variância, com aquela obtida substituindo-se a Eq. (4-60) na Eq. (4-52), multiplicando o resultado por  $2(\phi - \langle \phi \rangle)$  e, finalmente, aplicando a média

$$\frac{d\langle \phi'^2 \rangle}{dt} = -2\Omega [\langle \omega \phi^2 \rangle - \langle \omega \phi \langle \phi | \omega \rangle \rangle] = -2\Omega \langle \omega (\langle \phi^2 | \omega \rangle - \langle \phi | \omega \rangle^2) \rangle. \quad (4-61)$$

Neste caso, a regra de Bayes permite escrever que  $\langle \omega \phi^2 \rangle = \langle \omega \langle \phi | \omega \rangle^2 \rangle$ . A comparação das equações (4-11) e (4-61) fornece

$$\Omega = \frac{\langle \varepsilon_\phi \rangle}{\langle \omega (\langle \phi^2 | \omega \rangle - \langle \phi | \omega \rangle^2) \rangle}. \quad (4-62)$$

O modelo de Langevin estendido (ELM) também utiliza esta definição de  $\Omega(t)$  (Soulard, 2005).

Finalmente, a frequência instantânea do campo de velocidade turbulento,  $\omega$ , também precisa ser modelada. Pope e Chen (1990), ao levar em consideração o comportamento intermitente da taxa de dissipação viscosa instantânea do campo de velocidade, aproximam  $\omega$  por uma distribuição Log-normal. Para este fim, define-se a variável aleatória  $\chi$  como

$$\chi(t) \equiv \ln[\varepsilon(t)/\langle\varepsilon\rangle] = \ln[\omega(t)/\langle\omega\rangle]. \quad (4-63)$$

Se  $\omega$  ou  $\varepsilon$  possuem distribuição Log-normal, então  $\chi$  é descrita por uma distribuição Normal. Desta forma, um modelo log-normal de  $\omega$  é obtido adotando-se um processo markoviano clássico do tipo Orstein-Uhlenbeck (Gardiner, 19990), para descrever  $\chi$ :

$$\omega = \langle\omega\rangle e^{\chi}, \quad (4-64)$$

$$d\chi = -\frac{\chi - m_1}{T_\chi} dt + \sqrt{\frac{2m_2}{T_\chi}} dW, \quad (4-65)$$

que é a formulação proposta por Pope e Chen (1990), onde  $W$  é um processo Wiener,  $m_1$  e  $m_2$  são, respectivamente, a média e a variância de  $\chi$ :

$$m_1 = \langle\chi\rangle, \quad (4-66)$$

$$m_2 = \langle(\chi - \langle\chi\rangle)^2\rangle, \quad (4-67)$$

e  $T_\chi$  é a escala de tempo integral de  $\chi$

$$T_\chi^{-1} = C_\chi \langle\omega\rangle, \quad (4-68)$$

e  $C_\chi$  é uma constante igual a 1.6 (Pope e Chen, 1990). Os cálculos de DNS realizados por Yeung e Pope (1989) em turbulência homogênea isotrópica sugerem que, para números de Reynolds moderados  $38 \leq Re_\lambda \leq 96$ , existe uma dependência de  $m_2$  com relação a  $Re_\lambda$

$$m_2 = 0,29 \ln Re_\lambda - 0,36, \quad (4-69)$$

onde  $Re_\lambda$  é o número de Reynolds baseado na escala de Taylor. Uma vez que  $\chi$  é uma variável aleatória distribuída normalmente, tem-se que

$$m_1 = -\frac{1}{2}m_2. \quad (4-70)$$

Desta forma, completa-se a formulação geral dos modelos de mistura IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) seguindo a abordagem

Lagrangeana. Uma forma simplificada para o modelo EIEM é obtida ao substituir a equação (4-60) na equação (4-52):

$$d\phi = -\Omega\omega(\phi - \langle\phi|\omega\rangle) dt. \quad (4-71)$$

De modo análogo, ao substituir a Eq. (4-60) na Eq. (4-54), obtém-se uma forma simplificada do modelo Langevin estendido (Sabel`nikov e Gorokhovski, 2001)

$$d\phi = -a\Omega\omega(\phi - \langle\phi|\omega\rangle) dt + \sqrt{2b\Omega\omega\phi(1-\phi)}dW, \quad (4-72)$$

onde  $a$  e  $b$  são

$$a = 1 + d_0 \frac{\langle\phi(1-\phi)|\omega\rangle}{\sigma_M^2}, \quad (4-73)$$

$$b = d_0 \frac{\langle\phi^2|\omega\rangle - \langle\phi|\omega\rangle^2}{\sigma_M^2}. \quad (4-74)$$

Note-se, da Eq.(4-72), que no caso em que  $d_0 = 0$ , o modelo IEM Estendido [Eq. (4-71)] é obtido. Utilizando técnicas estocásticas, é possível obter a equação da evolução da PDF conjunta  $P_{\phi,\chi}(\psi, \varphi; t)$  de  $\phi$  e  $\chi$  para os modelos estendidos EIEM e ELM. Porém, neste trabalho, a transformação para o referencial Euleriano será efetuada para o caso, mais geral, aquele que descreve o funcionamento de um PaSR.

Note-se que os três modelos de mistura propostos por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001), isto é, os modelos EIEM, LM e ELM, respeitam a propriedade da delimitação, propriedade crítica, em particular no caso de modelos do tipo de Langevin (LM e ELM) aplicados a campos escalares. Em consequência, uma descrição adequada é obtida do processo difusivo-dissipativo de micro-mistura, mais realista do que aquela obtida com o modelo IEM.

## 4.6

### O Reator Parcialmente Agitado

Nas seções precedentes, foi abordado o transporte turbulento de um escalar passivo, o qual é modificado pela presença de reações químicas. Nesta seção, serão descritos os principais aspectos do transporte de um escalar reativo no âmbito de um modelo de Reator Parcialmente Agitado (PaSR) no qual ocorre a combustão de uma mistura. Cabe lembrar que, no limite de uma mistura muito rápida o PaSR tende para um Reator Perfeitamente Agitado (*Partially Stirred Reactor, PSR*) e no limite de uma mistura muito lenta o PaSR tende para um processo reativo descrito por um Reator com escoamento tipo Pistão (*Plug Flow Reactor, PFR*) (Sabel`nikov e Figueira da Silva, 2002).

A formulação do PaSR será desenvolvida considerando como campo escalar,  $\phi$ , uma variável reativa denominada variável de progresso de reação,  $c$ , definida mais adiante.

#### 4.6.1 Equações Fundamentais da Cinética Química

Nesta seção será apresentada a formulação que descreve a cinética das reações químicas, e as hipóteses simplificadoras adotadas que permitem chegar à formulação do termo da produção química para uma reação única global, termo necessário na descrição do PaSR para um escalar reativo.

Considere-se um sistema químico composto de  $K$  espécies químicas reagindo através de  $M$  reações elementares

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{km} \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^K \nu''_{km} \mathcal{M}_k, \quad m = 1, \dots, M, \quad (4-75)$$

onde  $\mathcal{M}_k$  é o símbolo químico da espécie  $k$ ,  $\nu'_{km}$  e  $\nu''_{km}$  são os coeficientes estequiométricos da  $k$ -ésima espécie na  $m$ -ésima reação. A equação da conservação da massa é

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{km} W_k = \sum_{k=1}^K \nu''_{km} W_k, \quad m = 1, \dots, M, \quad (4-76)$$

onde,  $W_k$  é a massa molar da  $k$ -ésima espécie. A equação anterior, também se pode escrever de maneira seguinte

$$\sum_{k=1}^K \nu_{km} W_k = 0 \quad m = 1, \dots, M. \quad (4-77)$$

onde

$$\nu_{km} = \nu'_{km} - \nu''_{km}. \quad (4-78)$$

A taxa de produção da  $k$ -ésima espécie,  $S_k$ , é o resultado das soma das taxas de produção desta espécie,  $S_{km}$ , em cada uma das  $M$  reações

$$S_k = \sum_{m=1}^M S_{km} = W_k \sum_{m=1}^M \nu_{km} q_m, \quad k = 1, \dots, K, \quad (4-79)$$

onde  $q_m$  é a taxa da  $m$ -ésima reação. Somando todas a taxas de produção das  $K$  espécies, mostra-se que

$$\sum_{k=1}^K S_k = \sum_{k=1}^K \left[ W_k \sum_{m=1}^M \nu_{km} q_m \right] = \sum_{m=1}^M \left[ q_m \sum_{k=1}^K \nu_{km} W_k \right] = 0. \quad (4-80)$$

A taxa da  $m$ -ésima reação,  $q_m$ , é dada por

$$q_m = k_m^f \prod_{k=1}^K [X_k]^{\nu'_{km}} - k_m^r \prod_{k=1}^K [X_k]^{\nu''_{km}}. \quad (4-81)$$

Nesta equação  $[X_k]$  é a concentração da  $k$ -ésima espécie, enquanto que  $k_m^f$  e  $k_m^r$  são as constantes de reação direta e reversa da  $m$ -ésima reação respectivamente. As concentrações molares podem ser escritas como

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k} = \frac{\rho_k}{W_k} = \frac{\rho}{\bar{W}} X_k, \quad (4-82)$$

onde,  $Y_k$ ,  $X_k$ , e  $\rho_k$  representam, respectivamente, a fração mássica, a fração molar e a densidade parcial da  $k$ -ésima espécie, e  $\bar{W}$  é a massa molecular média. As quantidades  $k_m^f$  e  $k_m^r$  constituem um fator importante na modelagem dos processos químicos. e serão descritas mediante a utilização da lei empírica de Arrhenius:

$$k_m^f = A_m T^{\beta_m} \exp\left(-\frac{E_m}{RT}\right), \quad (4-83)$$

onde  $A_m$ ,  $\beta_m$  e  $E_m$  são conhecidos como a constante pré-exponencial, o expoente da temperatura e a energia de ativação da  $m$ -ésima reação. A constante  $k_m^r$  pode ser calculada a partir de  $k_m^f$  e da constante de equilíbrio de  $k$ -ésima reação elementar  $K_{p,m}$  (Poinot e Veynante, 2005).

#### 4.6.2 A taxa de produção química

Nesta sub-seção, será determinada a taxa de produção química adimensional para uma única reação global irreversível. Para isto, serão consideradas as seguintes hipóteses:

1. Reação de passo único ( $m = 1$ ) e irreversível ( $k_m^r = 0$ ), isto é,



onde  $C$  representa o combustível,  $O$  o oxidante,  $P$  os produtos de combustão, e  $r$  é a massa de oxidante necessária para reagir com uma unidade de massa de combustível.

2. O combustível  $C$  é o reagente minoritário, ou seja,  $[X_C] \ll [X_O]$ , o que implica em

$$Y_O = \frac{\dot{m}_O}{\dot{m}_O + \dot{m}_C} \approx 1 = cte. \quad (4-85)$$

3. A difusividade do combustível é igual à difusividade térmica da mistura, isto é,

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = 1.$$

4. O número de Mach é extremamente pequeno  $M_a \ll 1$ .  
5. O expoente de temperatura presente na lei de Arrhenius é nulo

$$\beta = 0. \quad (4-86)$$

Levando em conta estas hipóteses, a taxa da reação única global é

$$q = [X_C] [X_O] A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (4-87)$$

Utilizando as igualdades da Eq. (4-82) na Eq. (4-87), tem-se

$$q = \left(\frac{\rho}{W}\right)^2 X_C X_O A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (4-88)$$

O tempo característico da reação química é definido como

$$\tau_c = \left[\frac{\rho}{W} X_C|_o X_O|_o A \exp\left(-\frac{E}{RT_o}\right)\right]^{-1}. \quad (4-89)$$

Onde  $X_C|_o$ ,  $X_O|_o$  e  $T_o$ , são os valores iniciais, respectivamente, das frações molares de combustível e de oxidante e da temperatura. Combinando as Eqs. (4-88) e (4-89), tem-se

$$q = \frac{1}{\tau_c} \frac{X_C}{X_C|_o} \frac{X_O}{X_O|_o} \exp\left(-\frac{E}{RT} + \frac{E}{RT_o}\right). \quad (4-90)$$

Classicamente, define-se a variável de progresso da reação química como

$$c = 1 - \frac{X_C}{X_C|_o} = \frac{T - T_0}{T_{ad} - T_0}, \quad (4-91)$$

onde  $T$  é a temperatura,  $T_{ad}$  é a temperatura de combustão adiabática e  $T_0$  é a temperatura de entrada do reator. Note-se que  $c = 0$  corresponde aos gases não queimados e  $c = 1$  aos gases queimados.

Definindo o calor de reação reduzido,  $\alpha$ , e a energia de ativação reduzida,  $\beta$ , como

$$\alpha = \frac{T_{ad} - T_0}{T_0}, \quad (4-92)$$

$$\beta = \frac{E}{RT_0}, \quad (4-93)$$

e substituindo as Eqs. (4-85), (4-91), (4-92) e (4-93) na expressão (4-90), chega-se à seguinte expressão simplificada da taxa de progresso de uma reação única global

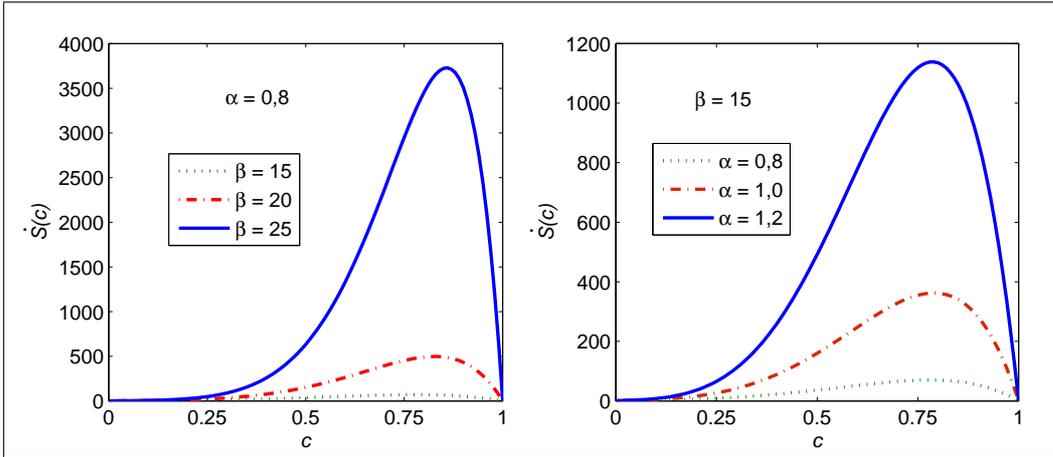


Figura 4.3: Taxa de produção adimensional  $\dot{S}(c)$  em função da variável de progresso da reação,  $c$ , para diferentes valores de energia de ativação reduzida,  $\beta$ , e calor de reação reduzido,  $\alpha$ .

$$q = \frac{1}{\tau_c} \frac{\rho}{\bar{W}} (1 - c) \exp\left(\beta \frac{c}{c + 1/\alpha}\right). \quad (4-94)$$

A taxa de produção química,  $S$ , relaciona-se com a taxa de reação única global,  $q$ , e a taxa de produção química adimensional  $\dot{S}$  pela seguinte relação

$$S(c) = \bar{W}q(c) = \frac{\rho}{\tau_c} \dot{S}(c), \quad (4-95)$$

onde,

$$\dot{S}(c) = (1 - c) \exp\left(\beta \frac{c}{c + 1/\alpha}\right). \quad (4-96)$$

Este termo químico adimensional,  $\dot{S}(c)$ , apresenta uma dependência fortemente não linear dos valores da energia de ativação reduzida,  $\beta$ , e do calor de reação reduzido,  $\alpha$ , tal como mostrado na figura 4.3.

### 4.6.3 Formulação Matemática do PaSR

Partindo da Eq. (3-30), considera-se como variável  $\phi$ , o escalar reativo,  $c$ , que define a variável de progresso de uma reação, para consecutivamente, substituir a Eq. (4-95) na Eq. (3-30), obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c(\theta; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_r} [\delta(\theta) - P_c(\theta; t)] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \theta} [\langle \Gamma \nabla^2 c | \theta \rangle P_c(\theta; t)] - \frac{1}{\tau_c} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_c(\theta; t)], \end{aligned} \quad (4-97)$$

onde,  $\theta$  é a variável amostral que corresponde à variável aleatória do escalar reativo  $c$ . O segundo termo do lado direito corresponde à micro-mistura e necessita ser modelado.

Sabel`nikov e Figueira da Silva (2002) desenvolveram uma solução semi-analítica do comportamento permanente da Eq. (4-97) ao levar em conta o modelo de interação pela troca com a média (IEM) na substituição do termo difusivo da Eq. (4-97),

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c(\theta; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_r} [\delta(\theta) - P_c(\theta; t)] \\ &+ \frac{1}{\tau_m} \frac{\partial}{\partial \theta} [(\theta - \langle c \rangle) P_c(\theta; t)] - \frac{1}{\tau_c} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_c(\theta; t)]. \end{aligned} \quad (4-98)$$

Introduzindo os parâmetros adimensionais  $\mathcal{X}$  e  $\mathcal{Y}$  como sendo a razão entre o tempo de residência e o tempo de mistura e o tempo da reação química, respectivamente, a Eq. (4-98) pode ser re-escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c(\theta; t)}{\partial t^*} &= [\delta(\theta) - P_c(\theta; t)] \\ &+ \mathcal{X} \frac{\partial}{\partial \theta} [(\theta - \langle c \rangle) P_c(\theta; t)] - \mathcal{Y} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_c(\theta; t)]. \end{aligned} \quad (4-99)$$

Onde  $t^* = t/\tau_r$ ,  $\mathcal{X} = \tau_r/\tau_m$  e  $\mathcal{Y} = \tau_r/\tau_c$ . O parâmetro  $\mathcal{X}$  exprime a relação entre os processos de macro e micro-mistura, isto é, para um valor de  $\mathcal{X} \rightarrow \infty$ , ou seja, quando  $\tau_m \ll \tau_r$ , o modelo de um Reator Perfeitamente Agitado é atingido. Para o caso em que  $\mathcal{X} = 0$ , a solução estacionária do PaSR é reduzida àquela de um Reator com escoamento do tipo Pistão (PFR).

O parâmetro  $\mathcal{Y}$  representa o número de Damkhöler baseado no tempo de residência. Note-se que, a definição usual do número de Damkhöler é  $Da = \tau_m/\tau_c = \mathcal{Y}/\mathcal{X}$ . A figura 4.4 ilustra o comportamento do PaSR como função dos parâmetros  $\mathcal{X}$  e  $\mathcal{Y}$ .

Nesta figura observa-se que, quando  $\mathcal{X} \rightarrow \infty$ , a solução PaSR aproxima-se da curva em “S” clássica do PSR. Esta figura também mostra que existe

1. Um domínio  $0 < \mathcal{Y} < \mathcal{Y}'_1$  na qual apenas uma solução é obtida.
2. Uma faixa  $\mathcal{Y}'_1 < \mathcal{Y} < \mathcal{Y}'_2$ , na qual, três soluções são possíveis no PaSR.
3. Um domínio  $\mathcal{Y}'_2 < \mathcal{Y} < \infty$ , na qual apenas uma solução é possível.

Esta figura mostra claramente que, entre os limites do PaSR e do processo de mistura, uma família de soluções existe que corresponde aos diversos graus de mistura possíveis.

Para estudar as soluções possíveis da equação de transporte da PDF no caso reativo, o termo difusivo da Eq. (4-97) será modelado pelos modelos introduzidos na seção 4.5. Motivo pela qual, o modelo de Langevin estendido (ELM),

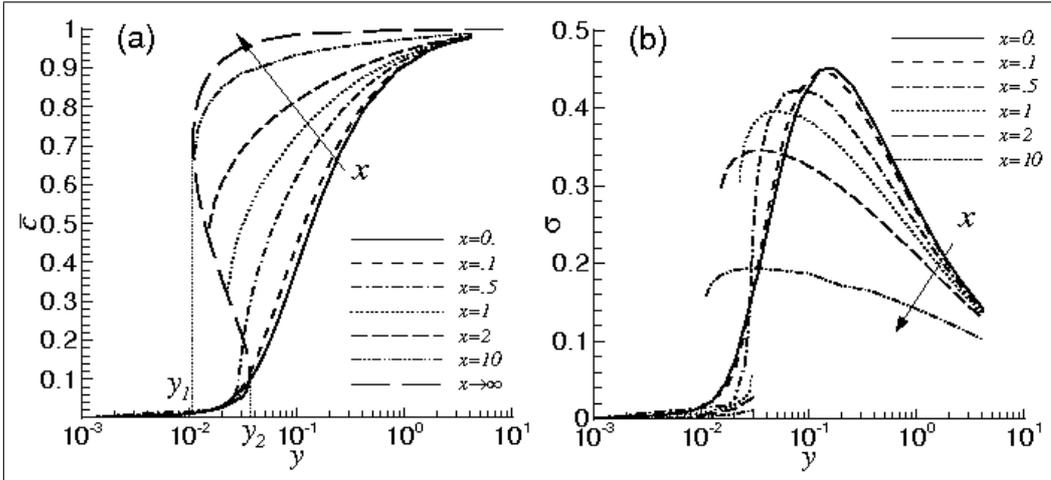


Figura 4.4: Média (a) e Desvio padrão (b) da variável de progresso de uma reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para diferentes valores de  $\mathcal{X}$ , resultados obtidos mediante a solução semi-analítica e estacionária de PaSR utilizando o modelo de mistura IEM para valores de  $\alpha = 0.8$  e  $\beta = 15$  (Sabel'nikov e Figueira da Silva, 2002).

que engloba os demais modelos desenvolvidos por Sabel'nikov e Gorokhovski, (2001), será utilizado.

A equação de transporte da PDF conjunta que modela o PaSR, proposta neste trabalho, é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)}{\partial t} = & \frac{1}{\tau_r} [\delta(\theta) - P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial}{\partial \theta} [a\Omega e^\varphi (\theta - \langle c|\varphi \rangle) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \\ & + \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} [b\Omega e^\varphi \theta (1 - \theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial}{\partial \varphi} [C_\chi (\varphi - m_1) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \quad (4-100) \\ & + \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [C_\chi m_2 P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] - \frac{1}{\tau_c} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)]. \end{aligned}$$

Nesta equação, o termo do lado esquerdo representa a evolução transiente da PDF conjunta de  $c$  e  $\chi$ , enquanto que os processos de entrada-saída dos gases do reator são representados pelo primeiro termo do lado direito. Os demais termos descrevem, na ordem, os processos difusivos-dissipativos de  $c$  e  $\chi$  e o termo de produção química.

A Eq. (4-100) é uma equação diferencial parcial de segunda ordem na qual  $\varphi$  é o espaço amostral da variável aleatória  $\chi$ , a qual modela a frequência turbulenta como sendo um processo estocástico do tipo Orstein-Uhlenbeck (Gardiner, 1990). O tempo característico da turbulência  $\tau_t$  é o inverso da frequência turbulenta média, isto é,  $\tau_t = \langle \omega \rangle^{-1}$ .

