

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
- [Borghi 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_x 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 stocastically 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.. **Computacional 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 difussion : 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.. **Theroretical 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 methodd 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 lmse 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: Aplications 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, ρ , 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 τ_{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 μ , depende das propriedades do fluido e δ_{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 λ 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 Φ 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 ρA_i representa a aceleração da partícula, ρC_k e ρC_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 Φ é definida como

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

Seja $Q(\Phi) = Q(\mathbf{U}, \mathbf{Y}, h)$ uma função arbitrária do campo aleatório Φ . 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 Φ . Os valores médios da derivada material de Q , podem ser expressos em termos de derivadas parciais da PDF conjunta do campo vetorial Φ :

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

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 Ψ 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 Φ . 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 Φ 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 Φ , 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 Ψ , 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 Φ 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 Φ 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, σ , 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 σ . 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 σ 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

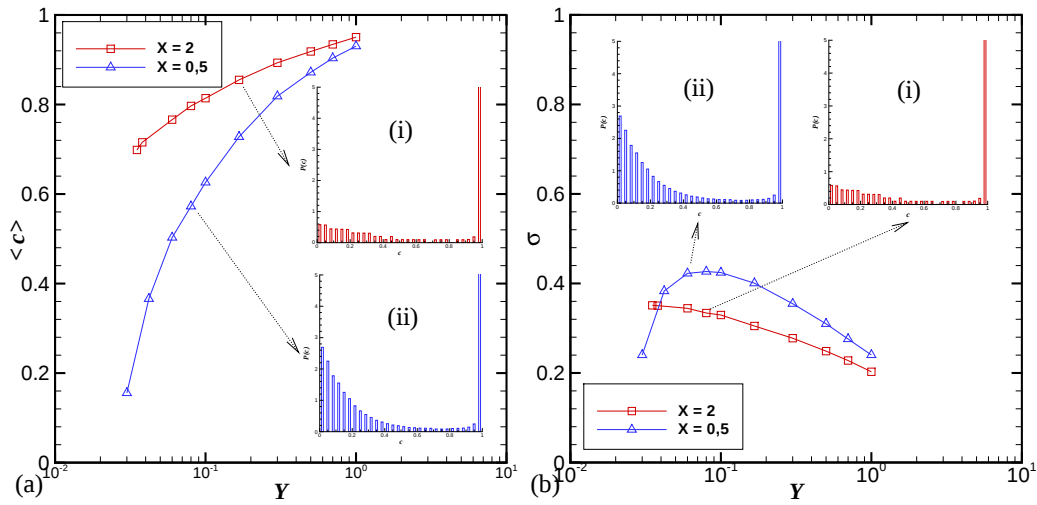


Figura B.1: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de Y e para $X = 2$ e $0,5$, utilizando o modelo IEM. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i) $X = 2$ e $Y = 0,167$; (ii) $X = 0,5$ e $Y = 0,080$.

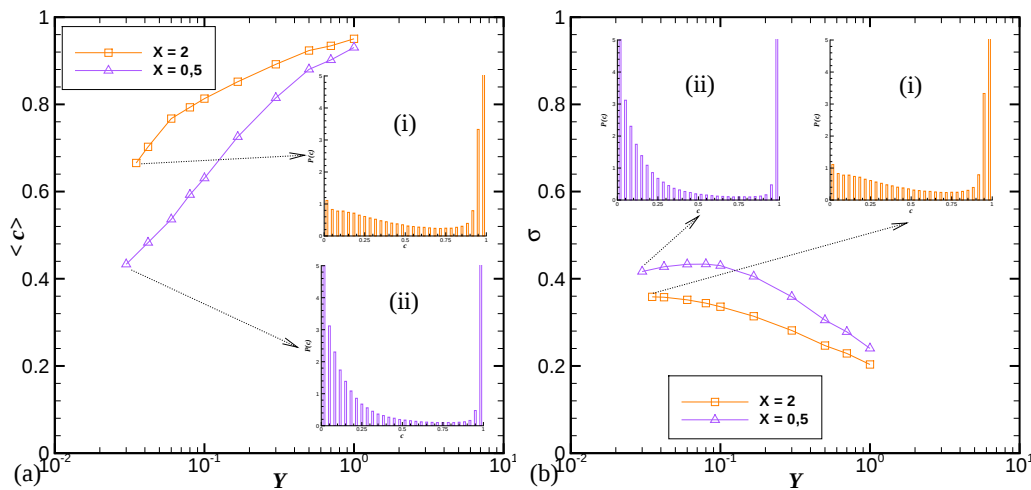


Figura B.2: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de Y e para $X = 2$ e $0,5$, utilizando o modelo LM para $d_0 = 0,4$. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i) $X = 2$ e $Y = 0,035$; (ii) $X = 0,5$ e $Y = 0,030$.

