

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

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 trascendentes 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 Távara, 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	22
1.1	Motivação	22
1.2	O Problema	24
1.3	Objetivo	26
1.4	Organização do trabalho	26
2	Revisão Bibliográfica	28
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	37
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	48
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	78
5.1	Simulação de um Caso Inerte	78
5.2	Simulação do PaSR	96
6	Conclusões e Recomendações	116
	Referências Bibliográficas	119
A	Derivação das Equações de Transporte da PDF	125
A.1	Equações de Transporte	125
A.2	Equação de Transporte da PDF	129
B	Resultados Adicionais	134

Lista de figuras

1.1	<i>Esquema de um Reator Parcialmente Misturado (PaSR).</i>	24
3.1	<i>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.</i>	45
4.1	<i>PDF inicial do campo escalar ϕ como uma distribuição Beta para $\langle\phi\rangle = 0,5$ e $\sigma^2 = 0,2$.</i>	55
4.2	<i>Ilustração do tempo de funcionamento do modelo de mistura de Coalescência e Redispersão (CD) ou modelo de Curl.</i>	58
4.3	<i>Taxa de produção adimensional $\dot{S}(c)$ em função da variável de progresso da reação, c, para diferentes valores de energia de ativação reduzida, β, e calor de reação reduzido, α.</i>	69
4.4	<i>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).</i>	71
5.1	<i>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.</i>	79
5.2	<i>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.</i>	80
5.3	<i>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.</i>	81
5.4	<i>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.</i>	82
5.5	<i>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.</i>	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 σ ; (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 σ ; (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 σ ; (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 σ ; (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 σ ; (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 σ ; (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 α .
$A[\phi(t), t]$	Coeficiente 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.
$B[\phi(t), t]$	Coeficiente 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_ϕ	Constante empírica referente ao modelo IEM.
C_χ	Constante equivalente à inversa de T_χ 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 Damkhöler.
D_k	Coeficiente 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 α -ésimo escalar ϕ_α .
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_ϕ	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 χ .
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 homogêneo $\phi(t)$.
$P_c(\theta; t)$	PDF de um campo escalar reativo homogêneo $c(t)$.
$P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)$	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 ϕ .
r	relação mássica oxidante/combustível.
$r_0(t)$	Parâmetro positivo dependente do tempo.
R_i	taxa de variação por unidade de volume de Φ .
Re	Número de Reynolds.
Re_λ	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_α	Termo fonte da α -ésima componente de ϕ .
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_χ	Escala de tempo integral de χ .

$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$	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).
$\dot{\forall}$	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.
\overline{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

α	Calor de reação reduzido, Variável aleatória.
α, β	Parâmetros relacionados à função Beta.
β	Energia de activação reduzida.
β_m	Expoente da temperatura da m -ésima reação.
γ_s, γ_w	Ordem de convergência forte e fraca respectivamente.
Γ_α	Coefficiente difusivo da α -ésima componente de ϕ .
Γ	Variável do espaço amostral correspondente a Y .
$\delta(x)$	Função delta de Dirac.
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
ε	Pseudo-dissipação da energia cinética turbulenta.
ε_T	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.
ε_ϕ	Taxa de dissipação do campo escalar.
$\langle \varepsilon_\phi \rangle$	Taxa de dissipação do campo escalar média.
λ	Condutividade térmica.
μ	Média o expectância, viscosidade dinâmica.
$\phi(\mathbf{x}; t)$	Campo escalar passivo.
$\phi'(\mathbf{x}; t)$	Flutuação do campo escalar passivo.
ϕ_α	α -ésima componente do vetor do escalar ϕ .
$\langle \phi_\alpha \rangle$	Média do α -ésimo escalar, ϕ_α .
$\langle \phi'^2 \rangle$	Variância do campo escalar, ϕ .
$\langle \phi'_\alpha \phi'_\beta \rangle$	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.
φ	Variável do espaço amostral correspondente a χ .
$\Phi(\mathbf{x}, t)$	Campo vetorial generalizado.
ψ	Variável do espaço amostral correspondente a ϕ .
ψ	Variável do espaço amostral correspondente a ϕ .
Ψ	Variável do espaço amostral correspondente a Φ .

ν	Viscosidade cinemática (m^2/s).
ν, ν', ν''	Coeficientes estequiométricos.
ρ	Densidade ou massa específica (m^3/s).
σ	Desvio padrão.
σ^2	Variância.
σ_M^2	Variância máxima.
σ_{ω_ϕ}	Variância condicionada à frequência de mistura.
σ_{M*}^2	Variância máxima cond. à frequência de mistura.
$\chi(t)$	Variável aleatória normalmente distribuída.
τ_c	Escala de tempo característico da reação química (s).
τ_m	Escala de tempo característico do escalar ou da mistura (s).
τ_t	Escala de tempo característico da turbulência (s).
τ_r	Tempo de residência (s).
τ_{ij}	Tensor de tensões.
ω	Frequência instantânea da turbulência (s^{-1}).
ω_ϕ	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.
θ	Variável do espaço amostral correspondente a c .

Símbologia

Δ	Intervalo.
$f(\phi)$	Função de ϕ .
∂	Derivada parcial.
$E \phi $	Valor médio de ϕ .
∇^2	Operador Laplaciano.
$\langle \phi \rangle$	Média ou expectância de ϕ .
Σ	Somatória.
Π	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 echandole 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, quemen 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.