Definido  $\mathcal{Z}$  como sendo a razão entre o tempo de residência e o tempo turbulento, isto é,  $\mathcal{Z} = \tau_r / \tau_t = \tau_r \langle \omega \rangle$ , a forma adimensional da Eq. (4-100) é

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)}{\partial t^*} &= [\delta(\theta) - P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \mathcal{Z} \frac{\partial}{\partial \theta} [a\Omega e^\varphi (\theta - \langle c|\varphi \rangle) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \\
 &+ \mathcal{Z} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} [b\Omega e^\varphi \theta (1 - \theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \mathcal{Z} \frac{\partial}{\partial \varphi} [C_\chi (\varphi - m_1) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \quad (4-101) \\
 &+ \mathcal{Z} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [C_\chi m_2 P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] - \mathcal{Y} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{\mathcal{S}}(\theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)].
 \end{aligned}$$

Neste caso, os valores de  $a$ ,  $b$  e  $\Omega$ , presentes nas Eqs (4-100) e (4-101) são

$$a = 1 + d_0 \frac{\langle c(1-c)|z \rangle}{\sigma_M^2}, \quad (4-102)$$

$$b = d_0 \frac{\langle c^2|z \rangle - \langle c|z \rangle^2}{\sigma_M^2}, \quad (4-103)$$

$$\Omega = \frac{\sigma \mathcal{X}}{\langle z(\langle c^2|z \rangle - \langle c|z \rangle^2) \rangle}. \quad (4-104)$$

Nas Eqs. (4-102), (4-103) e (4-104),  $z$  representa o modelo estocástico da frequência turbulenta do campo de velocidade em forma adimensional:

$$z = \tau_r \langle \omega \rangle e^\chi = \mathcal{Z} e^\chi. \quad (4-105)$$

As Eqs. (4-101)–(4-104), descrevem o modelo de um PaSR para o caso simplificado de uma reação única global governada pela lei de Arrhenius e no qual a micro-mistura obedece ao modelo de Langevin estendido (ELM). Este conjunto de equações representa o caso generalizado na formulação dos modelos de mistura a serem abordados neste trabalho. Isto é, partindo das Eqs. (4-101)–(4-104) e adotando um valor de  $d_0 = 0$ , o terceiro termo da Eq. (4-101) é eliminado, o que resulta no modelo IEM estendido (EIEM).

Da mesma forma, partindo das Eqs. (4-101)–(4-104) e considerando a variável estocástica  $z$  uma constante, tem-se,  $\chi = 0$ ,  $\mathcal{Z} = \mathcal{X}$  e  $\Omega = C_\phi = 1$ . Além disto as médias condicionais presentes nas Eqs. (4-102) e (4-103) são reduzida a médias incondicionais e, finalmente, o quarto e quinto termos da Eq. (4-101) são eliminados. Desta forma, consegue-se a formulação de um PaSR obedecendo ao modelo de Langevin.

Por último, se  $d_0 = 0$  e  $z = cte$  simultaneamente, consegue-se a formulação de um PaSR obedecendo ao modelo IEM clássico, descrita pela Eq. (4-99).

A Eq. (4-101) não possui solução analítica conhecida devido à sua complexidade. A abordagem numérica mais factível para resolver equações de transporte da PDF, tais como aquele descrito nas Eqs. (4-99) e (4-101), é mediante a simulação estocástica pela técnica de Monte-Carlo.

## 4.7

**Solução Numérica do PaSR: a Técnica de Monte-Carlo**

Um das principais dificuldades associadas à resolução da equação de transporte da PDF [Eq. (A-40)] mediante a utilização de métodos clássicos de discretização é o alto custo computacional associado ao grande número de variáveis independentes necessárias para se representar os processos estocásticos no espaço euclidiano de velocidade, de composição, etc. Considerando-se a forma mais simplificada da equação de transporte da PDF para o PaSR [Eq. (4-99)], uma dificuldade suplementar aparece pois esta equação apresenta uma singularidade no espaço amostral da variável de progresso da reação  $\theta$ . Esta singularidade, exprime a existência de valores de composição proibidos na vizinhança de  $c = 1$  sempre que o tempo de residência é finito (Sabel`nikov e Figueira da Silva 2002).

A resolução das Eqs. (4-99) ou (4-101) podem ser efetuadas mediante a simulação estocástica de um sistema estatisticamente equivalente (Gardiner, 1990) pela técnica de Monte-Carlo. Esta técnica emprega amostras representativas chamadas “partículas”, que representam os processos físicos e químicos do sistema.

A principal vantagem da técnica de Monte-Carlo é que o custo computacional, cresce linearmente com o número de variáveis independentes. Este fator é decisivo no estudo dos casos reativos quando o custo computacional é dominado pela dependência exponencial do termo de produção química.

Dos quatros modelos de micro-mistura considerados no estudo do PaSR, somente o modelo IEM foi abordado em detalhe no caso reativo por Correa (1995), Chen (1997) e Sabel`nikov e Figueira da Silva (2002). Os demais, formulados por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001), foram avaliados no caso de mistura binária e quimicamente inerte (Soulard, 2005), mas seu comportamento ainda não foi estudado em presença de reação química, o que será feito neste trabalho mediante a utilização de uma técnica Monte-Carlo.

A solução da equação de transporte da PDF para o PaSR [Eq. (4-101)] utilizando a técnica Monte-Carlo, compreende as seguintes etapas (Chen, 1997):

- Inicialmente o reator contém  $N_p$  partículas, cada uma delas é caracterizada por um valor de concentração  $c^{(n)}$ , onde  $n = 1, \dots, N_p$ .
- Para cada passo de tempo,  $N_{sub}$  partículas são aleatoriamente escolhidas no reator e substituídas por partículas compostas de gases não queimados ( $c = 0$ ). Desta forma, o tempo de residência é  $\tau_r = N_p \Delta t / N_{sub}$ , e  $\Delta t^*$  é o passo de tempo adimensional, definido como  $\Delta t^* = \Delta t / \tau_r$ .

- Cada partícula, evolui no tempo devido aos processos de micro-mistura e de reação química segundo

$$dc^{(n)} = \left[ -Za\Omega e^{\chi} (c^{(n)} - \langle c|\chi \rangle) + \mathcal{Y}\dot{\mathcal{S}}(c^{(n)}) \right] dt^* + \sqrt{2Zb\Omega c^{(n)}(1 - c^{(n)})} dW_c, \quad (4-106)$$

$$d\chi^{(n)} = -ZC_{\chi}(\chi^{(n)} - m_1)dt^* + \sqrt{2ZC_{\chi}m_2}dW_{\chi}, \quad (4-107)$$

onde  $dW_c$  e  $dW_{\chi}$  são as variações independentes de  $c$  e  $\chi$  que obedecem a um processo de Wiener padrão com média nula e variância  $dt$ . Estas equações correspondem a um sistema de equações diferenciais estocásticas em acordo com a representação de Itô (Gardiner, 1990).

No presente estudo, no instante inicial todas as partículas aleatórias contêm somente gases não queimados, isto é,  $c^{(n)}(t^* = 0) = 0$ .

As Eq. (4-106) e (4-107) são um sistema fortemente não linear de Equações Diferenciais Estocásticas (SDEs) de primeira ordem, que representa no referencial Lagrangeano, a evolução das propriedades  $c$  e  $\chi$  de uma partícula de fluido. Esta não linearidade provém do termo de produção química e sua solução numérica requer a utilização de métodos numéricos mais sofisticados do que usualmente empregados para resolver SDEs lineares.

#### 4.8 Métodos Numéricos que Resolvem as Equações Diferenciais Estocásticas

Nesta seção é apresentada uma breve descrição dos métodos numéricos que resolvem SDEs. Em particular, o esquema de Milstein Taylor Implícito de convergência de ordem forte igual a 1,0 (Tian e Burrage, 2001), é escolhido para a discretização das Eqs. (4-106) e (4-107).

A forma geral da equação diferencial estocástica (SDE) que se pretende resolver é, de acordo com a interpretação de Itô (Gardiner, 1990; Tian e Burrage, 2001), dada por:

$$d\phi(t) = A[\phi(t), t] dt + \sum_{j=1}^{N_p} B_j[\phi(t), t] dW_j(t), \quad \phi(t_0) = \phi_0, \quad t \in [t_0, T]. \quad (4-108)$$

Nesta equação  $A[\phi(t), t]$  representa o termo determinístico, chamado de coeficiente de deriva,  $B_j[\phi(t), t]$  representa o coeficiente difusivo, e  $dW_j(t)$ , onde  $j = 1, \dots, N_p$  correspondem ao processo Wiener, independentes entre si, cujos incrementos  $\Delta W_j(t + \Delta t) = W_j(t + \Delta t) - W_j(t)$  são variáveis aleatórias

do tipo Normal  $N(0, \Delta t)$ . A solução desta equação diferencial estocástica é usualmente apresentada na seguinte forma integral

$$\phi(t) = \phi(t_0) + \int_{t_0}^t A[\phi(s), s] ds + \sum_{j=1}^{N_p} \int_{t_0}^t \{B_j[\phi(s), s]\} dW_j(s). \quad (4-109)$$

A abordagem mais empregada na resolução da Eq. (4-109) é a simulação de caminhos amostrais (*sample paths*) que consiste em uma aproximação pelo uso de tempos discretos. Isto é, é necessária a discretização do intervalo de tempo  $[t_0, T]$ , o que gera estes caminhos amostrais. Estes caminhos podem ser analisados mediante o uso de ferramentas estatísticas para determinar, por exemplo, a acurácia da aproximação numérica.

Neste trabalho, a discretização do intervalo de tempo  $[t_0, T]$  é uniforme com o passo do tempo

$$h = \frac{T - t_0}{N}, \quad (4-110)$$

onde  $N$  é o número de intervalos que dividem  $[t_0, T]$ . O tempo discretizado pode ser expresso por

$$t_n = t_0 + nh, \quad n = 1, \dots, N. \quad (4-111)$$

O desenvolvimento de esquemas numéricos que resolvem as SDEs é objeto de trabalhos recentes (Burrage e Tian, 2000). Os esquemas desenvolvidos podem ser divididos em três categorias:

1. Esquemas numéricos de tipo explícito, nos quais, os coeficientes de deriva e de difusão são integrados de forma explícita.
2. Esquemas numéricos de tipo semi-implícito, em que o coeficiente de deriva é integrado implicitamente, porém, o coeficiente de difusão é explícito.
3. Esquemas numéricos de tipo implícito onde ambos coeficientes de deriva e de difusão são implícitos.

Como exposto no Cap. 2, a discretização numérica mais simples para resolver uma equação diferencial estocástica é o esquema numérico de *Euler-Maruyama*, que é uma generalização estocástica do método de Euler clássico. Para descrever o método de Euler escreve-se a SDE como:

$$d\phi(t) = A[\phi(t), t] dt + B[\phi(t), t] dW(t), \quad \phi(t_0) = \phi_0, \quad t \in [t_0, T], \quad (4-112)$$

Há três métodos de discretização de Euler:

1. O método de *Euler Explícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_n, t_n] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n, \quad (4-113)$$

2. O método de *Euler Semi-implícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n, \quad (4-114)$$

3. O método de *Euler Implícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B[\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n, \quad (4-115)$$

A variável aleatória  $\Delta W_n$  é normalmente distribuída  $N(0, \sqrt{h})$  com média e variância

$$E(\Delta W_n) = 0, \quad (4-116)$$

$$E[(\Delta W_n)^2] = h, \quad (4-117)$$

Cabe resaltar que todos os esquemas numéricos do tipo Euler que resolvem as SDEs possuem uma convergência de ordem forte igual a 0,5, (Burrage e Tian, 2000). O método de Euler é o resultado do truncamento de primeira ordem da expansão estocástica de Taylor (Gardiner, 1990). Expansões estocásticas de Taylor são obtidas generalizando as expansões determinísticas de Taylor e a fórmula de Itô (Tian e Burrage, 2001). Da mesma forma que acontece com as expansões determinísticas de Taylor na análise das equações diferenciais ordinarias (ODEs), as expansões estocásticas de Taylor possuem um papel fundamental na análise numérica das equações diferenciais estocásticas (SDEs).

As expansões estocásticas de Taylor são diretamente empregadas no desenvolvimento de esquemas numéricos para resolver SDEs. Um método derivado do truncamento das expansões de Taylor é o *método de Milstein* que para os casos explícito e semi-implícito torna-se, respectivamente, (Kloeden e Platen, 1992).

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_n, t_n] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n + \frac{1}{2}(BB')[\phi_n, t_n] [(\Delta W_n)^2 - h], \quad (4-118)$$

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n + \frac{1}{2}(BB')[\phi_n, t_n] [(\Delta W_n)^2 - h], \quad (4-119)$$

onde  $B' = dB/d\phi$ . Este método é caracterizado por uma convergência de ordem forte igual a 1 (Kloeden e Platen, 1992). Tian e Burrage (2001) partem dos métodos de *Taylor* do tipo implícito que resolvem SDEs de acordo à representação de Itô [Eq. 4-112], e propõem,

$$\phi_{n+1} = \phi_n + (A - BB') [\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B [\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n. \quad (4-120)$$

O termo de deriva da Eq (4-120) apresenta uma modificação com respeito ao método de *Euler Implícito*, [Eq. (4-115)]. Este método implícito modificado, quando aplicado a uma SDE linear com ruído multiplicativo, pode levar a soluções numéricas divergentes, o que caracteriza uma instabilidade numérica e acarreta a propagação de erros. Esta indesejável solução numérica da Eq. (4-120) em uma SDE linear resulta do termo aleatório.

Para evitar estas instabilidades, Tian e Burrage (2001), modificaram a contribuição no termo de deriva do termo estocástico. Obtém-se assim o método de *Euler-Taylor Implícito*,

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A [\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B [\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n - (BB') [\phi_{n+1}, t_{n+1}] (\Delta W_n)^2. \quad (4-121)$$

o qual é caracterizado por uma convergência de ordem forte igual a 0,5. De forma similar foi derivado o método de *Milstein-Taylor Implícito*

$$\begin{aligned} \phi_{n+1} = \phi_n + A [\phi_{n+1}, t_{n+1}] h \\ + B [\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n - \frac{1}{2} (BB') [\phi_{n+1}, t_{n+1}] [(\Delta W_n)^2 + h], \end{aligned} \quad (4-122)$$

que possui uma convergência de ordem forte igual a 1. A estabilidade dos métodos numéricos que resolvem SDEs foi avaliada utilizando uma SDE linear e com ruído multiplicativo. Os métodos de *Euler-Taylor Implícito* e *Milstein-Taylor Implícito* possuem, quando comparados aos demais métodos apresentados nesta seção, as melhores propriedades de estabilidade do tipo média quadrada.

A complexidade computacional do método de *Milstein-Taylor Implícito* é quase a mesma que o método de *Euler-Taylor Implícito*. Porém a convergência de ordem forte igual a 1 do método de *Milstein-Taylor Implícito* é maior do que a do método de *Euler-Taylor Implícito*, 0,5. Pelas suas vantagens, o método de *Milstein-Taylor Implícito* foi escolhido para solução numérica do sistema de equações diferenciais estocásticas representadas [Eqs. (4-106) e (4-107)]. Acredita-se que esta seja a primeira utilização deste método para a resolução de problemas de combustão.

## 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.

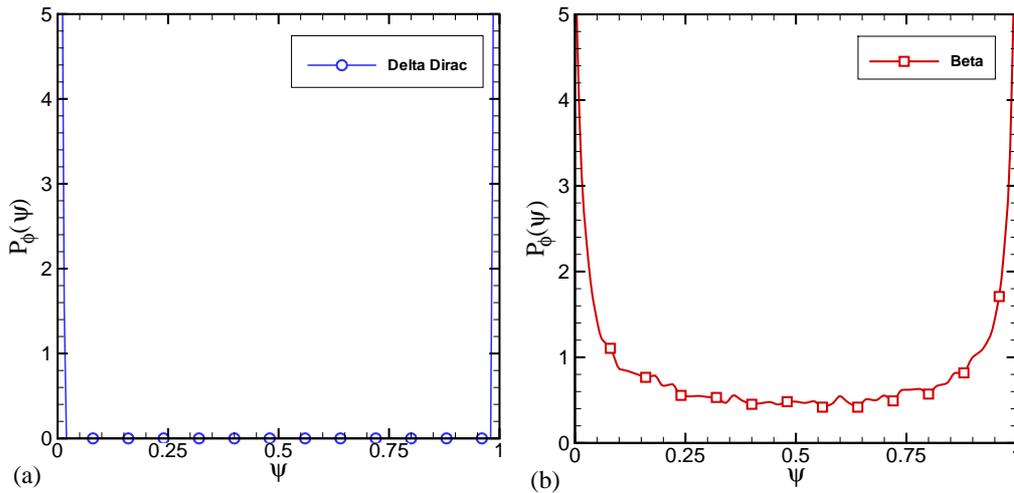


Figura 5.1: *PDF iniciais consideradas na simulação de uma mistura binária. (a) distribuição delta de Dirac discretizada com  $\langle \phi \rangle = 0,5$  e  $\langle \phi'^2 \rangle = 0,25$ ; (b) distribuição Beta com  $\langle \phi \rangle = 0,5$  e  $\langle \phi'^2 \rangle = 0,15$ . Estas PDFs foram 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  $\langle \omega_\phi \rangle = 100Hz$ . 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  $\Delta t = 100\mu s$ , 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.

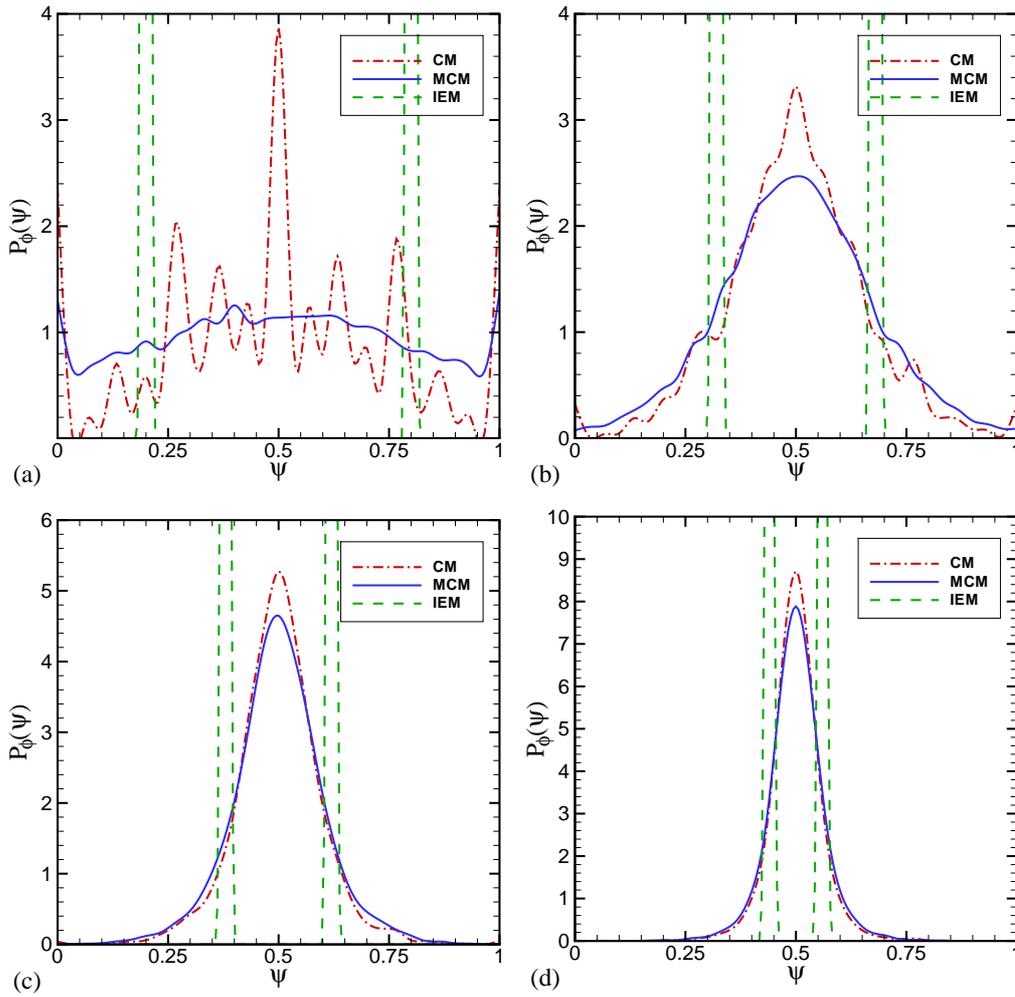


Figura 5.2: Comparação da evolução da representação contínua da PDF para os modelos de mistura clássicos para  $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5$  (a);  $1,0$  (b);  $1,5$  (c) e  $2,0$  (d). A PDF inicial foi assumida como sendo uma distribuição duplo delta de Dirac.

### 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

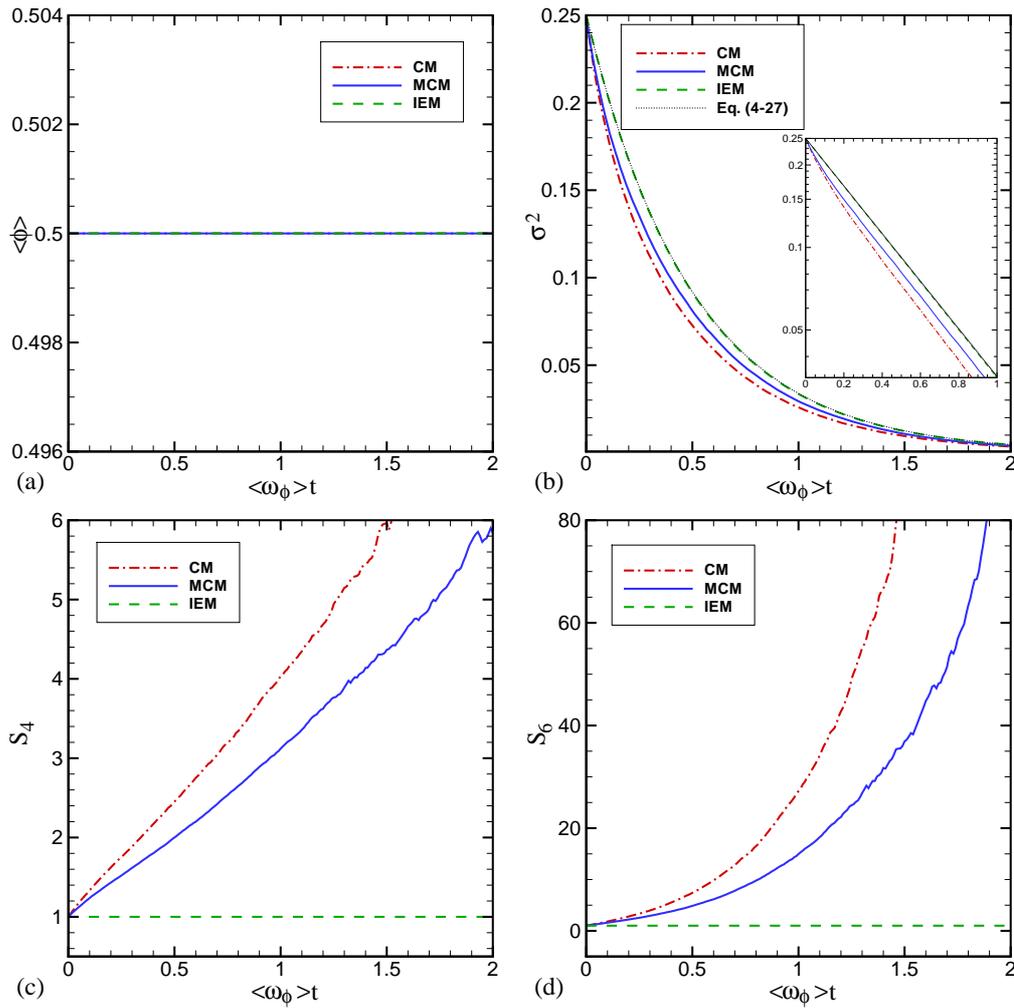


Figura 5.3: Comparação dos momentos estatísticos da PDF para os modelos de mistura clássicos; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

(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-

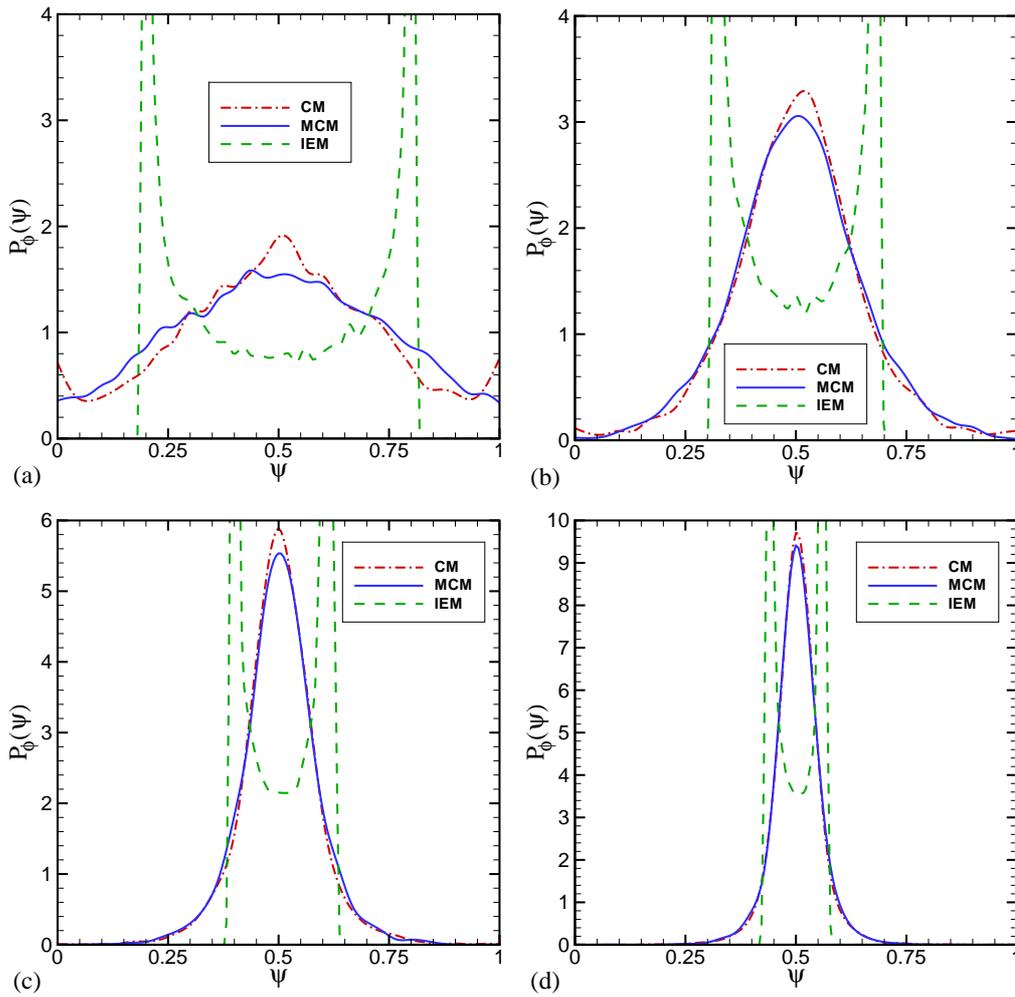


Figura 5.4: Comparação da evolução das PDF para os modelos de mistura clássicos para  $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5$  (a) ;  $1,0$  (b);  $1,5$  (c) e  $2,0$  (d). A PDF inicial é uma distribuição Beta.