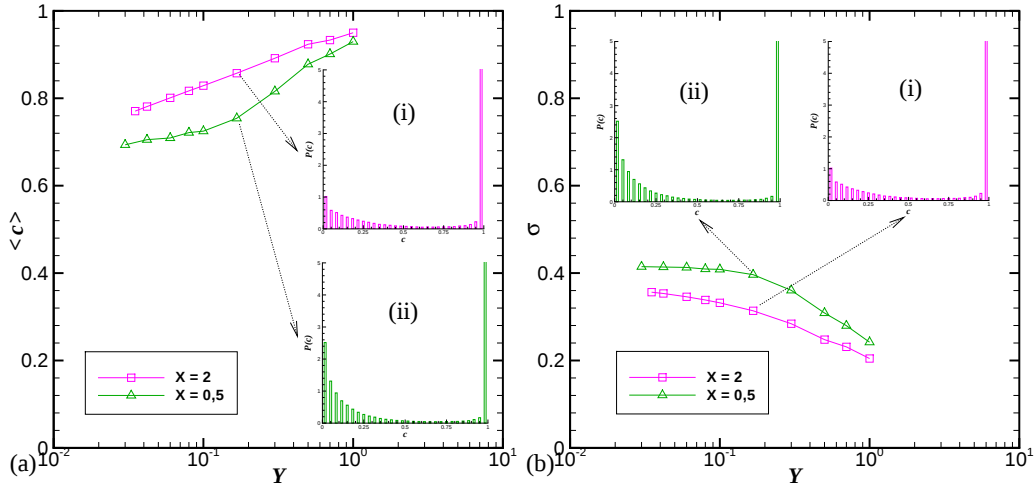


Figura B.3: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de $\mathcal{Y}$ e para $\mathcal{X} = 2$ e $0,5$, utilizando o modelo LM para $d_0 = 1$. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i) $\mathcal{X} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,167$; (ii) $\mathcal{X} = 0,5$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

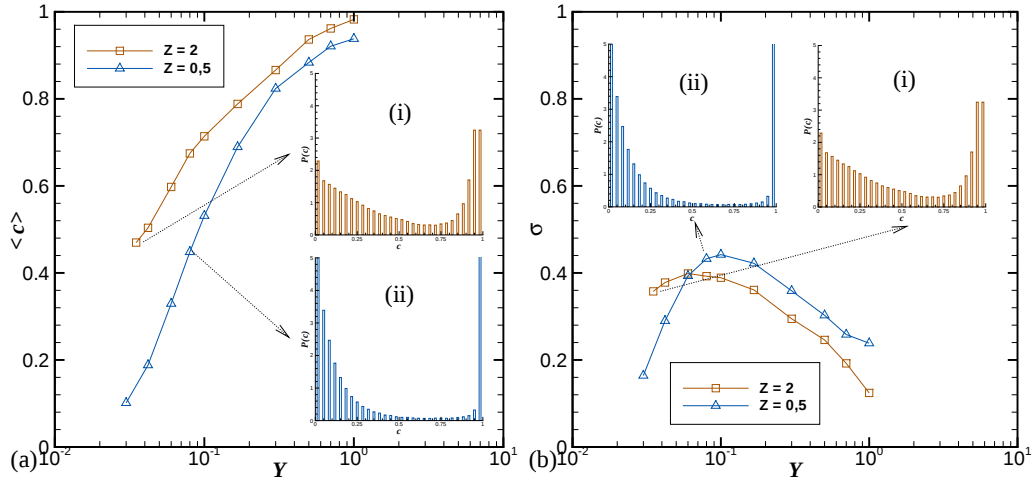


Figura B.4: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de $\mathcal{Y}$ e para $\mathcal{X} = 2$ e $0,5$, utilizando o modelo EIEM. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i) $\mathcal{Z} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,035$; (ii) $\mathcal{Z} = 0,5$ e $\mathcal{Y}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

