

### 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.

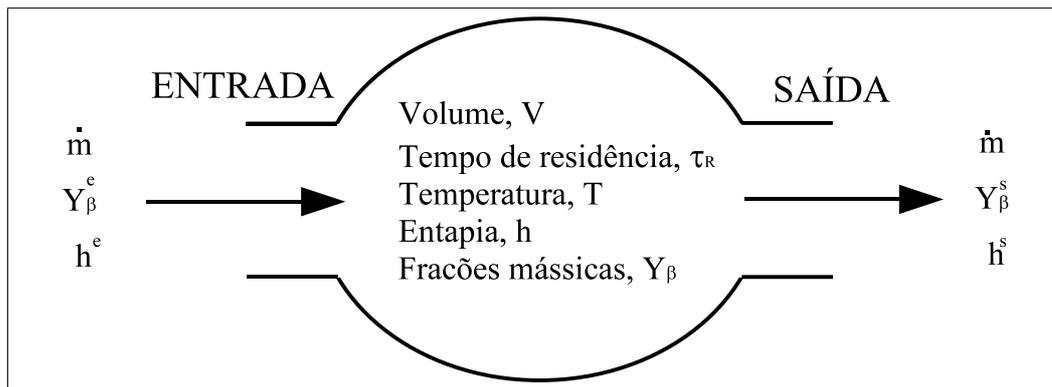


Figura 3.1: Representação esquemática de um reator de fluxo contínuo, onde  $\dot{m}$  é a vazão mássica dos reagentes que entram no equipamento. Os reagentes são compostos por  $K$  espécies químicas cujas frações mássicas na entrada e na saída são  $Y_k^e$  e  $Y_k^s$  respectivamente.

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.