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

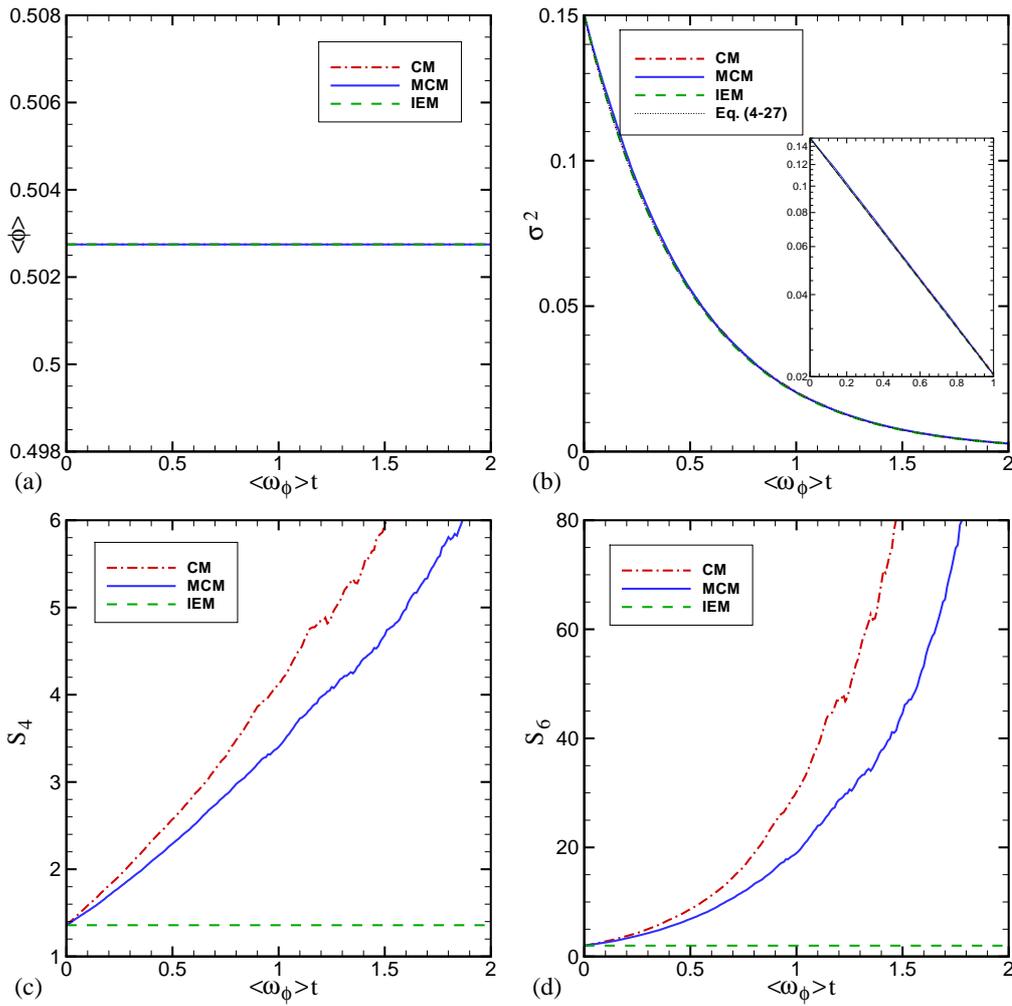


Figura 5.5: Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura clássicos; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper- Curtose. A PDF inicial é uma distribuição Beta.

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

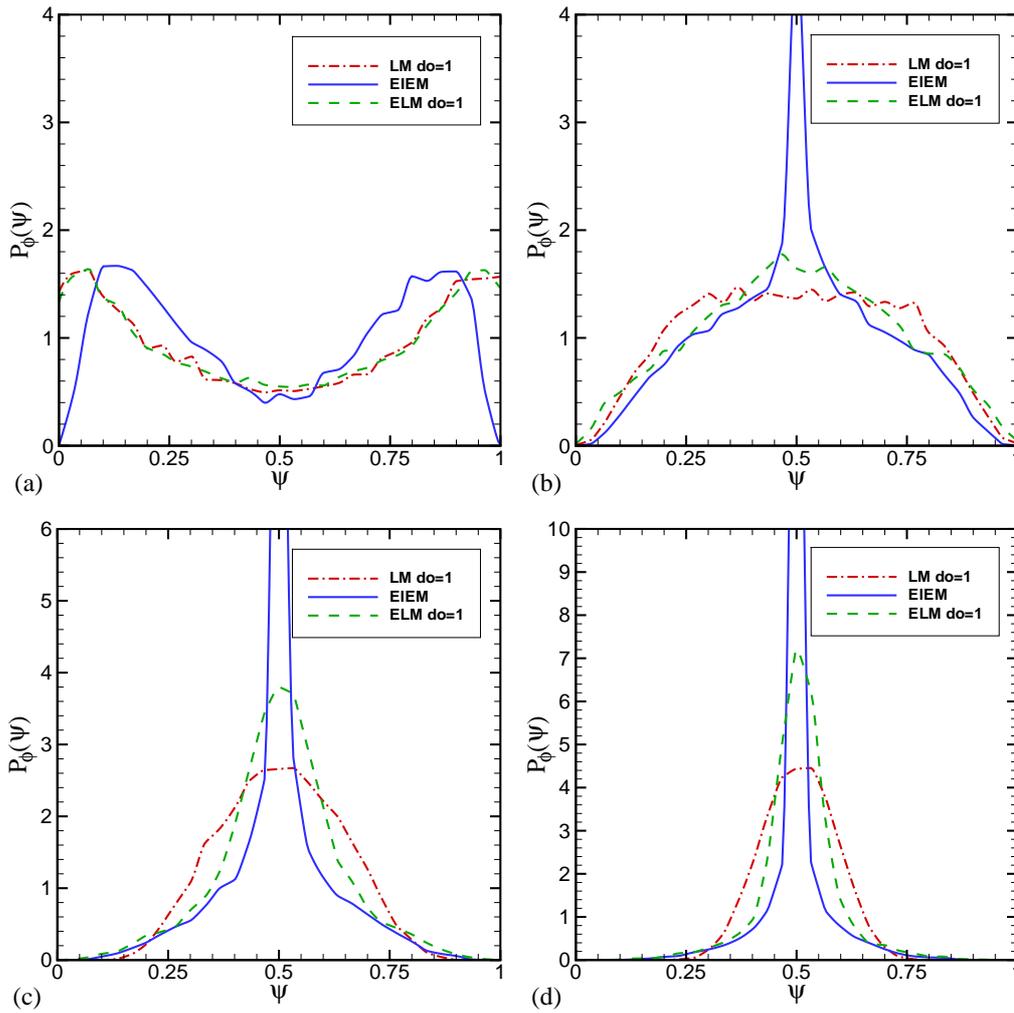


Figura 5.6: Comparação da evolução das PDFs para os modelos de mistura Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para  $d_o = 1,0$ ;  $\langle \omega \rangle = 100$  Hz. e  $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5$  (a); 1,0 (b); 1,5 (c) e 2,0 (d). A PDF inicial é uma distribuição duplo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

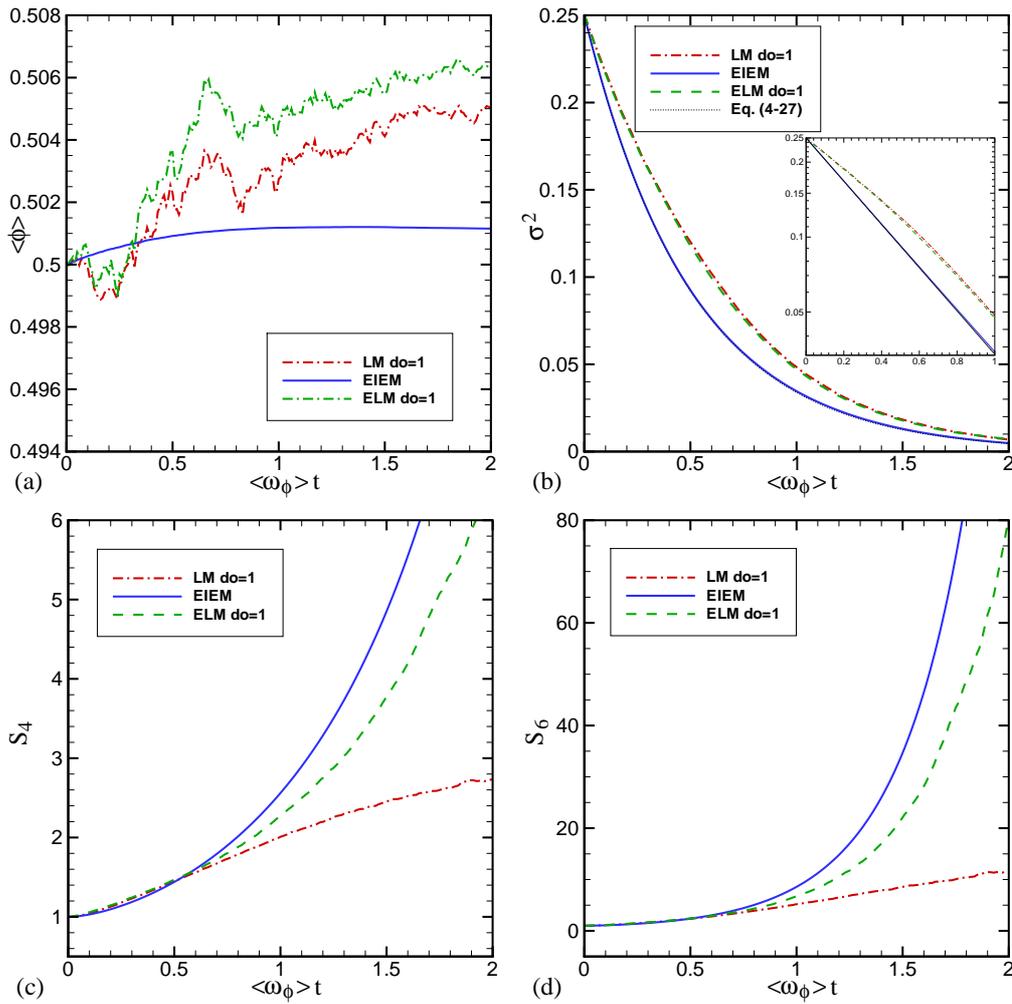


Figura 5.7: Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura de Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para  $d_o = 1,0$  e  $e\langle\omega\rangle = 100$  Hz.; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo 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  $\chi$ . A distribuição de  $\chi$  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,  $\sigma^2$ , 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 representado 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

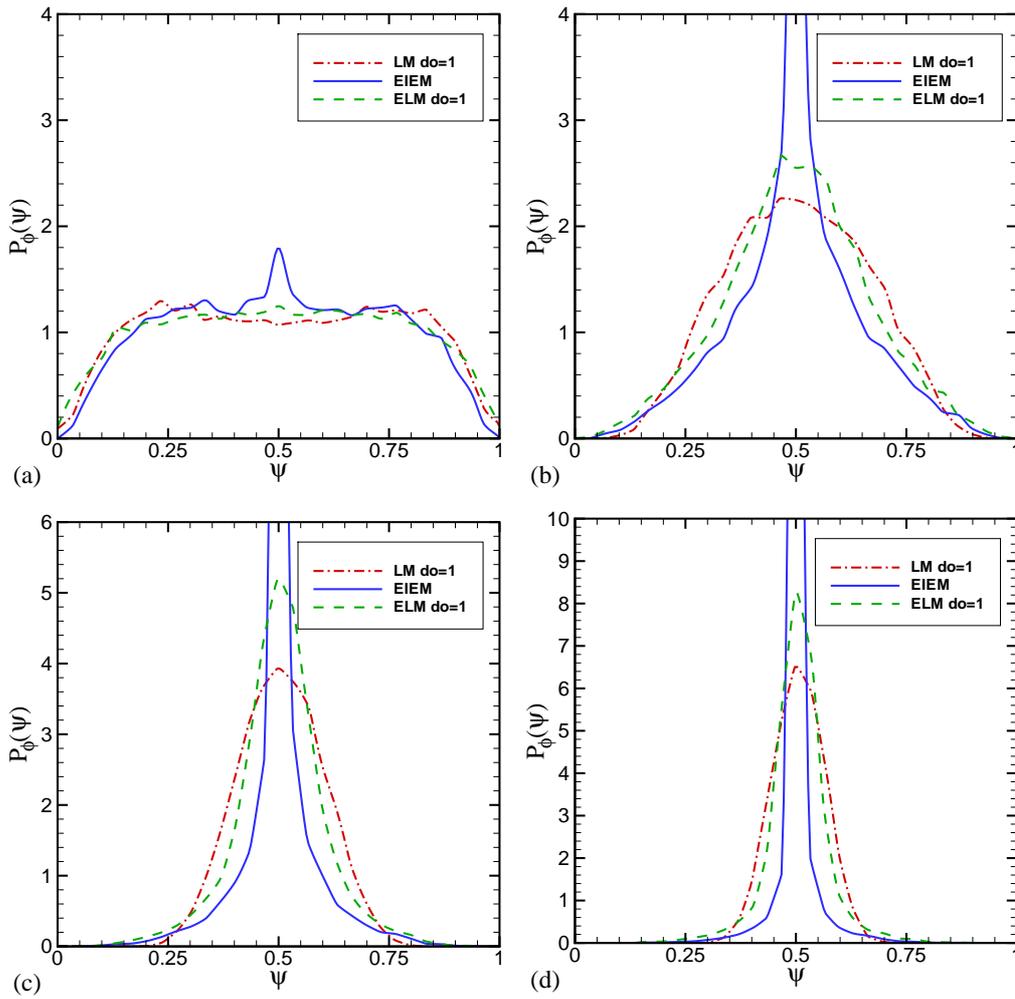


Figura 5.8: Comparação da evolução das PDF entre os modelos de mistura Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para  $d_0 = 1, 0$ ;  $\langle \omega \rangle = 100$  Hz. e  $\langle \omega_\phi \rangle t = 0, 50$ , (a) ; 1,0 (b); 1,5 (c) e 2,0 (d); A PDF inicial é uma distribuição 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

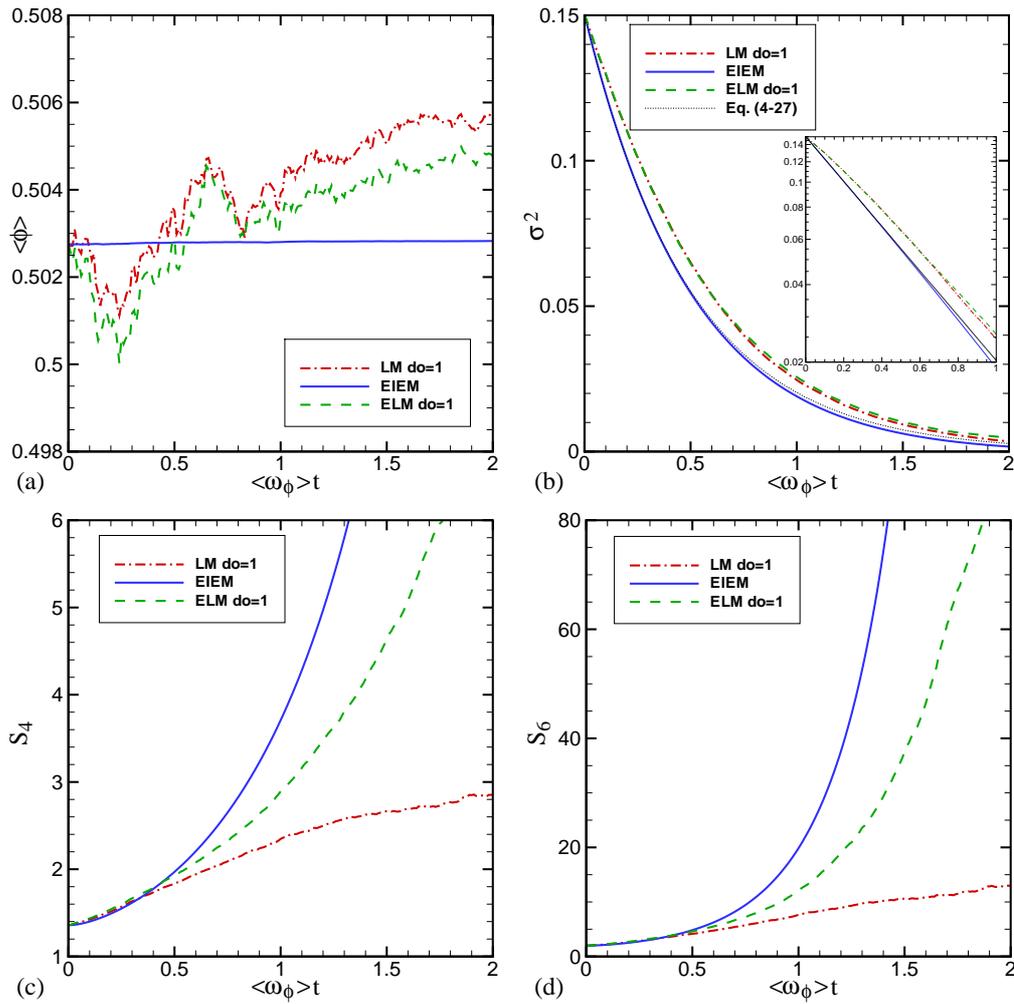


Figura 5.9: Comparação dos momentos estatísticos da PDF entre os modelos de mistura de Langevin (LM), IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) para  $d_0 = 1,0$  e  $\langle\omega\rangle = 100\text{ Hz}$ .; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição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

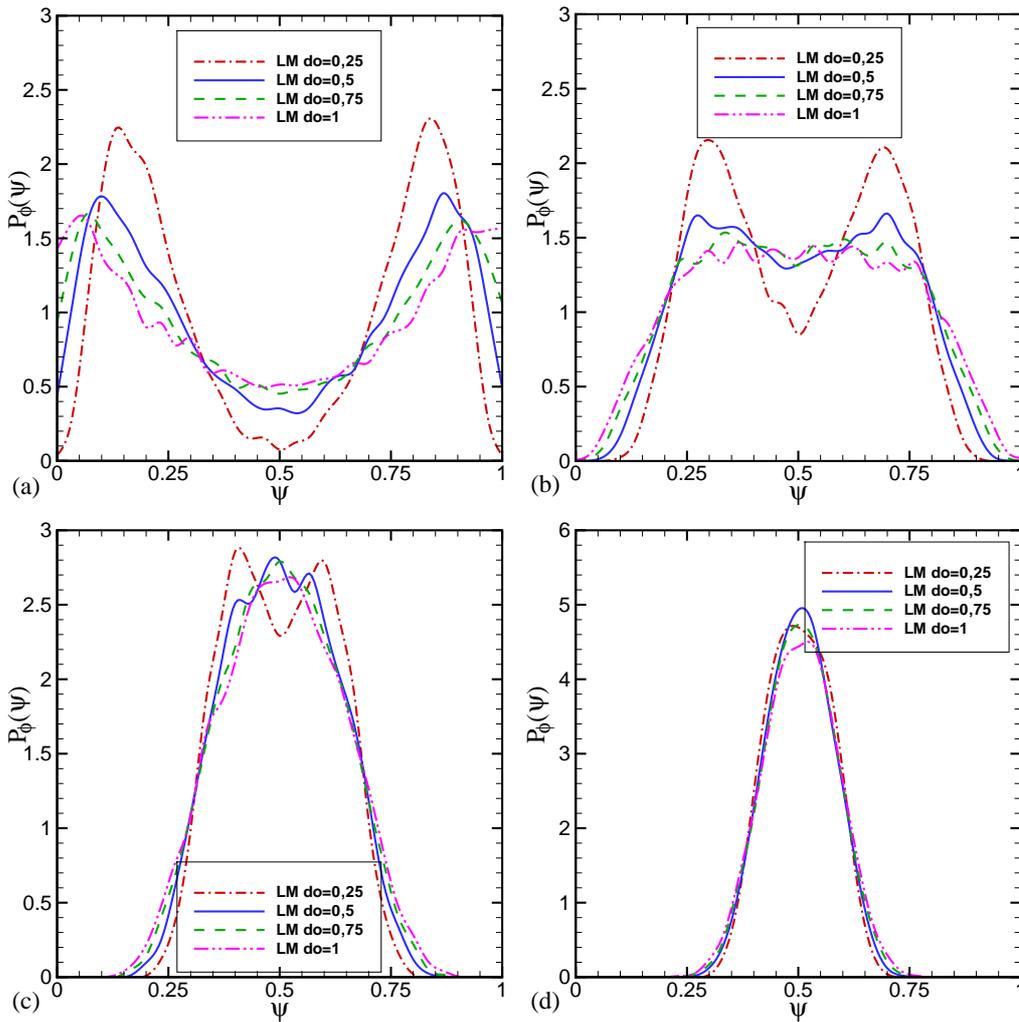


Figura 5.10: Comparação da evolução das PDFs do modelo de Langevin (LM) para diferentes valores de  $d_o$ ; com  $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5$  (a);  $1,0$  (b);  $1,5$  (c) e  $2,0$  (d); A PDF inicial é duplo delta de Dirac.