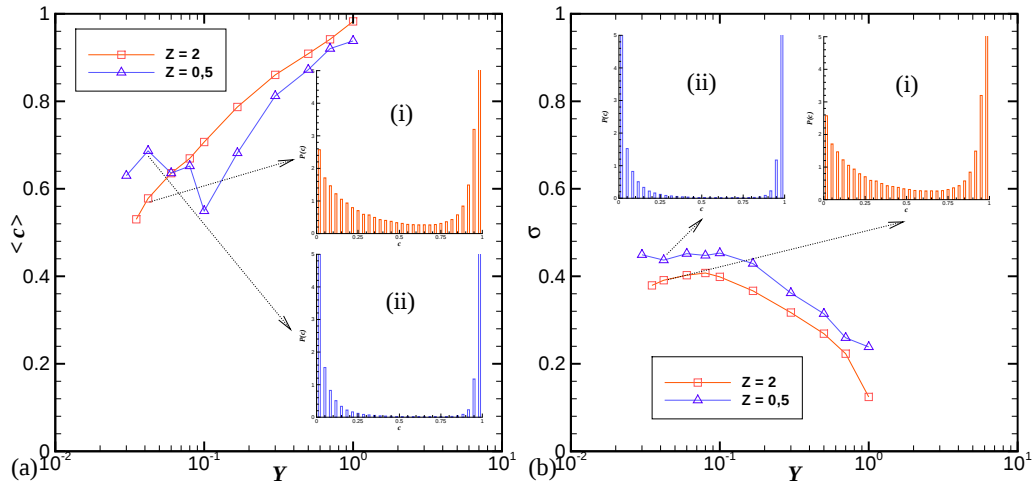


Figura B.5: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de $\mathcal{Y}$ e para $\mathcal{X} = 2$ e $0,5$, utilizando o modelo ELM para $d_0 = 0,4$. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i) $\mathcal{Z} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,042$; (ii) $\mathcal{Z} = 0,5$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

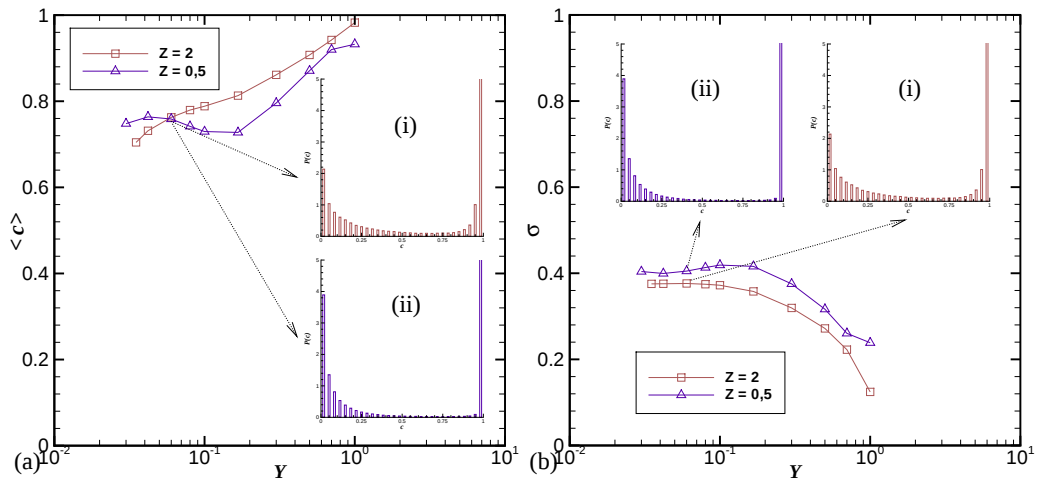


Figura B.6: Média (a) e desvio padrão (b); da variável de progresso de reação c como função de $\mathcal{Y}$ e para $\mathcal{Z} = 2$ e $0,5$, utilizando o modelo ELM para $d_0 = 1$. Nestes gráficos também são mostrados PDFs para: (i) $\mathcal{Z} = 2$ e $\mathcal{Y} = 0,060$; (ii) $\mathcal{Z} = 0,5$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