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  $200 Hz$ . 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

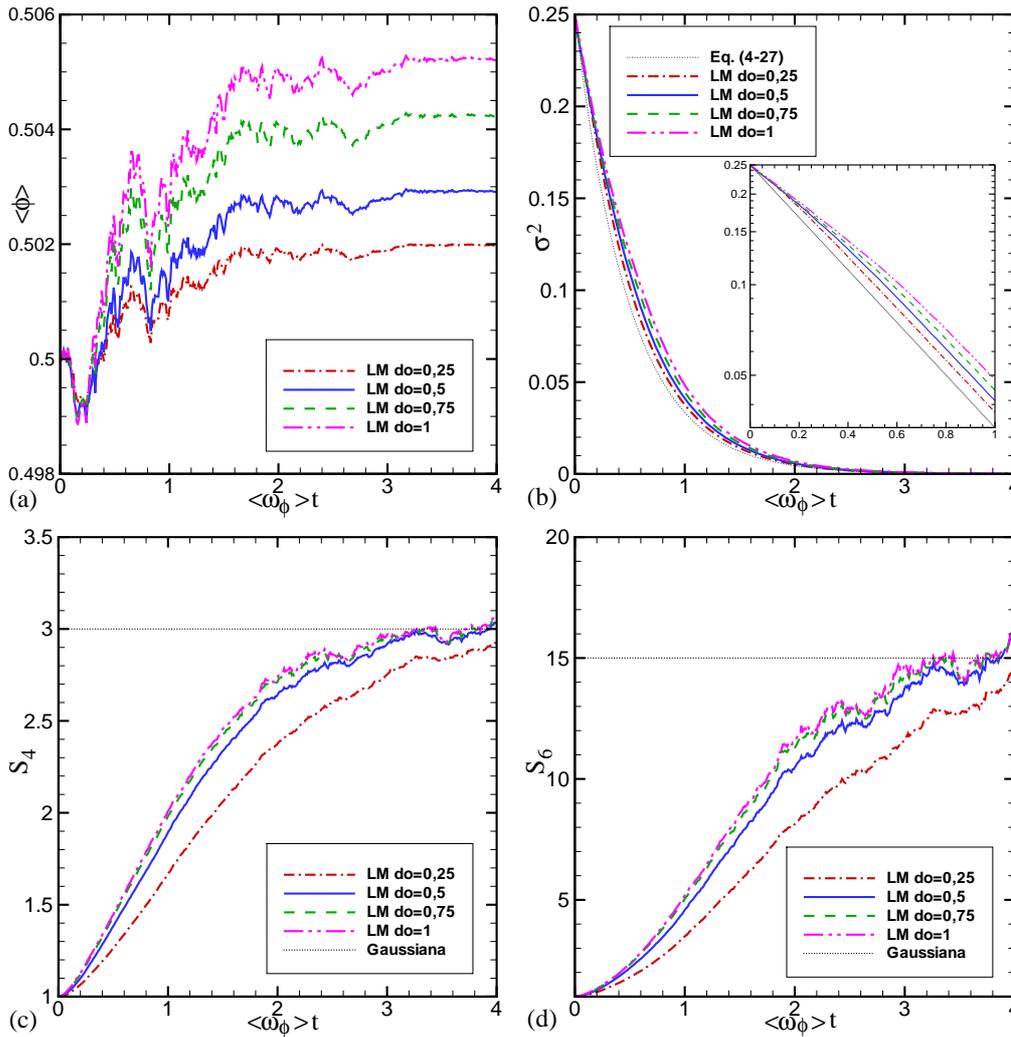


Figura 5.11: Comparação dos momentos estatísticos da PDF do modelo de Langevin (LM) para diferentes valores de  $d_o$ ; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

do tipo Orstein-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

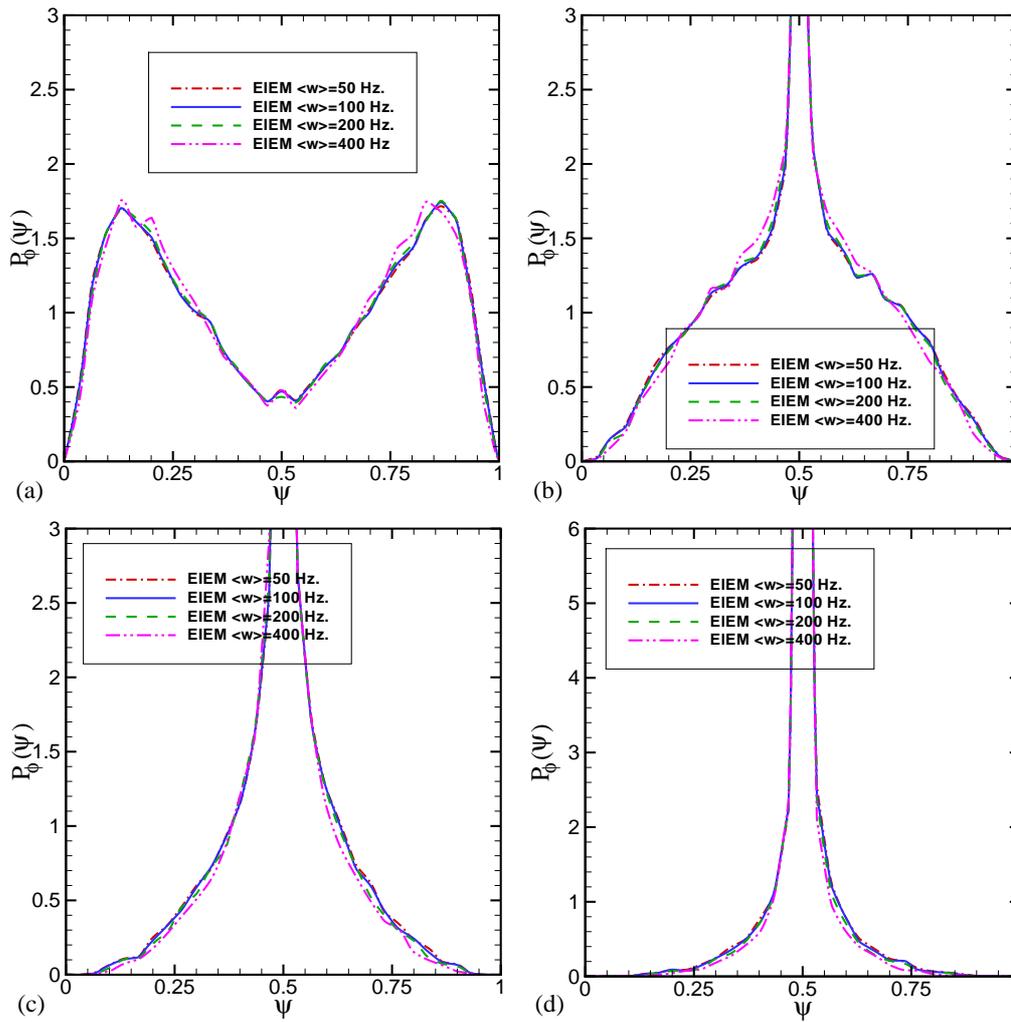


Figura 5.12: Comparação da evolução das PDF do modelo IEM Estendido (EIEM) para diferentes valores de frequência média de velocidade  $\langle \omega \rangle$ ;  $\langle \omega_\phi \rangle t = 0,5$  (a) ; 1,0 (b); 1,5 (c) e 2,0 (d); A PDF inicial é uma distribuição duplo delta de Dirac.

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

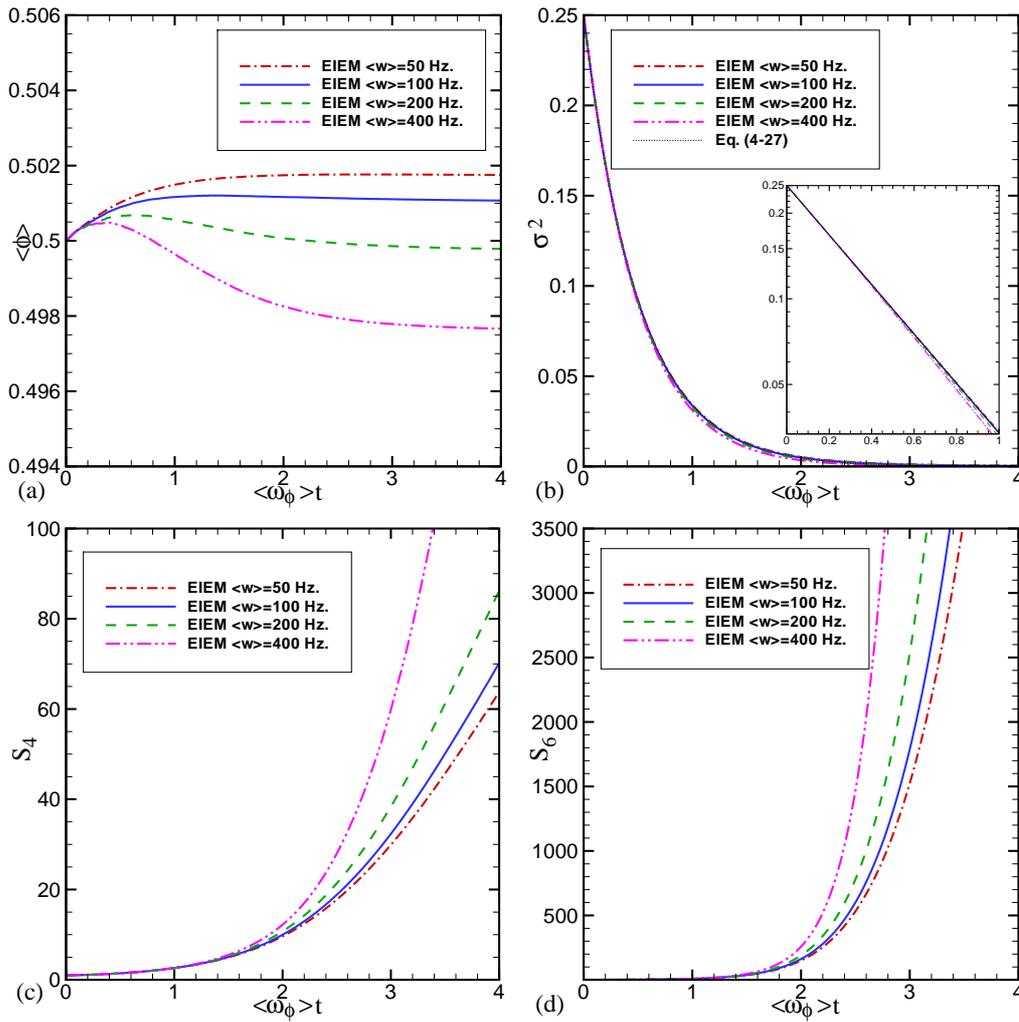


Figura 5.13: Comparação dos momentos estatísticos da PDF do modelo IEM Estendido (EIEM) para diferentes valores de frequência média de velocidade  $\langle \omega \rangle$ ; (a) Média; (b) Variância; (c) Curtose; (d) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição delta duplo de Dirac.

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

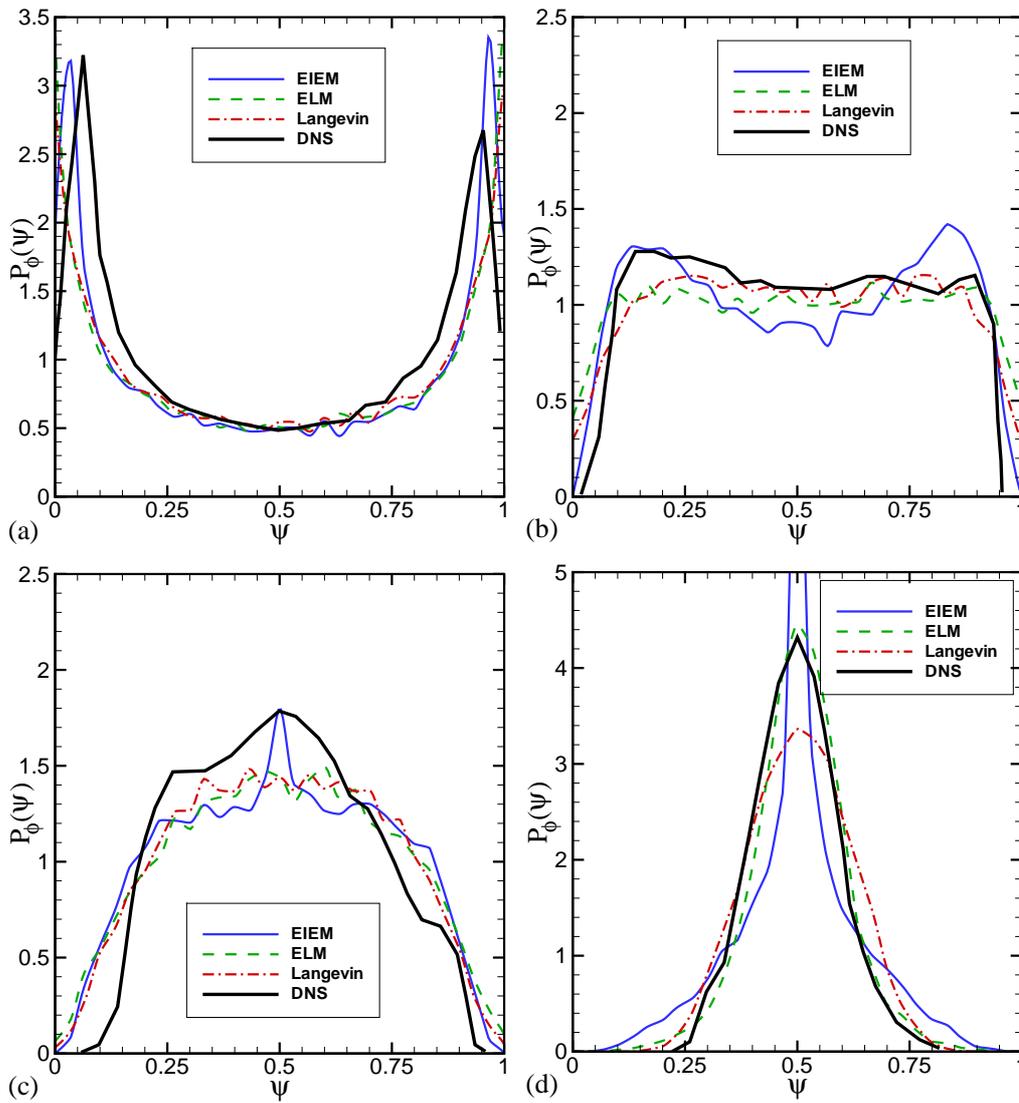


Figura 5.14: Comparação das PDFs do escalar modeladas com os dados da DNS.  $(\langle \omega \rangle t, \sigma/\sigma_0) = (0, 22; 0, 99)$  (a);  $(1, 49; 0, 73)$  (b);  $(2, 11; 0, 55)$  (c);  $(3, 47; 0, 27)$  (d). A PDF inicial é uma distribuição Beta com  $\langle \phi \rangle = 0,5$  e  $\sigma_0^2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

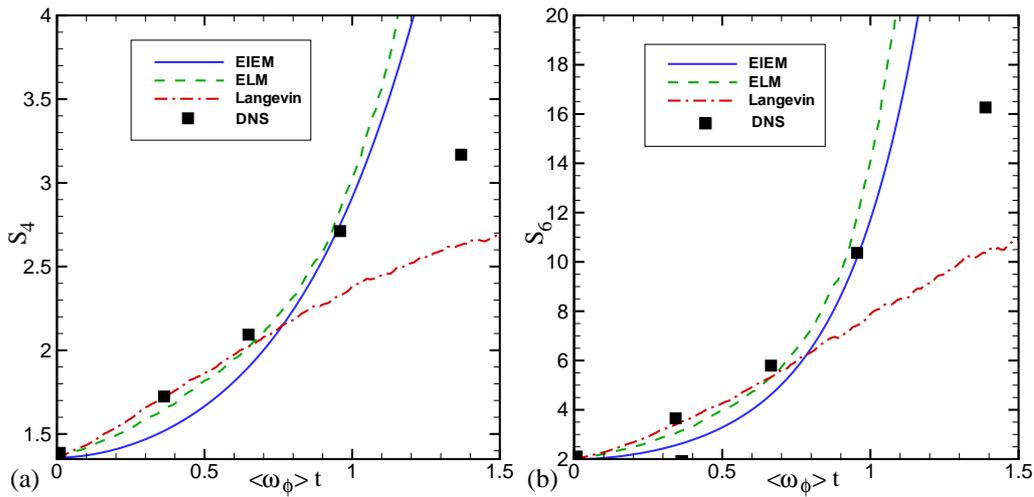


Figura 5.15: Comparação dos fatores da Curtose e da Hiper-curtose com os resultados DNS. (a) Curtose; (b) Hiper-curtose. A PDF inicial é uma distribuição Beta com  $\langle \phi \rangle = 0,5$  e  $\sigma_\phi^2 = 0,15$ .

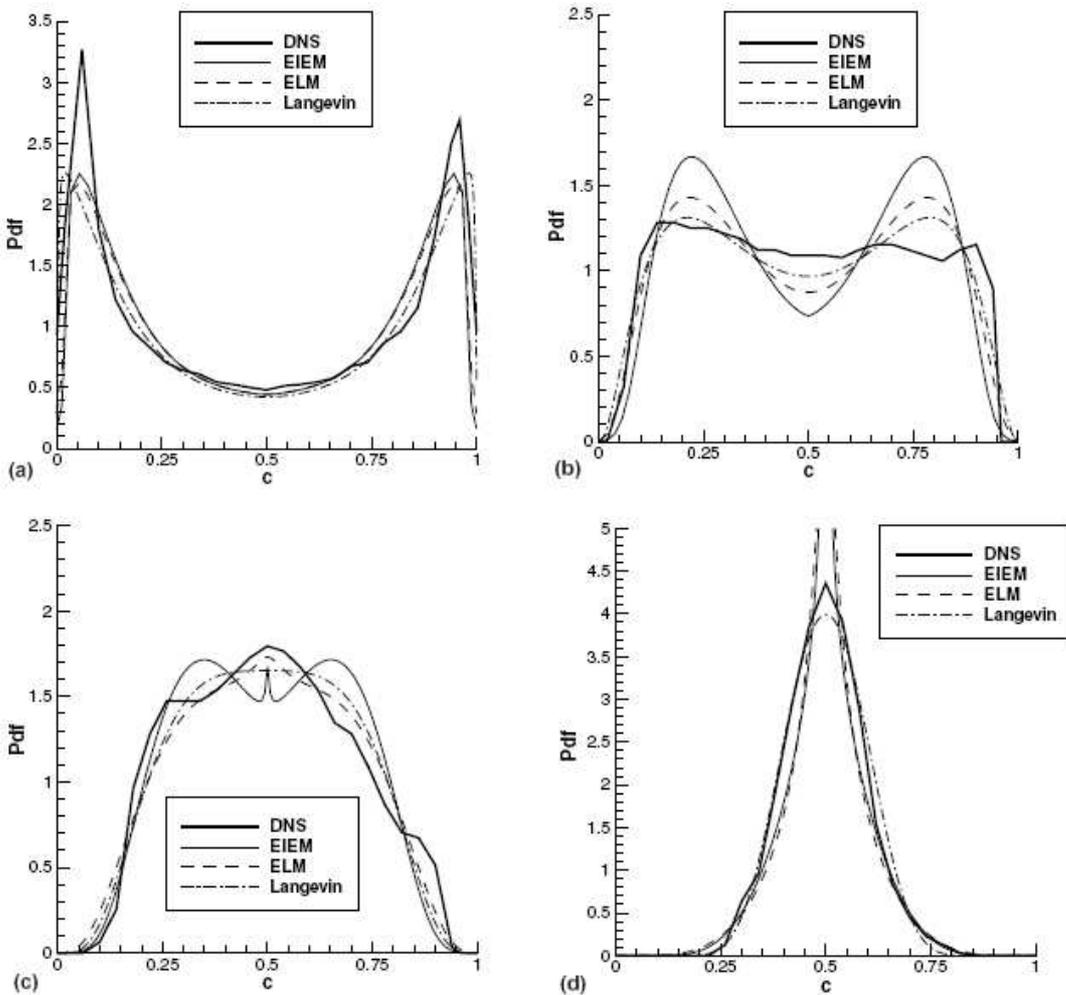


Figura 5.16: Resultados obtidos por Soulard, (2005) da comparação entre as PDF do escalar modeladas com os dados da DNS.  $(\langle \omega \rangle t, \sigma/\sigma_0) = (0, 22; 0, 99)$  (a);  $(1, 49; 0, 73)$  (b);  $(2, 11; 0, 55)$  (c);  $(3, 47; 0, 27)$  (d).

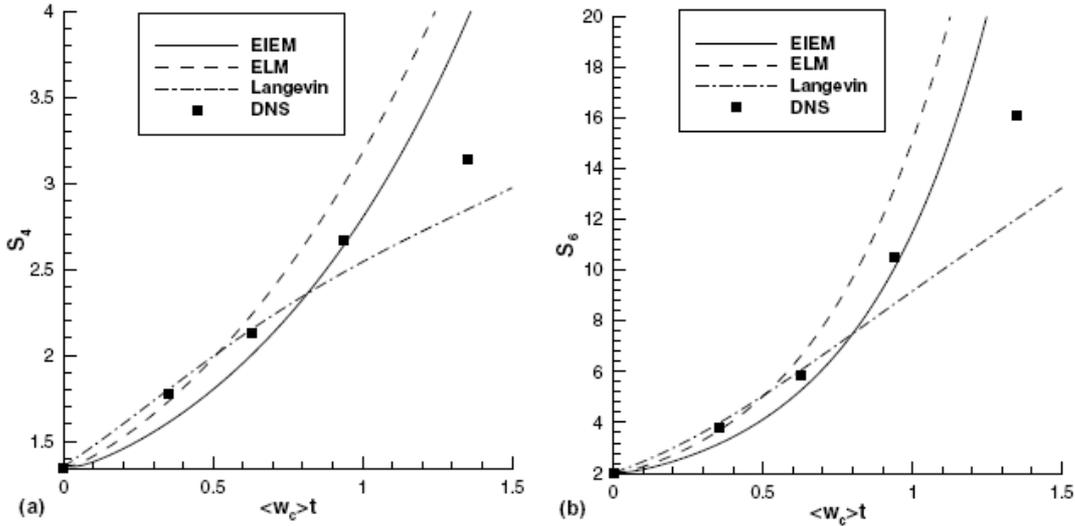


Figura 5.17: Resultados foram obtidos por Soulard (2005) da comparação dos fatores da curtose e da Hiper-curtose com respeito à DNS. (a) Curtose; (b) Hiper-curtose.

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,  $\Delta t^*$ , 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

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

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,  $\alpha$ , e a energia de ativação reduzida,  $\beta$ , 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

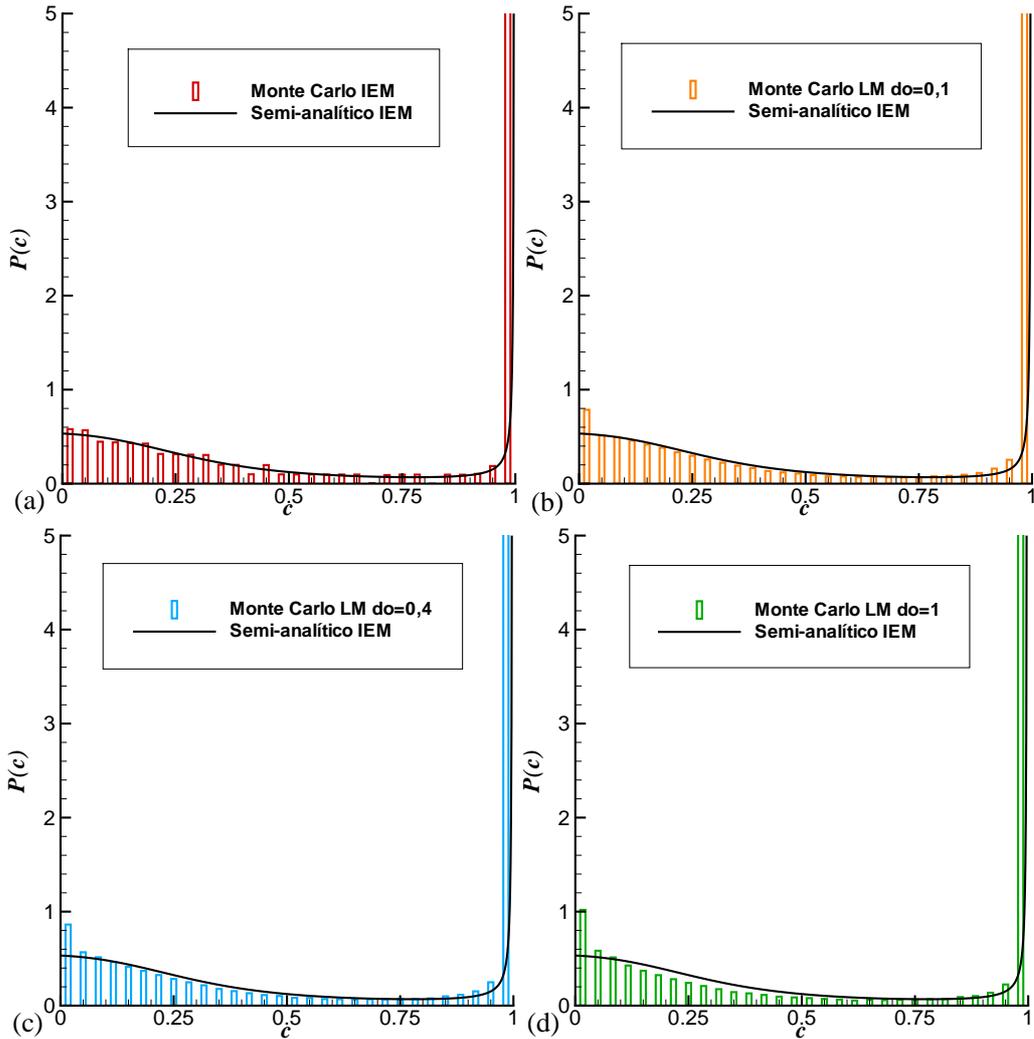


Figura 5.18: Comparação entre a PDFs teórica do modelo IEM (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de  $c$  para  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  e para os modelos de mistura (a) IEM; (b) LM  $d_0 = 0,1$ ; (c) LM  $d_0 = 0,4$ ; (d) LM  $d_0 = 1$ . Regime de combustão intensa.

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.

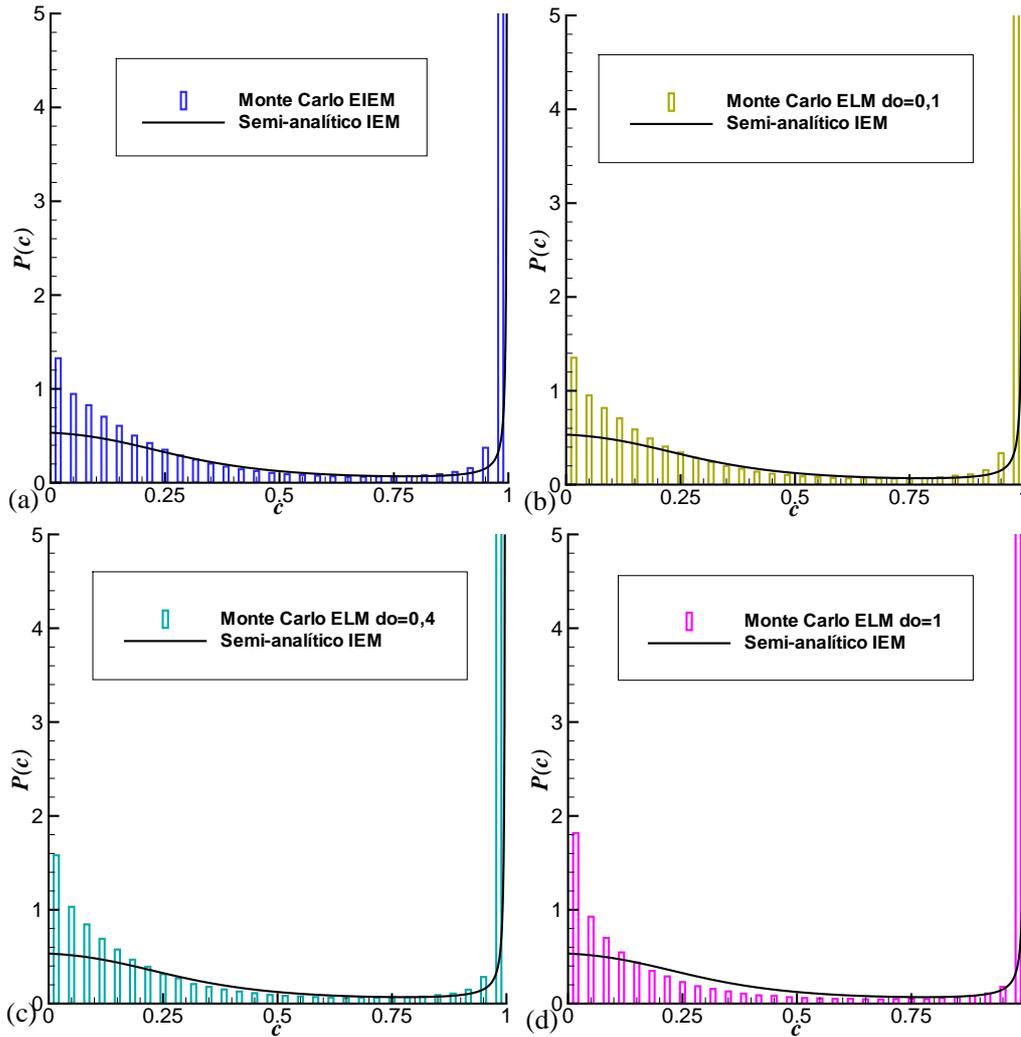


Figura 5.19: Comparação entre a PDFs teóricas para o modelo IEM (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de  $c$  para  $Z = 2$  e  $Y = 0,167$  e para os modelos de mistura (a) EIEM; (b) ELM  $d_0 = 0,1$ ; (c) ELM  $d_0 = 0,4$ ; (d) ELM  $d_0 = 1$ . Regime de combustão intensa.

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,  $\sigma$ , e  $S_4$  e  $S_6$ . Os valores  $\langle c \rangle$  e  $\sigma$  obtidos por Sabel'nikov e Figueira da Silva (2002), para o modelo IEM também são mostrados.

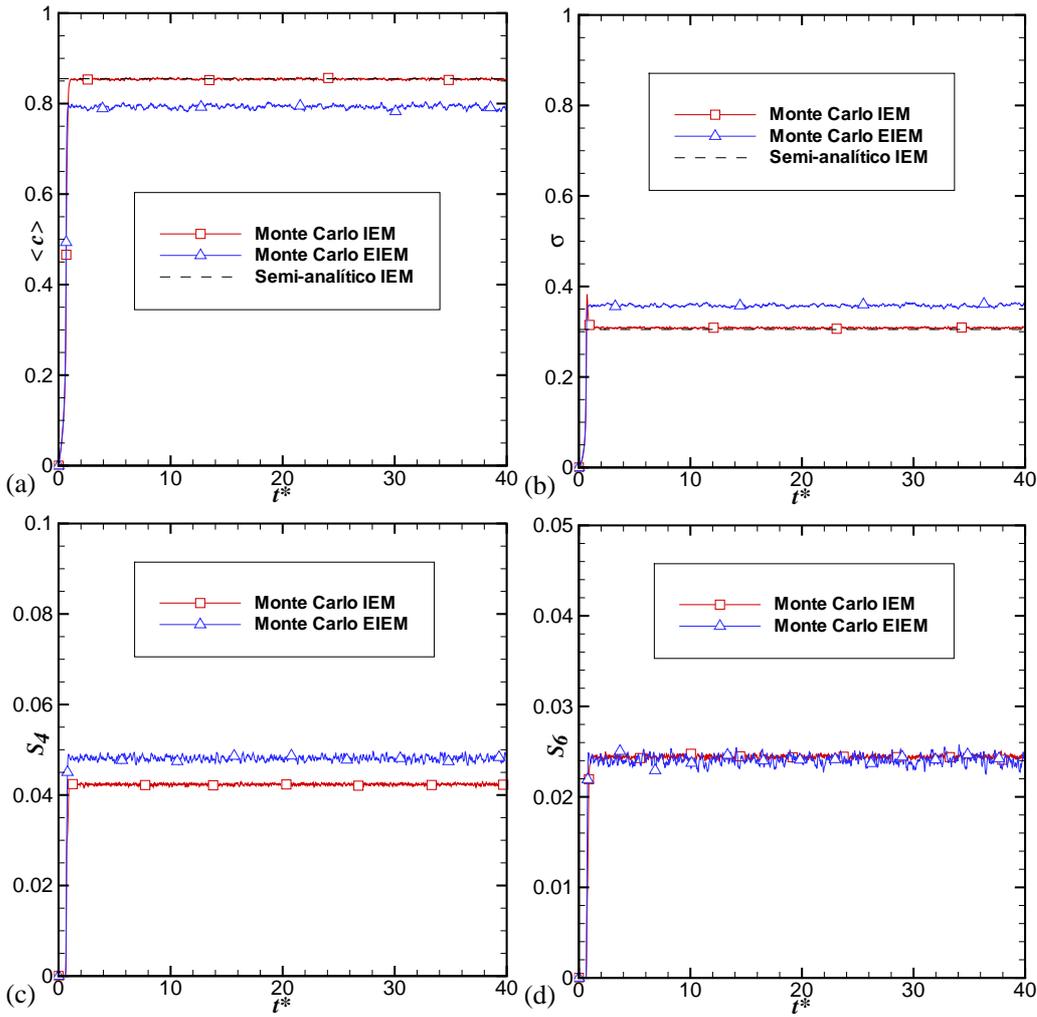


Figura 5.20: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $Z = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  e para os modelos de mistura IEM e EIEM. (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão intensa.*

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

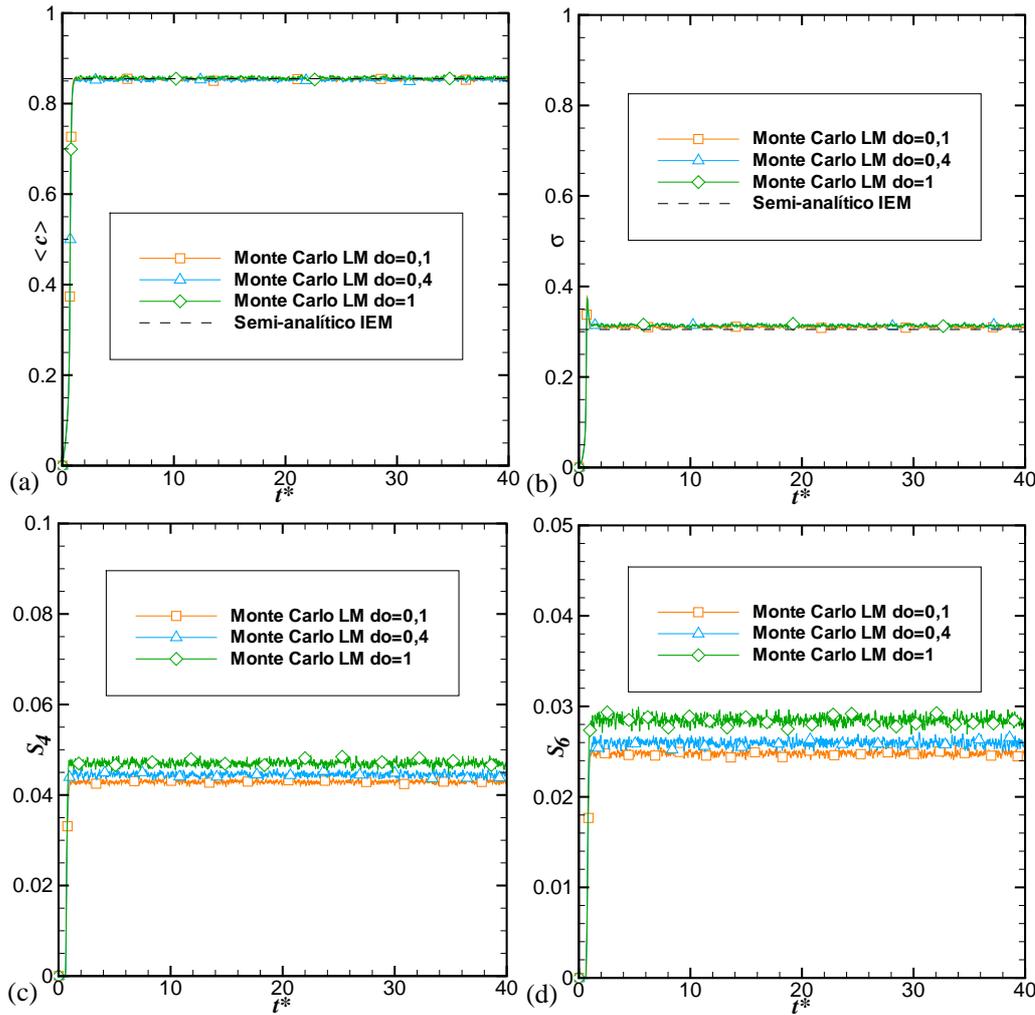


Figura 5.21: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  para o modelo de mistura de Langevin (LM) e para diferentes valores de  $d_0$ . (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hipercurtose  $S_6$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

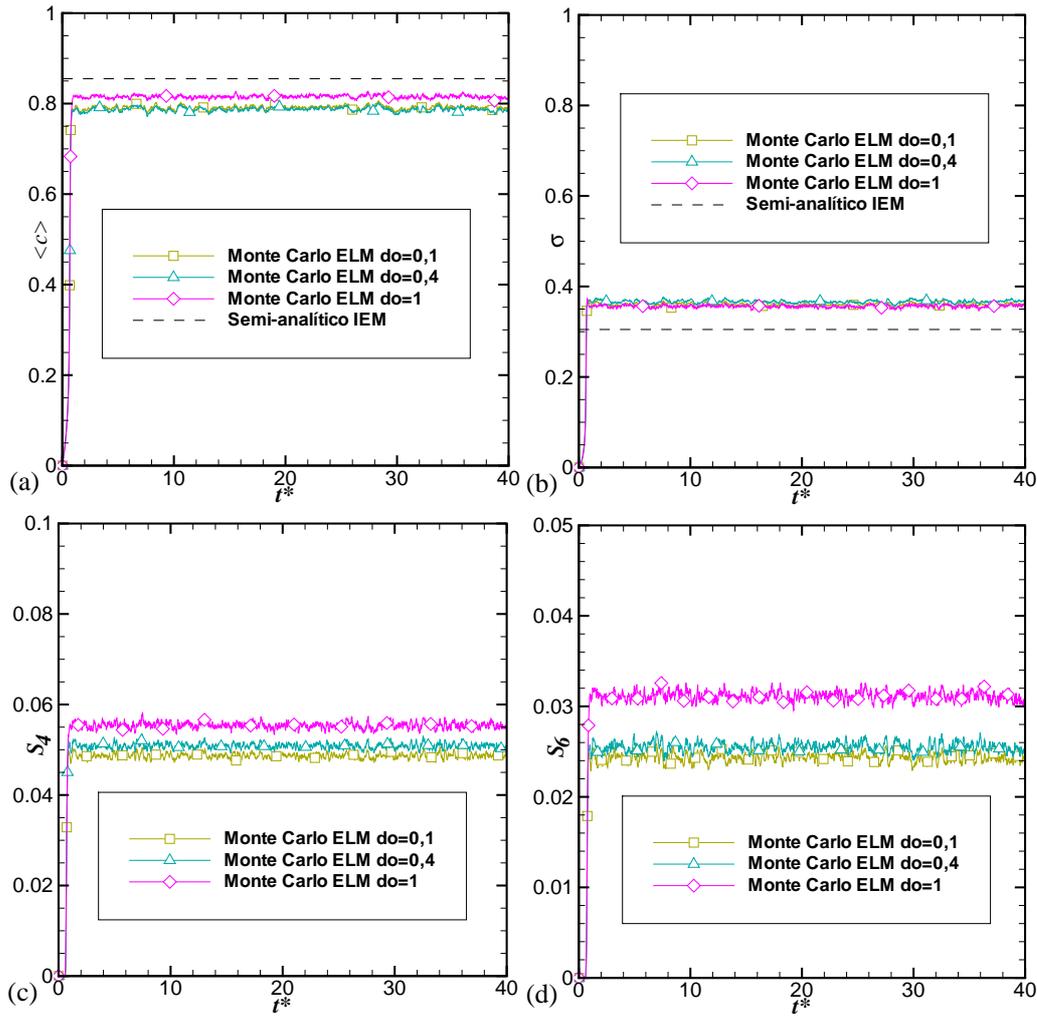


Figura 5.22: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $Z = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$  para o modelo de mistura de Langevin estendido (ELM) e para diferentes valores de  $d_0$ . (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose 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

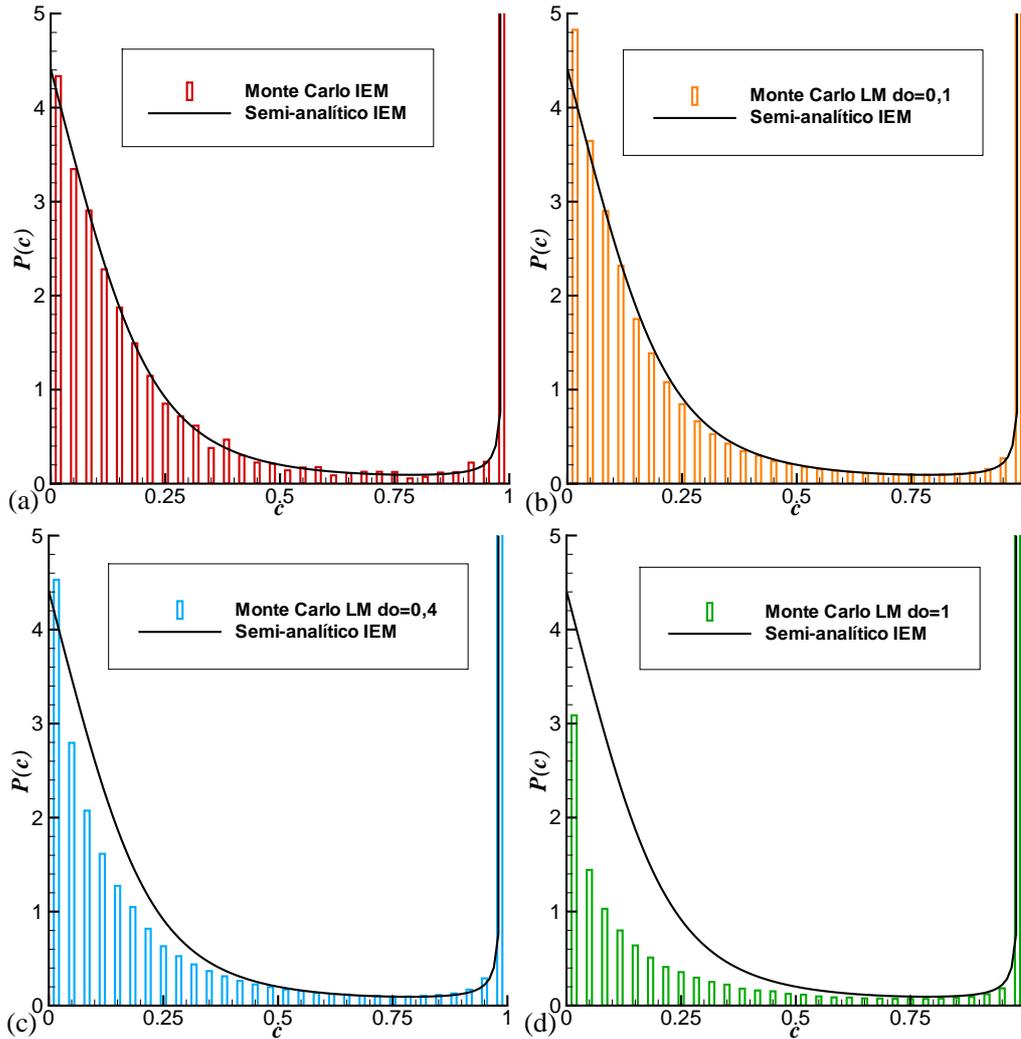


Figura 5.23: Comparação entre a PDF teórica (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de  $c$  para  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$  e para os modelos de mistura (a) IEM; (b) LM  $d_0 = 0,1$ ; (c) LM  $d_0 = 0,4$ ; (d) LM  $d_0 = 1$ . Regime de combustão moderada.

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 (EIEM) 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 EIEM. 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 EIEM difere significativamente daquela obtida pelo método IEM. A PDF obtida com o modelo EIEM 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 EIEM 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

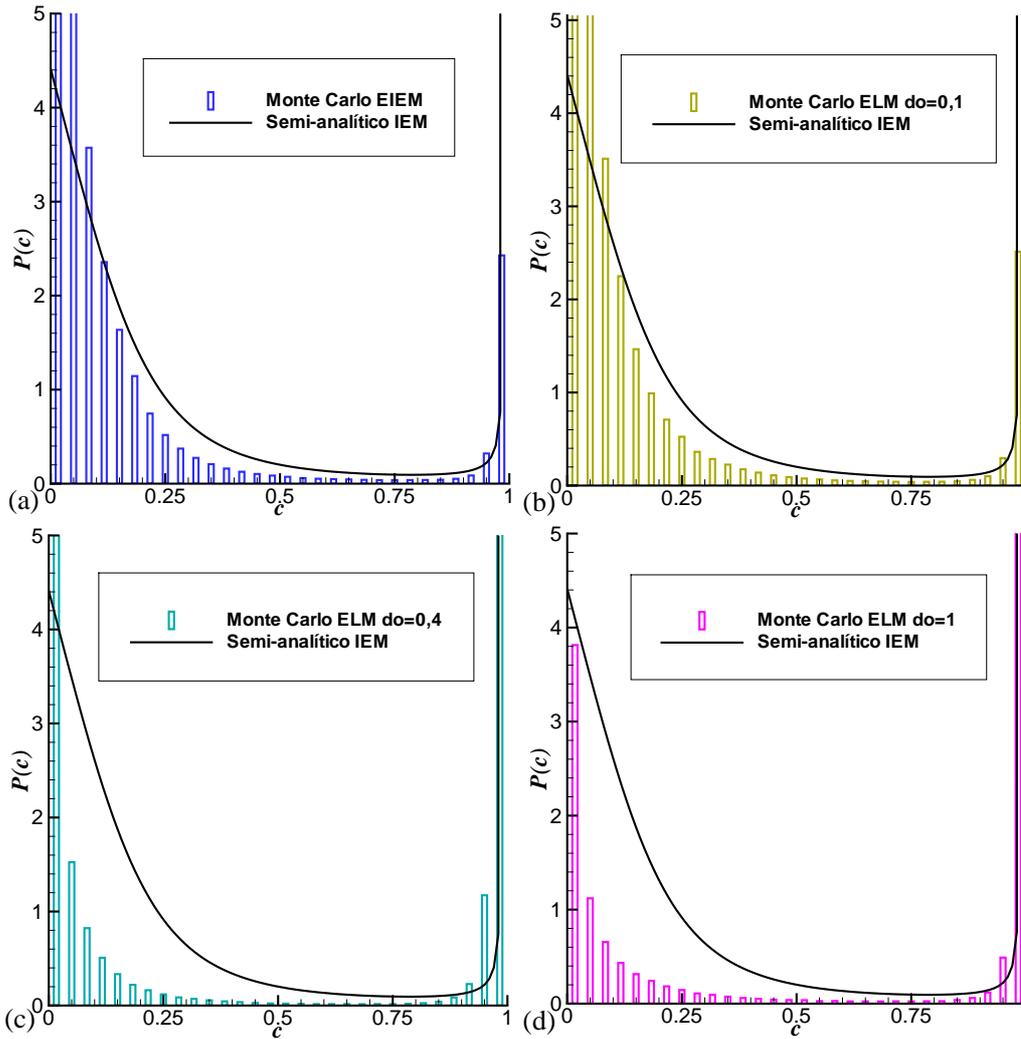


Figura 5.24: Comparação entre a PDF teórica (linhas) e as PDFs simuladas (histogramas) de  $c$  para  $Z = 0,5$  e  $Y = 0,042$  e para os modelos de mistura (a) EIEM; (b) ELM  $d_0 = 0,1$ ; (c) ELM  $d_0 = 0,4$ ; (d) ELM  $d_0 = 1$ . Regime de combustão moderada.

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

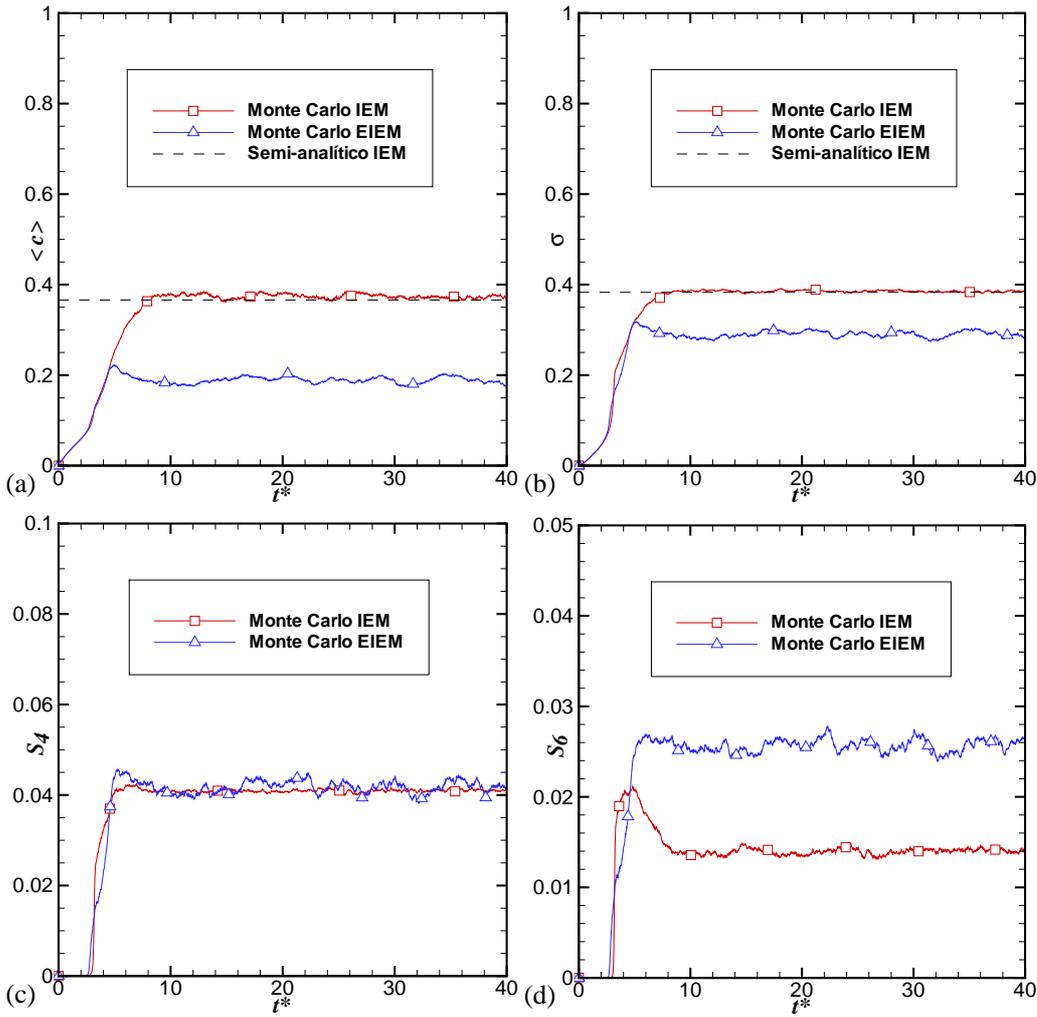


Figura 5.25: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $Z = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$  e para os modelos de mistura IEM e EIEM. (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose  $S_6$ . Regime de combustão moderada.*

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

Este comportamento do modelo EIEM 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 EIEM.

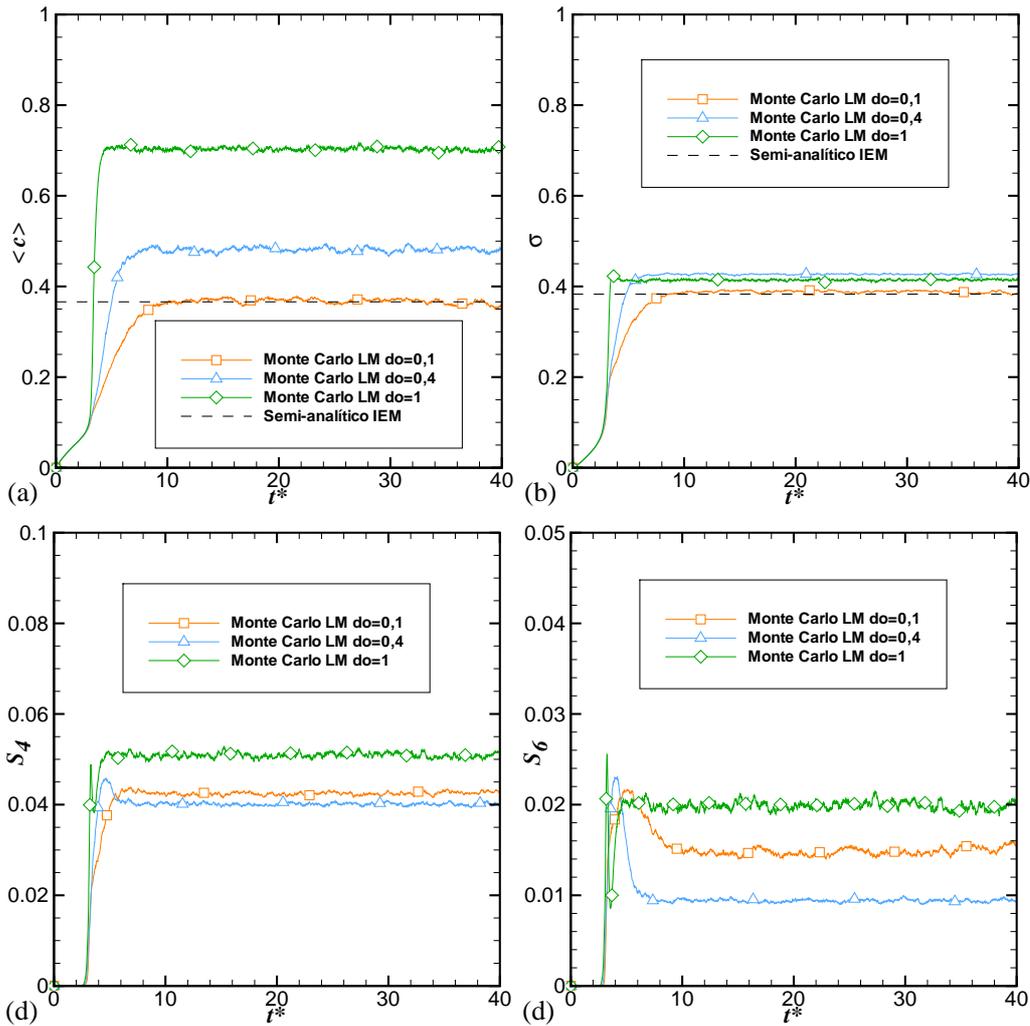


Figura 5.26: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$  para o modelo de mistura de Langevin (LM) e para diferentes valores de  $d_0$ . (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hipercurtose 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

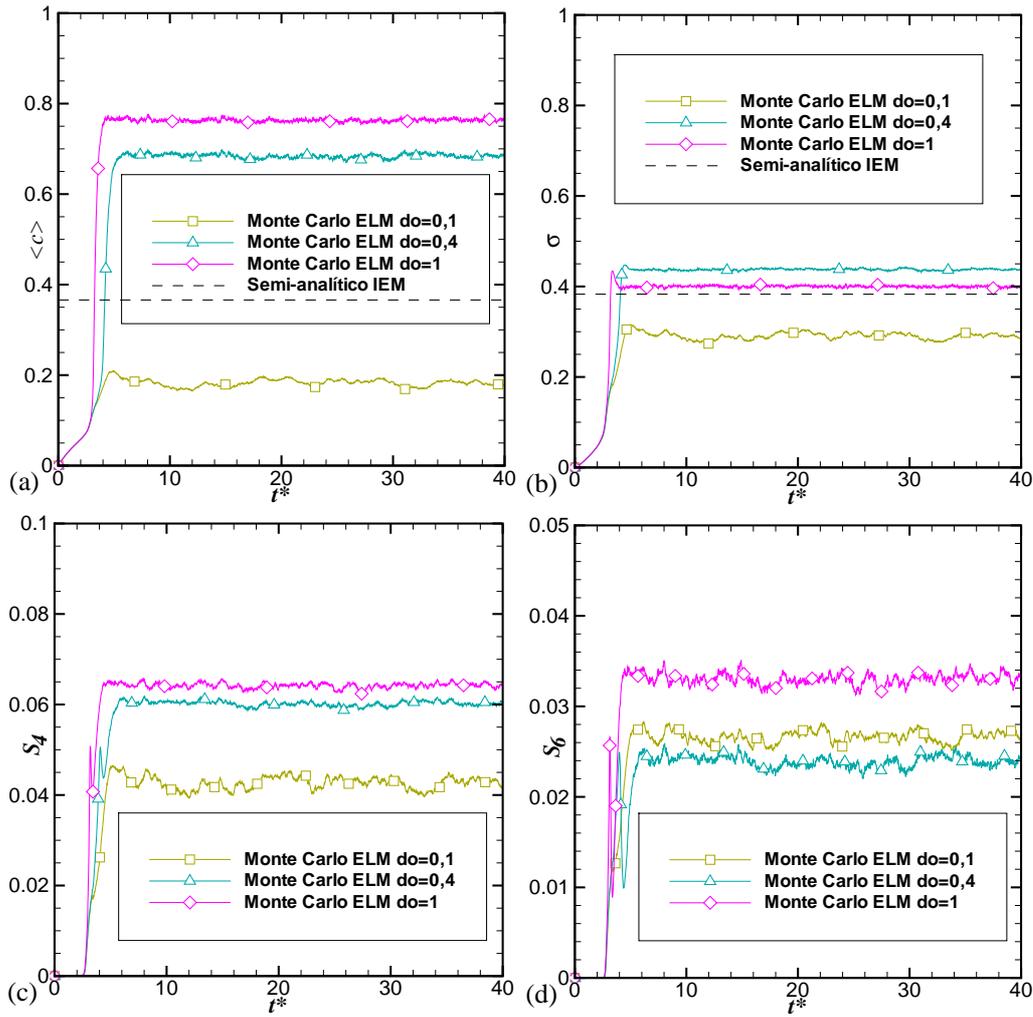


Figura 5.27: *Histórico dos momentos estatísticos da PDF de  $c$  para  $Z = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$  para o modelo de mistura de Langevin Estendido (ELM) e para diferentes valores de  $d_0$ . (a) Média  $\langle c \rangle$ ; (b) Desvio padrão  $\sigma$ ; (c) Curtose  $S_4$ ; (d) Hiper-curtose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

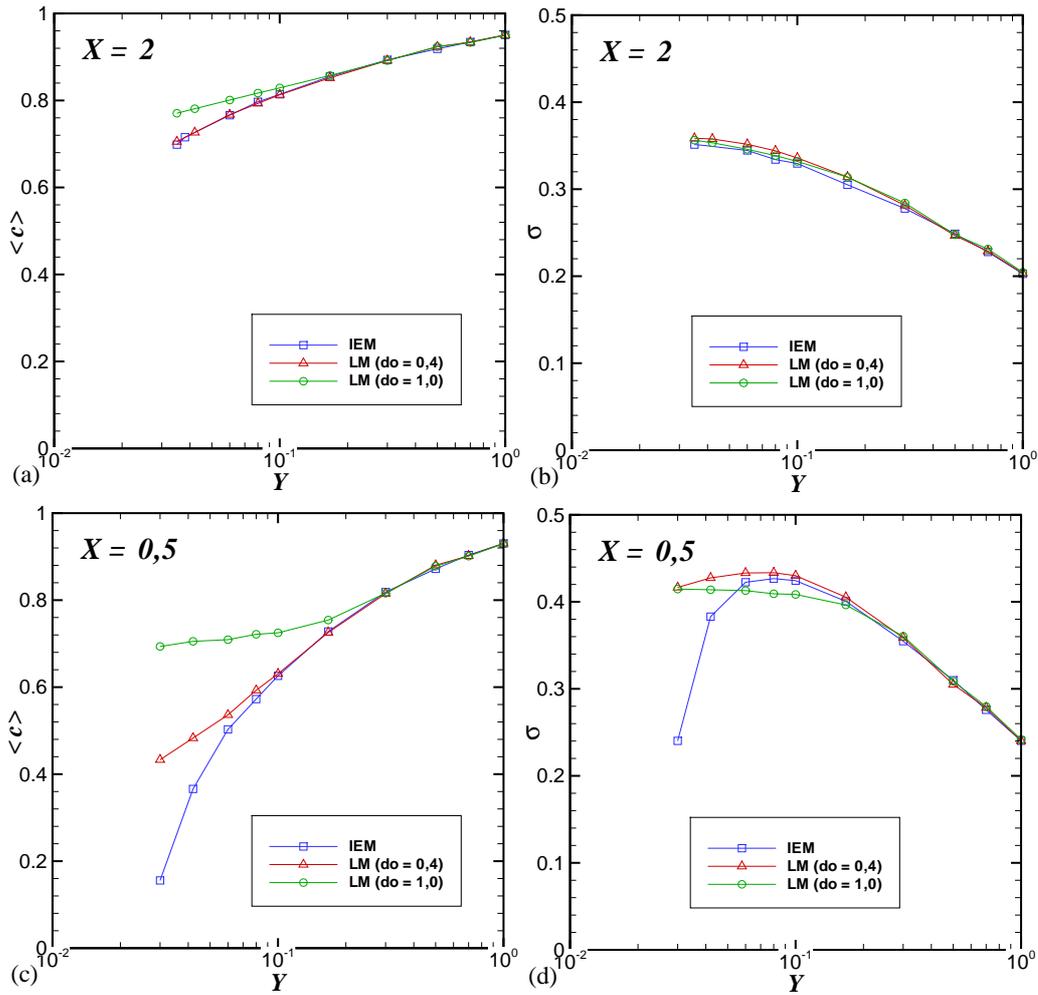


Figura 5.28: Comparação da Média (a) e (c); e Desvio padrão (b) e (d); da variável de progresso da reação  $c$  calculados pelos modelos IEM e Langevin com  $d_0 = 0,4$  e  $1$ , como função de  $\mathcal{Y}$  e para mistura rápida ( $\mathcal{X} = 2$ ) e lenta ( $\mathcal{X} = 0,5$ ).

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  $\sigma$  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  $c$ .

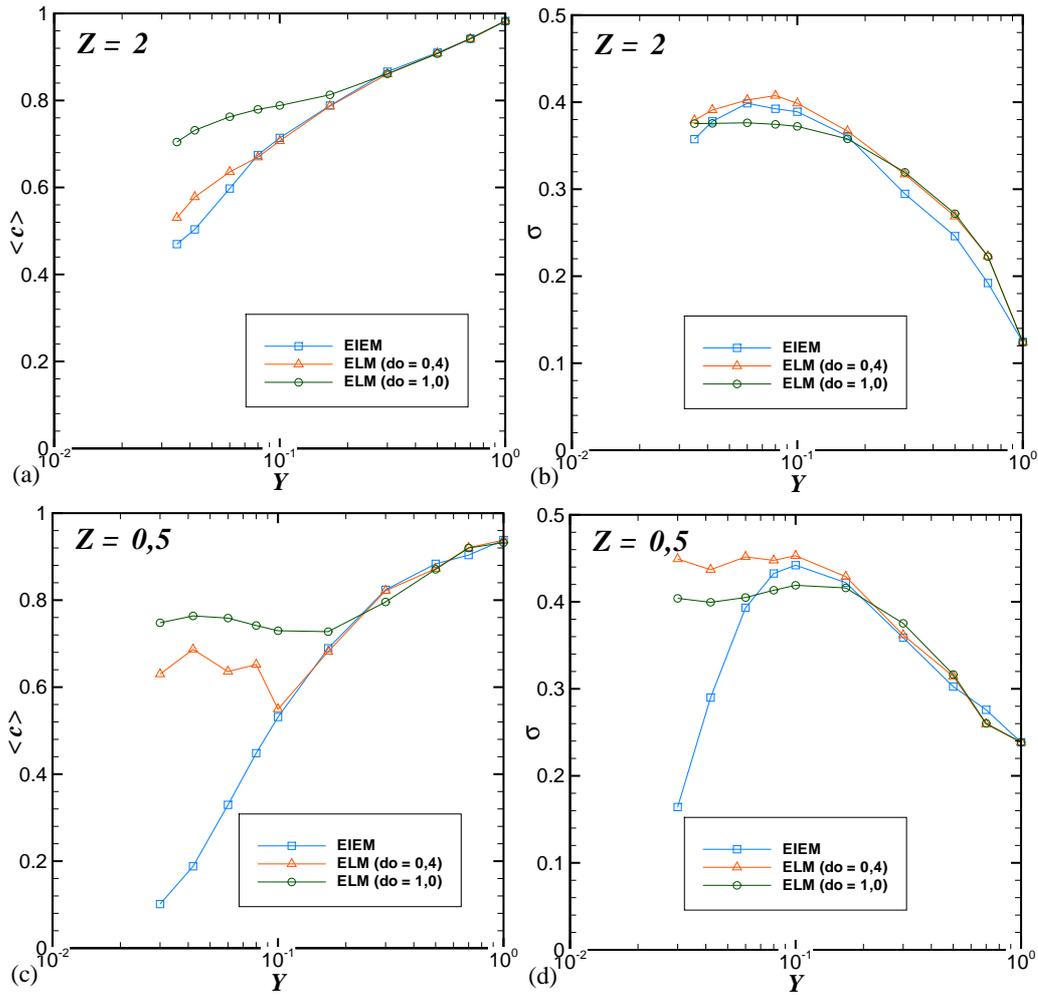


Figura 5.29: Comparação da Média (a) e (c); e Desvio padrão (b) e (d); da variável de progresso da reação  $c$  calculados pelos modelos EIEM e ELM com  $d_0 = 0,4$  e  $1$ , como função de  $\mathcal{Y}$  e para mistura rápida ( $Z = 2$ ) e lenta ( $Z = 0,5$ ).

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  $\sigma$  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  $\sigma$  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  $\sigma$  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 ( $d_0 = 1$ )		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$
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 ( $d_0 = 1$ )		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$
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 ( $d_0 = 1$ )		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$
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 ( $d_0 = 1$ )		
$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$	$\mathcal{Y}$	$\langle c \rangle$	$\sigma$
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,  $\mathcal{Z} = 0, 5$ .

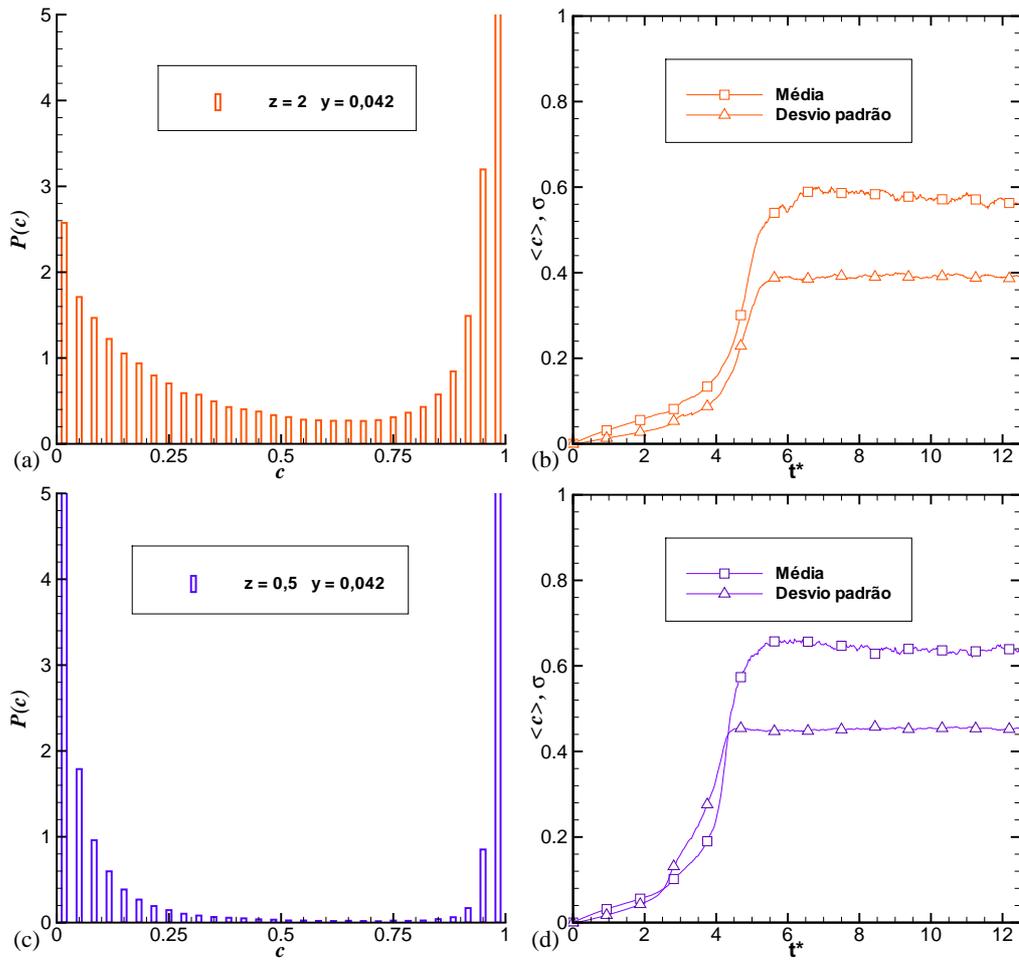


Figura 5.30: PDFs e momentos estatísticos de  $c$  utilizando o modelo ELM para  $d_0 = 0,4$  na operação do PaSR em um regime de combustão moderada ( $\mathcal{Y} = 0,042$ ) para o caso de: (a) e (b) mistura rápida ( $\mathcal{X} = 2$ ), (c) e (d) mistura lenta ( $\mathcal{X} = 0,5$ ).

## 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  $\sigma$  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.

## Referências Bibliográficas

- [Banerjee e Ierapetritou] BANERJEE, I.; IERAPETRITOU, M. G.. **Development of an adaptive chemistry model considering micromixing effects**. Chemical Engineering Science, 58:4537–4555, 2003. 3.5.2
- [Béguier *et al.*] BÉGUIER, C.; DEKEYSER, I. ; LAUNDER, B. E.. **Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow turbulence**. Physics of Fluids, 21(3):307–310, 1978. 4.3
- [Bilger *et al.*] BILGER, R. W.; POPE, S. B.; BRAY, K. N. C. ; DRISCOLL, J. F.. **Paradigms in turbulent combustion research**. Proceedings of the Combustion Institute, 30:21–40, 2005. 1.1, 1.2
- [Borghì e Champion] BORGHI, R.; CHAMPION, M.. **Modélisation et théorie des flammes**. Technip, 1 edition, 2000. 5.2.3
- [Burrage e Tian] BURRAGE, K.; TIAN, T.. **A note on the stability properties of the euler methods for solving stochastic differential equations**. New Zealand Journal of Mathematics, 29(2):115–129, 2000. 4.8, 4.8
- [Burrage e Tian] BURRAGE, K.; TIAN, T.. **The composite euler method for stiff stochastic differential equations**. Journal of Computational and Applied Mathematics, 131:407–426, 2001. 2.2
- [Chang] CHANG, W. C.. **Modeling of NO<sub>x</sub> Formation in Turbulent Flames - Development of Reduced Mechanism and Mixing Models**. PhD thesis, University of California, Berkeley, 1995. 1.1, 3.1, 3.5.1
- [Chen *et al.*] CHEN, H.; CHEN, S. ; KRAICHNAN, R. H.. **Probability distribution of a stochastically advected scalar field**. Physics Review Letters, 63:2657–2660, 1989. 2.1
- [Chen] CHEN, J.. **Stochastic modeling of partially stirred reactors**. Combustion Science Technology, 122:63–94, 1997. 1.1, 3.5.1, 3.5.2, 4.1, 4.7

- [Correa] CORREA, S. M.. **Turbulence–chemistry interactions in the intermediate regime of premixed combustion.** *Combustion and Flame*, 93:41–60, 1993. 1.2, 2.1, 3.5.1
- [Correa] CORREA, S. M.. **A direct comparison of pair-exchange and iem models in premixed combustion.** *Combustion and Flame*, 103:194–206, 1995. 1.2, 4.7
- [Curl] CURL, R. L.. **Dispersed phase mixing: I. theory and effects in simple reactors.** *AIChE Journal*, 9:175–181, 1963. 1.4, 2.1, 4.4
- [Dopazo e O'Brien] DOPAZO, C.; O'BRIEN, E.. **An approach to the autoignition of a turbulent mixture.** *Acta Astronautica*, 1:1239–1266, 1974. 2.1, 4.4, 4.4.3
- [Dopazo] DOPAZO, C.. **Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields.** *Physics of Fluids*, 22:20–30, 1979. 2.1, 4.1, 4.4, 4.4.2, 4.4.2, 5.1.2
- [Dopazo] DOPAZO, C.. **Recent developments in pdf methods.** *Turbulent Reactive Flows*, 1:375–474, 1994. 2.1, 3.1, 4.2.2, A.2
- [Eswaran e Pope] ESWARAN, W.; POPE, S. B.. **Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar.** *Physics of Fluids*, 31:506–520, 1988. 2.1, 4.2.5, 4.2.7, 4.3, 5.1.3, 5.1.4, 5.1.4, 6
- [Flagan e Appleton] FLAGAN, R. C.; APPLETON, J. P.. **A stochastic model of turbulent mixing with chemical reaction - nitric oxide formation in a plug-flow burner.** *Combustion and Flame*, 23:249–267, 1974. 4.4
- [Fox] FOX, R. O.. **Computational Model for Turbulent Reacting Flows.** Cambridge, 2 edition, 2003. 2.1, 3.1, 3.3, 3.4, 3.4, 4.1, 4.2.3, A.2
- [Gardiner] GARDINER, C.. **Handbook of Stochastic Methods.** Springer, Berlin, 3 edition, 1990. 2.1, 2.2, 2.2, 4.4.3, 4.5.1, 4.5.2, 4.6.3, 4.7, 4.7, 4.8, 4.8, 5.1.3
- [Guerra] GUERRA, J.. **Introdução às equações diferenciais estocásticas.** Technical report, Núcleo de matemática financeira (NMF) - CEMAPRE, 2005. 2.2
- [Harworth e Pope] HARWORTH, D. C.; POPE, S. B.. **A generalized langevin model for turbulent flow.** *Physics of Fluids*, 29:387–405, 1985. 2.1

- [Heinz] HEINZ, S.. **Statistical Mechanics of Turbulent Flows**. Springer-Verlag, Berlin, 1 edition, 2003. 2.2, 2.2, 3.1, 4.3
- [Higham] HIGHAM, D. J.. **An algorithmic introduction to numerical simulations of stochastic differential equations**. Society for Industrial and Applied Mathematics, 43(3):525–546, 2001. 2.2, 2.2
- [Higham e Kloeden] HIGHAM, D. J.; KLOEDEN, P. E.. **Maple and matlab for stochastic differential equations**. Programming Language and System in Computational Economics and Finance, 3:1–31, 2001. 2.2
- [Hill] HILL, J. C.. **Zero diffusivity invariance for turbulent chemical reaction**. Physics of Fluids Journal, 13:1394–1396, 1969. 2.1, 4.4
- [Itô] ITO, K.. **Differential equations determining a markov process**. Kiyosi Ito Selected Papers, Springer-Verlag, 1986, 22(1–3):81–101, 1942. 2.2
- [Jaberi *et al.*] JABERI, F.; MADNIA, R. ; GIVI, C. K.. **Non-gaussian scalar statistics in homogeneous turbulence**. Journal of Fluid Mechanics, 313:241–282, 1996. 4.2.5
- [Janicka, *et al.*] JANICKA, J.; KOLBE, W. ; KOLLMAN, W.. **Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields**. Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, 4:47–66, 1979. 2.1, 4.4, 4.4.2, 4.4.2
- [Kloeden e Platen] KLOEDEN, P. E.; PLATEN, E.. **Numerical Solution os Stochastic Differential Equations**. Springer, Berlin, 1 edition, 1992. 2.2, 4.8, 4.8
- [Kloeden, *et al.*] KLOEDEN, P. E.; PLATEN, E. ; SCHURZ, H.. **Numerical Solution of SDE Through Computer Experiments**. Springer-Verlag, Berlin, 1 edition, 2003. 2.2
- [Lundgren] LUNDGREN, T. S.. **Distributions functions in the statistical theory of turbulence**. Physics of Fluids, 10:969–975, 1967. 2.1, A.2
- [Majda e Kramer] MAJDA, A. J.; KRAMER, P. R.. **Simplified models for turbulent diffusion : Theory, numerical modelling and physical phenomena**. Phisycs Reports, 314:237–574, 1999. 4.2.5
- [Milstein *et. a/*] MILSTEIN, G. N.; PLATEN, E. ; SCHURZ, H.. **Balanced implicit methods for stiff stochastic systems**. Journal of Numerical Analysis, Society for Industrial and Applied Mathematics, 35:1010–1019, 1998. 2.2

- [Monin] MONIN, A. S.. **Equations of turbulent motion**. Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 31:1057–1068, 1967. 2.1
- [Peters] PETERS, N.. **Turbulent Combustion**. Cambridge University Press, Cambridge, 1 edition, 2000. 4.4.1
- [Poinot e Veynante] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.. **Theoretical and Numerical Combustion**. Edwards, 2 edition, 2005. 4.6.1
- [Pope] POPE, S. B.. **Transport equation for the joint probability density function of velocity and scalars in turbulent flow**. Physics of Fluids, 24:588–596, 1981. 4.4
- [Pope] POPE, S. B.. **An improved turbulent mixing model**. Combustion Science and Technology, 28:131–145, 1982. 2.1, 4.3, 4.4, 4.4.1, 4.4.2, 4.4.2, 2
- [Pope] POPE, S. B.. **Pdf methods for turbulent reactive flows**. Progress in Energy and Combustion Science, 11:119–192, 1985. (document), 1.1, 2.1, 3.1, 3.3, 3.3, 4.1, 4.2.3, 4.4.3, 4.5.1, 4.5.1, A.1, A.2, A.2
- [Pope e Chen] POPE, S. B.; CHEN, Y. L.. **The velocity–dissipation probability function model for turbulent flows**. Physics of Fluids, 2:1437–1449, 1990. 2.1, 3.1, 3.2.1, 4.5.2, 4.5.2, 4.5.2
- [Pope] POPE, S. B.. **Mapping closures for turbulent mixing and reaction**. Theoretical and Computational Fluid Dynamics, 2:255–270, 1991. 2.1
- [Pope] POPE, S. B.. **On the relationship between stochastic langrangian models of turbulence and second moment closures**. Physics of Fluids, 6:793–349, 1994a. 3.4
- [Pope] POPE, S. B.. **Langranian pdf method for turbulent flows**. Annual Reviews of Fluid Mechanics, 26:23–63, 1994b. A.2
- [Pope] POPE, S. B.. **Turbulent Flows**. Cambridge, 1 edition, 2000. 3.2.1, 4.1, 4.2
- [Pratt] PRATT, D. T.. **Coalescence/dispersion modeling of high-intensity combustion monte carlo stochastic model including finite-rate complex chemistry**. American Institute of Aeronautics and Astronautics, Aerospace Sciences Meeting, 17th, New Orleans, p. 15–17, 1979. 4.4

- [Sabel`nikov e Gorokhovski] SABEL`NIKOV, V. A.; GOROKHOVSKI, M.. **Extended Imse and langevin models of the scalar mixing in turbulent flows**. Second International Symposium of Turbulence an Shear Flow Phenomena, Royal Institute of Technology (KTH), 4:27–29, 2001. 1.2, 1.3, 1.4, 2.1, 2.2, 4, 4.5, 4.5.1, 4.5.1, 4.5.1, 4.5.1, 4.5.2, 4.5.2, 4.5.2, 4.5.2, 4.6.3, 4.7, 5, 5.1.3, 5.1.3, 5.1.3, 5.2, 6
- [Sabel`nikov e Figueira da Silva] SABEL`NIKOV, V. A.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F.. **Partially stirred reactor: Study of the sensitivity of the monte-carlo simulation to the number of stochastic particles with the use of a semi-analytic steady-state solution to the pdf equation**. Combustion and Flame, 129:164–178, April 2002. (document), 4.1, 4.6, 4.6.3, 4.4, 4.7, 5.2.1, 5.2.2, 5.2.2, 5.2.3, 5.2.3, 6
- [Sabel`nikov et al.] SABEL`NIKOV, V. A.; GOROKHOVSKI, M. ; BARICAULT, N.. **The extended iem mixing model in the framework of the composition pdf approach: Aplicacions to diesel spray combustion**. Combustion Theory and Modeling, 10(1):155–169, 2005. 2.1
- [Soulard et al.] SOULARD, O.; SABEL`NIKOV, V. A. ; GOROKHOVSKI, M.. **Stochastic scalar mixing model accounting for turbulent frequency multiscale fluctuations**. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2004. 2.1, 2.2, 4.5.1, 4.5.2
- [Soulard] SOULARD, O.. **Approches PDF pour la Combustion Turbulente: Prise en Compte d'un Spectre D'echelles Turbulentes dans la Modélisation du Micromélange et Élaboration d'une Méthode de Monte Carlo Eulériene**. PhD thesis, Complexe de Recherche Interpressionnel en Areothermochime CORIA -ONERA, 2005. (document), 4.1, 4.2.4, 4.2.5, 4.4.3, 4.5.2, 4.5.2, 4.7, 5.1.4, 5.1.4, 5.16, 5.17, 6
- [Spalding] SPALDING, D. B.. **Mixing and chemical reaction in confined turbulent flames**. 13th International Symposium on Combustion, p. 649–657, 1971. 4.3
- [Spielman e Levenspiel] SPIELMAN, L. A.; LEVENSPIEL, O.. **A monte carlo treatment for reacting and coalescing dispersed phase systems**. Chemical Engineering Science, 20:247–251, 1965. 2.1
- [Subramaniam e Pope] SUBRAMANIAM, S.; POPE, S. B.. **A mixing model for turbulent reactive flows based on euclidiean minimum spanning trees**. Combustion and Flame, 115(4):487–514, 1998. 1.2, 4.2, 4.2.6, 4.2.7

- [Tian e Burrage] TIAN, T.; BURRAGE, K.. **Implicit Taylor methods for stiff stochastic differential equations**. Applied Numerical Mathematics, 38:167–185, 2001. 2.2, 4.8, 4.8, 4.8, 4.8, 5.1.3, 6
- [Valiño e Dopazo] VALINO, L.; DOPAZO, C.. **A binomial sampling model for scalar turbulent mixing**. Physics of Fluids, 2:1204–1212, 1990. 2.1, 4.2.3, 4.4
- [Valiño e Dopazo] VALINO, L.; DOPAZO, C.. **A binomial Langevin model for scalar turbulent mixing**. Physics of Fluids, 3:3034–3037, 1991. 2.1, 4.4
- [Valiño] VALINO, L.. **Monte Carlo implementation of a single-scalar mapping closure for diffusion in the presence of chemical reaction**. Annual Research Briefs, 1991. 2.1
- [Valiño e Gao] VALINO, L.; GAO, F.. **Monte Carlo implementation of mapping closures: Application to a chemical reacting flows**. Physics of Fluids, 4:2062, 1992. 2.1
- [Villermaux e Devillon] VILLERMAUX, J.; DEVILLON, J.. **Représentation de la redistribution des domaines de ségrégation dans un fluide par un modèle d'interaction phénoménologique**. 2nd. Symposium Chemical Reaction Engineering, B:1–13, 1972. 4.4.3
- [Warhaft e Lumley] WARHAFT, Z.; LUMLEY, J. L.. **An experimental study of the decay of temperature fluctuations in grid-generated turbulence**. Journal of Fluids Mechanics, 88:659, 1978. 2.1, 4.2.5, 4.2.7, 4.3
- [Yeung e Pope] YEUNG, P. K.; POPE, S. B.. **Lagrangian statistics from direct numerical simulations of isotropic turbulence**. Journal of Fluid Mechanics, 207:531–586, 1989. 4.5.2
- [Zeldovich *et al.*] ZELDOVICH, Y. B.; BARENBLATT, G. I.; LIBROVICH, V. B. ; MAKHVILADZE, G. M.. **The Mathematical Theory of Combustion and Explosions**. Plenum Press, New York, 1 edition, 1985. 3.5.1

## A

### Derivação das Equações de Transporte da PDF

Neste apêndice será derivada a equação de transporte da Função de Densidade de Probabilidade (PDF) conjunta do campo de velocidade, das frações mássicas das espécies químicas e da entalpia total,  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{U}, \mathbf{Y}, h}(\mathbf{V}, \Gamma, H; \mathbf{x}, t)$ , a partir das equações de transporte de massa das espécies químicas, de quantidade de movimento e de energia escrita sob a forma de entalpia total.

#### A.1

##### Equações de Transporte

O estado de uma mistura gasosa composta por  $K$  espécies é completamente descrito pelas frações mássicas  $Y_k(\mathbf{x}, t)$  das  $k$  espécies químicas ( $k = 1, \dots, K$ ), pela entalpia total  $h_t(\mathbf{x}, t)$ , a pressão  $p(\mathbf{x}, t)$  e a velocidade  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ , (Pope, 1985). A densidade,  $\rho$ , pode ser escrita como uma função das frações mássicas  $Y_k$ , da entalpia estática  $h$  e da pressão  $p$ , mediante a utilização de uma equação de estado:

$$\rho = \rho(Y_k, h_t, p). \quad (\text{A-1})$$

Neste trabalho, admite-se que a evolução de um escoamento é governada pelas equações de transporte de massa, das espécies químicas, de quantidade de movimento e da energia sob a forma da entalpia total, isto é

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i; \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{A-2})$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_{kj}}{\partial x_j} + S_k; \quad k = 1, \dots, K. \quad (\text{A-3})$$

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j h_t}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial (-\mathcal{J}_j + U_i \tau_{ij})}{\partial x_j} + U_j F_j. \quad (\text{A-4})$$

Nestas equações  $\tau_{ij}$  é o tensor das tensões viscosas e  $F_i$  é a força de corpo,  $J_{kj}$  é o fluxo molecular difusivo da espécie  $k$  na direção  $j$ , e  $S_k$  é a taxa de reação desta espécie química por unidade de volume. A taxa de reação é função das frações mássicas, da pressão e da temperatura e, uma vez que a temperatura  $T(\mathbf{x}, t)$  depende das frações mássicas  $Y_k$ , da entalpia estática  $h$  e

da pressão  $p$  tem-se que,  $S_k = S_k(Y_k, h, p)$ . Note-se da Eq. (A-4) que os termos que representam a potência devido às forças viscosas e de corpo são  $U_i \tau_{ij}$  e  $U_j F_j$ , respectivamente.

Estas equações de transporte são fechadas pelas expressões do fluxo molecular das espécies químicas do tensor de tensões viscosas. Neste trabalho os fluidos são assumidos Newtonianos, caso em que o tensor devido aos efeitos viscosos é dado por:

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left( \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \right), \quad (\text{A-5})$$

onde a viscosidade  $\mu$ , depende das propriedades do fluido e  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker. O fluxo por difusão molecular das espécies será descrito mediante a utilização da lei de Fick

$$J_{kj} = - \frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}, \quad (\text{A-6})$$

onde  $J_{kj}$  é o fluxo mássico das espécie  $k$  na direção  $j$ , enquanto que  $Sc_k$  representa o número de Schmidt

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k}, \quad (\text{A-7})$$

nesta equação  $D_k$  representa a difusividade molecular das espécie química  $k$ . O fluxo de difusão da entalpia é descrito pela lei de Fourier

$$\mathcal{J}_j = - \frac{\mu}{Pr} \left[ \frac{\partial h}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^K \left( \frac{Pr}{Sc_k} - 1 \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right]. \quad (\text{A-8})$$

Na Eq. (A-8), a transferência de calor por radiação e o efeito Duffour, isto é, a difusão da entalpia devido ao gradiente das frações das espécies foram desprezados. O termo,  $\mathcal{J}_j$  representa o fluxo de energia devido ao transporte molecular e  $h_k$  é a entalpia estática de cada um das espécies  $k$  presentes no escoamento,

$$h_k = h_k^o + \int_{T_o}^T c_{p,k} dT. \quad (\text{A-9})$$

onde  $h_k^o$  é a entalpia (calor) de formação da espécie  $k$  e  $c_{p,k}$  é o calor específico a pressão constante da espécie  $k$ . O número de Prandtl  $Pr$  compara o transporte difusivo de quantidade de movimento (forças viscosas) e a difusividade térmica

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}. \quad (\text{A-10})$$

Nesta equação  $c_p$  e  $\lambda$  representam, respectivamente, o calor específico médio a pressão constante e a condutividade térmica do fluido. O número de

Lewis da espécie química  $k$ ,  $Le_k$ , que é a relação entre a difusividade térmica e a difusividade da espécie  $k$  é definido como

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}. \quad (\text{A-11})$$

Note-se que a equação de continuidade pode ser obtida a partir da soma em  $k$  da Eq. (A-3),

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_j} = 0. \quad (\text{A-12})$$

Neste estudo utilizaremos a hipóteses da igualdade dos coeficientes de difusão molecular  $D_k \approx D$ , o que tem como consequência que os números de Schmidt e Lewis são iguais para todas as espécies químicas. Além disso, será utilizada a hipótese de número Lewis igual à unidade. Utilizando a hipótese de número de Mach pequeno, o termo transiente de pressão  $\partial p / \partial t$ , e o termo de dissipação viscosa  $\partial U_i \tau_{ij} / \partial x_j$ , podem ser desprezados. Além disto, a energia cinética é muito menor do que a entalpia estática, logo  $h \approx h_t$ .

Com estas hipóteses e, mediante a utilização da equação de continuidade, as equações de transporte de massa, das espécies químicas e da entalpia, podem ser escritas como

$$\rho \frac{D}{Dt} \begin{Bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ Y_1 \\ \vdots \\ Y_K \\ h \end{Bmatrix} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \begin{Bmatrix} -\tau_{1j} \\ -\tau_{2j} \\ -\tau_{3j} \\ J_{1j} \\ \vdots \\ J_{Kj} \\ \mathcal{J} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} -\partial p / \partial x_1 + F_1 \\ -\partial p / \partial x_2 + F_2 \\ -\partial p / \partial x_3 + F_3 \\ S_1 \\ \vdots \\ S_K \\ S_h \end{Bmatrix}, \quad (\text{A-13})$$

ou de uma forma mais compacta,

$$\rho \frac{D\Phi}{Dt} = -\rho \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial x_j} + \mathbf{S}, \quad (\text{A-14})$$

onde  $\Phi$  é o vetor que representa as propriedades transportadas,  $\mathbf{J}$  e  $\mathbf{S}$  representam os vetores dos fluxos difusivos e do termo produção:

$$\Phi = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ Y_1 \\ \vdots \\ Y_K \\ h \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} -\tau_{1j} \\ -\tau_{2j} \\ -\tau_{3j} \\ J_{1j} \\ \vdots \\ J_{Kj} \\ \mathcal{J} \end{pmatrix}, \quad e \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} -\partial p/\partial x_1 + F_1 \\ -\partial p/\partial x_2 + F_2 \\ -\partial p/\partial x_3 + F_3 \\ S_1 \\ \vdots \\ S_K \\ S_h \end{pmatrix}. \quad (\text{A-15})$$

Nas Eqs. (A-13) e (A-14) foi empregada a igualdade:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + U_j \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (\text{A-16})$$

que representa a derivada material de uma partícula de fluido. Uma formulação alternativa, muito utilizada na derivação da equação de transporte da função densidade de probabilidade (PDF) conjunta, é

$$\rho \frac{DU_i}{Dt} = \rho A_i, \quad \text{onde} \quad \rho A_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A-17})$$

$$\rho \frac{DY_k}{Dt} = \rho C_k, \quad \text{onde} \quad \rho C_k(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial J_{kj}}{\partial x_j} + S_k, \quad k = 1, \dots, K \quad (\text{A-18})$$

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \rho C_h, \quad \text{onde} \quad \rho C_h(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial \mathcal{J}_j}{\partial x_j} + S_h, \quad (\text{A-19})$$

onde o termo  $\rho A_i$  representa a aceleração da partícula,  $\rho C_k$  e  $\rho C_h$  representam, respectivamente, as taxas de variação das frações mássicas das espécies químicas e da entalpia.

Note-se que, com as hipóteses do número de Lewis unitário e considerando a energia cinética como desprezível em comparação com a entalpia estática, o fluxo difusivo da entalpia estática  $\mathcal{J}$  dado pela Eq. (A-8) pode ser escrito como

$$\mathcal{J}_j = -\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j}. \quad (\text{A-20})$$

Com estas hipóteses,  $S_h$  é nulo.

## A.2

### Equação de Transporte da PDF

A partir das hipóteses adotadas, o estado instantâneo do fluido em qualquer posição é completamente descrito pelas três componentes da velocidade  $\mathbf{U} = (U_1, U_2, U_3)$ , por um conjunto de  $K$  frações mássicas  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_K)$ , pela entalpia  $h$  e pela pressão,  $p$ . Assim, uma descrição completa de um escoamento turbulento reativo pode ser realizada mediante a utilização da PDF conjunta dos campos de velocidade, das frações mássicas e da entalpia.

Existem diversas maneiras de derivar a equação de transporte da PDF. Um método muito utilizado, é aquele desenvolvido por Lundgren, (1967). Porém, neste apêndice será apresentado aquela baseada nos tratamentos de Pope (1985) e Dopazo (1994).

Define-se um conjunto de variáveis aleatórias que representam o estado do fluido  $\Phi(\mathbf{x}, t) = [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t), \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}, t)]$ . A PDF conjunta do campo vetorial  $\Phi$  é definida como

$$\begin{aligned} P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)d\Psi &\equiv Prob\{\Psi \leq \Phi(\mathbf{x}, t) < \Psi + d\Psi\} \\ &\equiv Prob(\{\mathbf{V} \leq \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) < \mathbf{V} + d\mathbf{V}\} \cap \\ &\quad \{\Gamma \leq \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t) < \Gamma + d\Gamma\} \cap \{H \leq h(\mathbf{x}, t) < H + dH\}). \end{aligned} \quad (\text{A-21})$$

Seja  $Q(\Phi) = Q(\mathbf{U}, \mathbf{Y}, h)$  uma função arbitrária do campo aleatório  $\Phi$ . Nota-se, desta definição, que  $Q$  também é um campo aleatório parametrizado por  $\mathbf{x}$  e  $t$ ; ou seja, para cada evento independente de um escoamento turbulento,  $Q$  será diferente. Pode-se definir seu valor médio utilizando as propriedades da PDF de  $\Phi$ . Os valores médios da derivada material de  $Q$ , podem ser expressos em termos de derivadas parciais da PDF conjunta do campo vetorial  $\Phi$ :

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{DQ}{Dt} \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho(\Phi)Q(\Phi) \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho(\Phi)U_j Q(\Phi) \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi)Q(\Psi)P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)d\Psi + \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi)Q(\Psi)U_j P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)d\Psi. \end{aligned} \quad (\text{A-22})$$

A primeira igualdade é verificada pois a média e o operador da derivada são comutativos. A segunda igualdade decorre da definição de média de conjunto (*ensemble average*). Note-se que  $\Psi$  é a variável de integração, o que permite comutar as derivadas e a integral:

$$\left\langle \rho \frac{DQ}{Dt} \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \left\{ \rho(\Psi) \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \rho(\Psi) V_j \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right\} d\Psi. \quad (\text{A-23})$$

Em resumo, devido à natureza linear do operador da derivada, é possível expressar o valor médio da derivada material de  $Q$  em termos das derivadas temporal e espacial da PDF conjunta uniponto da velocidade, das frações mássicas e da entalpia.

O valor médio da derivada material de  $Q$  também pode ser escrito de outra forma. Considerando que

$$\rho \frac{DQ(\Phi)}{Dt} = \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} \frac{D\Phi_i}{Dt} = \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i, \quad (\text{A-24})$$

onde,

$$R_i = \frac{D\Phi_i}{Dt}, \quad i = 1, \dots, K + 4. \quad (\text{A-25})$$

Na Eq. (A-25),  $R_i$  representa a taxa da variação por unidade de volume do campo vetorial  $\Phi$ . Aplicando-se o operador da média à Eq. (A-24)

$$\left\langle \rho \frac{DQ}{Dt} \right\rangle = \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i \right\rangle. \quad (\text{A-26})$$

O lado direito desta expressão contém informação de natureza multi-ponto (Fox, 2003) oriunda da média, dos gradientes e dos laplacianos das propriedades. Uma vez que estas informações não se encontram na formulação do tipo uni-ponto para a PDF de  $\Phi(\mathbf{x}, t)$ , as informações do tipo multi-ponto serão concentradas em um vetor aleatório  $\mathbf{Z}(\mathbf{x}, t)$ , o qual permite definir a PDF conjunta do tipo uni-ponto de  $\Phi$  e  $\mathbf{Z}$  como  $P_{\Phi, \mathbf{Z}}(\Phi, \mathbf{z}; \mathbf{x}, t)$ . Esta PDF pode ser expressa em termos de uma PDF conjunta condicionada e da PDF conjunta do campo vetorial  $\Phi$ , segundo o teorema de Bayes

$$P_{\Phi, \mathbf{Z}}(\Psi, \mathbf{z}; \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{Z}|\Phi}(\mathbf{z}|\Psi; \mathbf{x}, t) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t). \quad (\text{A-27})$$

Assim, o lado direito da Eq. (A-26) pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i \right\rangle &\equiv \\ &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial \Psi_i} R_i(\Psi, \mathbf{z}) P_{\Phi, \mathbf{Z}}(\Psi, \mathbf{z}; \mathbf{x}, t) d\mathbf{z} d\Psi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial \Psi_i} \langle R_i | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi. \end{aligned} \quad (\text{A-28})$$

Nesta equação, o valor médio condicional é definido como

$$\langle R_i | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} R_i(\Psi, \mathbf{z}) P_{\mathbf{z}|\Phi}(\mathbf{z} | \Psi; \mathbf{x}, t) d\mathbf{z}. \quad (\text{A-29})$$

Nota-se que  $\langle R_i | \Psi \rangle$  é função de  $\Psi$ , de modo que o termo do lado direito da Eq. (A-28) pode ser escrito utilizando-se integração por partes:

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) Q(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi \Big|_{\Psi_i=-\infty}^{\Psi_i=+\infty} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} [\rho(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi. \end{aligned} \quad (\text{A-30})$$

A primeira integral do lado direito possui uma dimensão a menos do que a segunda. O primeiro termo do lado direito da Eq. (A-30) está relacionado com o fluxo de probabilidade para as fronteiras do domínio  $(-\infty, +\infty)$ . Para qualquer PDF que represente processo físico não singular este fluxo deve ser nulo. Assim, o primeiro termo do lado direito é nulo (Pope, 1985). Logo, a média da derivada material de  $Q$  se reduz a

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i \right\rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} [\rho(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi, \quad i = 1, \dots, K + 4. \quad (\text{A-31})$$

De acordo com a Eq. (A-26), as Eqs. (A-23) e (A-31) são equivalentes. Igualando o termo direito das Eqs. (A-23) e (A-31), e considerando que a igualdade deve se manter para uma escolha arbitrária de  $Q$ , a equação de transporte da PDF conjunta do vetor  $\Phi$  apresenta a seguinte forma

$$\rho(\Psi) \left[ \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + V_j \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial}{\partial \Psi_i} [\rho(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)]. \quad (\text{A-32})$$

Nesta equação, o termo do lado direito é conhecido como *fluxo condicionado*. Outra forma de descrever a equação de transporte para uma PDF decorre da definição de  $Q(\Phi) = Q(\mathbf{U}, \mathbf{Y}, h)$ . Levando em conta a equação (A-24), pode-se verificar que

$$\rho \frac{DQ(\Phi)}{Dt} = \rho \left[ \frac{\partial Q}{\partial U_j} \frac{DU_j}{Dt} + \frac{\partial Q}{\partial Y_k} \frac{DY_k}{Dt} + \frac{\partial Q}{\partial h} \frac{Dh}{Dt} \right], \quad (\text{A-33})$$

para  $j = 1, 2, 3$  e  $k = 1, 2, \dots, K$ . Substituindo as derivadas materiais do lado direito da Eq. (A-33) com Eqs. (A-17), (A-18) e (A-19), tem-se

$$\rho \frac{DQ(\Phi)}{Dt} = \rho \frac{\partial Q}{\partial U_j} A_j + \rho \frac{\partial Q}{\partial Y_k} C_k + \rho \frac{\partial Q}{\partial h_t} C_h. \quad (\text{A-34})$$

Igualando o lado direito das Eqs. (A-24) e (A-34), para logo aplicar a média

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i \right\rangle = \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial U_j} A_j \right\rangle + \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial Y_k} C_k \right\rangle + \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial h_t} C_h \right\rangle. \quad (\text{A-35})$$

Nota-se que o índice  $i$  representa o índice global do vetor  $\Phi$  que corresponde à dimensão do campo de velocidade  $\{U_j : j \in 1, 2, 3\}$ , do campo das  $k$  frações mássicas  $\{Y_k : k \in 1, \dots, k\}$  e a dimensão unitária da entalpia  $h$ . No lado direito da Eq. (A-35) encontram-se representadas as seguintes igualdades

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial U_j} A_j \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial V_j} \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi, \quad (\text{A-36})$$

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial Y_k} C_k \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial \Gamma_k} \langle C_k | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi, \quad (\text{A-37})$$

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial h_t} C_h \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial H} \langle C_h | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi. \quad (\text{A-38})$$

Levando-se em conta o mesmo procedimento matemático da Eq. (A-30) para as Eqs. (A-36), (A-37) e (A-38), tem-se

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial \Phi_i} R_i \right\rangle &= - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial \Gamma_k} [\rho(\Psi) \langle C_k | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial H} [\rho(\Psi) \langle C_h | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi. \end{aligned} \quad (\text{A-39})$$

Igualando as Eqs. (A-23) e (A-39), obtém-se uma forma equivalente para a equação de transporte da PDF conjunta do campo de velocidade, das frações

mássicas e da entalpia:

$$\begin{aligned} \rho(\Psi) \left[ \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + V_j \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right] = & - \frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] \\ & - \frac{\partial}{\partial \Gamma_k} [\rho(\Psi) \langle C_k | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial H} [\rho(\Psi) \langle C_h | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)]. \end{aligned} \quad (\text{A-40})$$

Os termos do lado direito da Eq. (A-40) são chamados fluxos condicionados de velocidade, das frações mássicas e da entalpia, respectivamente. Estes termos possuem um papel importante na solução da equação de transporte da PDF conjunta.

Uma das características que a equação de transporte da PDF apresenta e que a torna atrativa frente a outras abordagens de resolução de escoamentos turbulentos reativos, é a sua implementação numérica, que é conceitualmente simples (Pope, 1994b). Para um tempo dado, o escoamento turbulento reativo é representado por uma grande quantidade de partículas, cada um tendo seu próprio conjunto de propriedades (posição, velocidade, composições, etc.). Estas propriedades evoluem de acordo com a formulação de equações estocásticas de forma que, as partículas numéricas simulem às partículas do escoamento.

## B Resultados Adicionais

Neste apêndice são apresentados e discutidos os resultados mostrados nas figuras 5.28 e 5.29 que correspondem ao estudo da influência dos modelos de mistura na média e no desvio padrão de  $c$  em um PaSR. As figuras, B.1–B.6, correspondem à operação do PaSR utilizando, os modelos IEM, LM para  $d_0 = 0,4$  e  $d_0 = 1$ , EIEM e ELM para  $d_0 = 0,4$  e  $d_0 = 1$ .

Nota-se, das figuras B.1(a), B.2(a) e B.3(a), que a média de  $c$  é maior para misturas rápidas ( $\mathcal{X} = 2$ ) do que para misturas lentas ( $\mathcal{X} = 0,5$ ), porém esta diferença é menor a medida que a combustão torna-se intensa. Neste caso, o processo de combustão é dominante em relação ao de mistura. Conseqüentemente, a escolha do modelo de mistura não exerce uma influência determinante sobre o PaSR. O caso contrário acontece nas zonas de combustão fraca onde o processo de mistura é dominante sobre o processo de combustão. Neste caso, a velocidade da mistura possui um papel determinante mesmo nos valores médios de  $c$ .

As figuras B.1(b), B.2(b) e B.3(b), no caso de uma mistura lenta, mostram que, em uma extensa faixa de regimes de combustão, o desvio padrão,  $\sigma$ , é maior do que no caso de uma mistura rápida. Isto é consequência da forma bi-modal da PDF obtida para o caso de uma mistura lenta, pois estas PDFs possuem altos valores de  $\sigma$ . Além disso, percebe-se que, partindo de um regime de combustão intensa, à medida que  $\mathcal{Y}$  é diminuído, a variância aumenta gradativamente.

Os valores de  $\langle c \rangle$  e  $\sigma$  obtidos usando os modelos EIEM e ELM com  $d_0 = 0,4$  e  $d_0 = 1$ , são mostrados nas figuras B.4, B.5, e B.6 para os casos de mistura rápida ( $\mathcal{Z} = 2$ ) e lenta ( $\mathcal{Z} = 0,5$ ) e diferentes valores de  $\mathcal{Y}$ . Estes resultados correspondem aos modelos de mistura EIEM, de Langevin estendido com  $d_0 = 0,4$  e  $d_0 = 1$ .

A comparação da figura B.4(a) com a figura B.1(a) mostra que a curvas de  $\langle c \rangle$  obtidas pelo modelo EIEM apresentam maior declividade do que aquelas calculadas pelo modelo IEM. Assim, o valor médio de  $c$  obtido pelo modelo EIEM é sempre menor do que o do modelo IEM. Esta diferença é mais acentuada na região de combustão fraca e é também observada no desvio

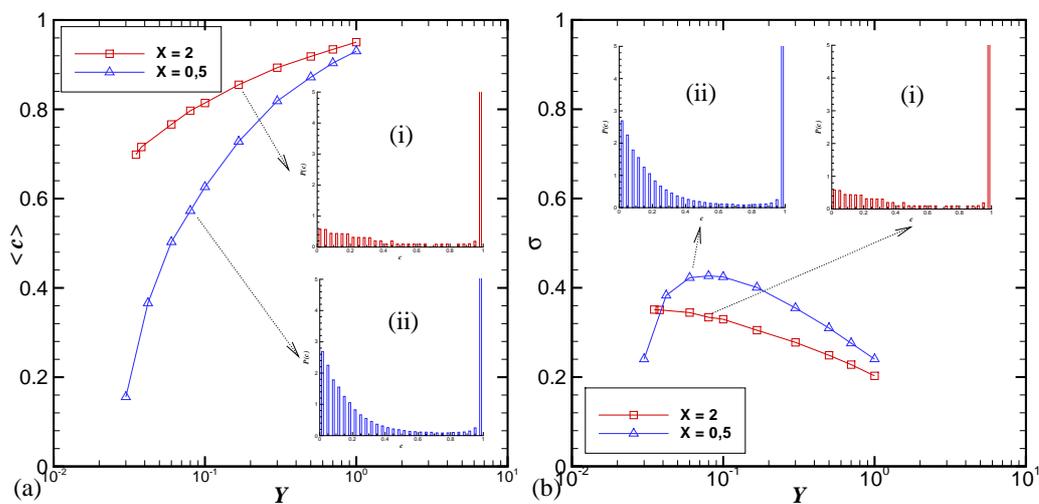


Figura B.1: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo IEM. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$ ; (ii)  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,080$ .

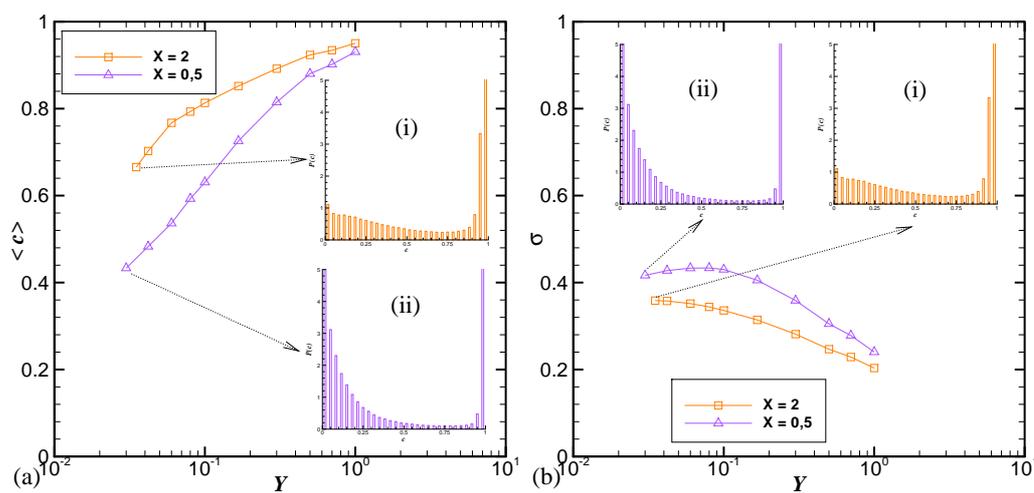


Figura B.2: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo LM para  $d_0 = 0,4$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,035$ ; (ii)  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,030$ .

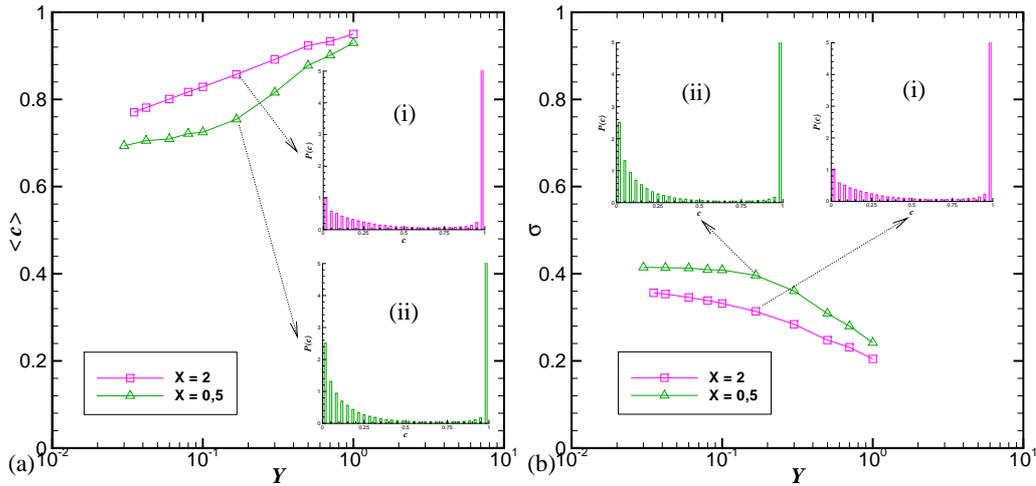


Figura B.3: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo LM para  $d_0 = 1$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{X} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$ ; (ii)  $\mathcal{X} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,167$ .

padrão, mostrado nas figuras B.4(b) e B.1(b), onde pode ser verificado que o modelo EIEM apresenta uma maior variação de  $\sigma$  do que o modelo IEM.

A figura B.5 mostra a média e o desvio padrão de  $c$  obtidos utilizando o modelo ELM com  $d_0 = 0,4$  para os casos de uma mistura lenta e rápida. Nesta figura percebe-se que as curvas que representam o caso de uma mistura lenta ( $\mathcal{Z} = 0,5$ ) apresentam fortes oscilações em  $\langle c \rangle$  e  $\sigma$ . Estas oscilações acontecem nas região próxima à zonas de combustão fraca. A razão deste comportamento anômalo não foi investigada, porém, acredita-se que este é relacionado à forma fortemente bi-modal da PDF. Trabalhos futuros que levem em conta a sensibilidade do resultado da simulação estocástica com respeito ao número de partículas precisam ser desenvolvidos com o propósito de verificar esta suposição.

A figura B.5 mostra a média e o desvio padrão de  $c$  utilizando o modelo ELM com  $d_0 = 1$  para os casos de misturas lenta e rápida. Note-se que a curva de  $\langle c \rangle$  para o caso de uma mistura lenta cruza a curva da mistura rápida. Esta intersecção acontece aproximadamente para  $\mathcal{Y} = 0,060$ . Abaixo deste valor a curva de  $\langle c \rangle$  obtida para o caso de uma mistura lenta mostra valores superiores à do caso de uma mistura rápida. Este comportamento atípico que apresenta o valor de  $\langle c \rangle$  calculado pelo modelo ELM para  $d_0 = 1$  para o caso de uma mistura lenta, merece ser investigado em trabalhos futuros. Percebe-se também, para o caso da curva que descreve a mistura lenta que, à diferença dos modelos de mistura IEM, LM e EIEM, o modelo ELM apresenta um crescimento de  $\sigma$  nas zonas vizinhas ao regime de combustão fraca.

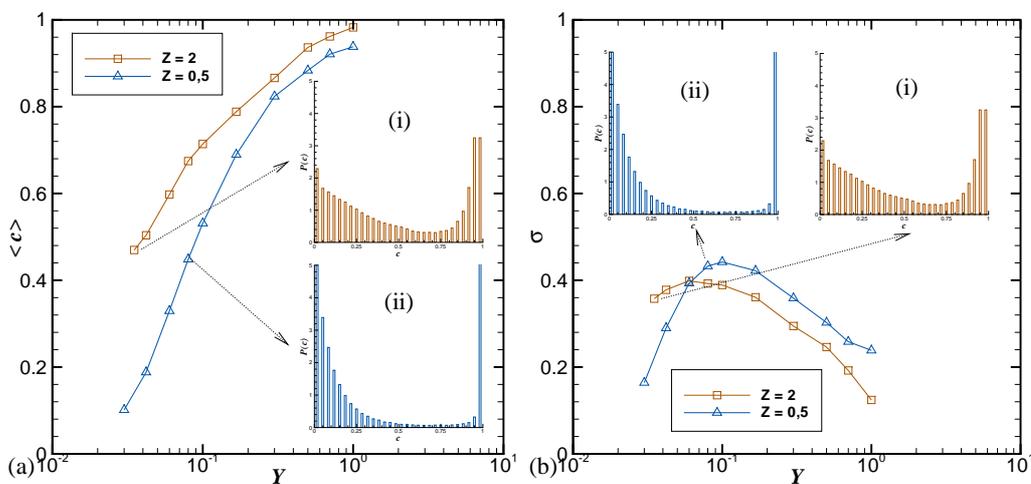


Figura B.4: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo EIEM. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,035$ ; (ii)  $\mathcal{Z} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,080$ .

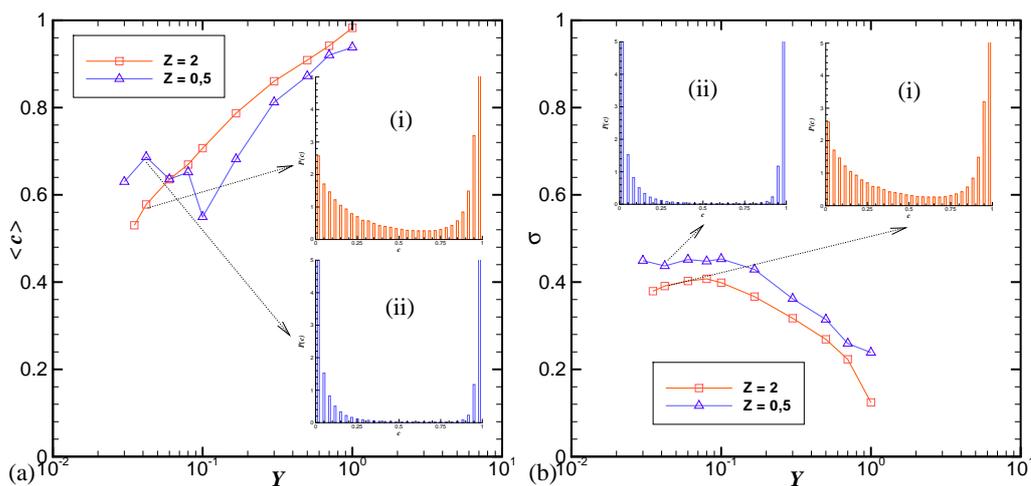


Figura B.5: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{X} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo ELM para  $d_0 = 0,4$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$ ; (ii)  $\mathcal{Z} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,042$ .

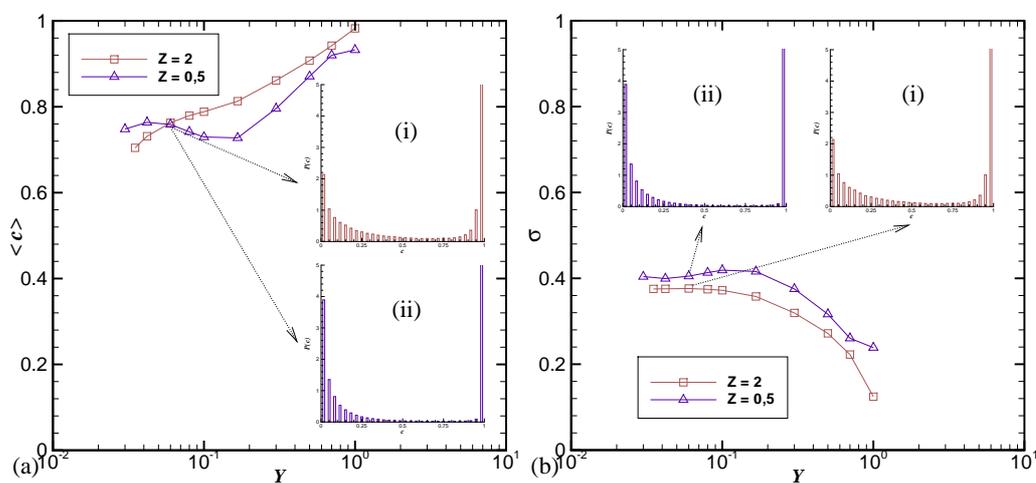


Figura B.6: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação  $c$  como função de  $\mathcal{Y}$  e para  $\mathcal{Z} = 2$  e  $0,5$ , utilizando o modelo ELM para  $d_0 = 1$ . Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i)  $\mathcal{Z} = 2$  e  $\mathcal{Y} = 0,060$ ; (ii)  $\mathcal{Z} = 0,5$  e  $\mathcal{Y} = 0,060$ .

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)