

## Referências Bibliográficas

- [Abdel-Gayed e Bradley] ABDEL-GAYED, R.; BRADLEY, D.. **Combustion regimes and the straining of turbulent premixed flames.** Combustion and Flame, 76:123-218, 1989.
- [Abdel-Gayed et al.] ABDEL-GAYED, R.; BRADLEY, D.; HAMID, M.; LAWES, M.. **Lewis number effects on turbulent burning velocity.** 20<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 505-512, 1984.
- [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, 30:21-42, 2005.
- [Bisetti e Chen] BISETTI, F.; CHEN, J. Y.. **Numerical issues of monte carlo PDF for large eddy simulations of turbulent flames.** 4<sup>th</sup> Joint Meeting U. S. Section / Combustion Institute, Drexel University, Philadelphia, USA. Paper Number E28, 2005.
- [Boger e Veynante] BORGER, M.; VEYNANTE, D.. **Large eddy simulation of a turbulent premixed V-shape flame.** Advances in Turbulence VIII CIMNE, P. 449:452, 2000.
- [Boger et al.] BORGER, M.; VEYNANTE, D.; BOUGHANEM, H.; TROUVE A.. **Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion.** 27<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 917:925, 1998.
- [Borghesi] BORGHI, R.. **On the structure and morphology of turbulent premixed flames.** Recent advances in the aerospace sciences. Edited by Corrado Casei, Plenum Publishing Corporation, 1985.
- [Borghesi et al.] BORGHI, R.; MURA, A.; BURLUKA, A.. **Turbulent premixed flames: experimental studies over the last decades.** Manuscript prepared for publication in Combustion Fenomena – Selected mechanisms of flame formation, propagation and extinction, J. Jarosinsky and B. Veyssiere Eds., Published by Taylor and Francis, 2007.

- [Boukhalfa et al.] BOUKHALFA, M.; RENOU, B.; MURA, A.; SAMSON, E.. **Characterization of the local flame structure and the flame surface density for freely propagating premixed flames at various Lewis number.** Combustion Science Technology, 174:143-179, 2002.
- [Boukhalfa et al.] BOUKHALFA, M.; RENOU, B.; PUECHBERTY, D.; TRINITE, M.. **Local flame structure of freely propagating premixed turbulent flames at various Lewis number.** Combustion and Flame, 123:107-115, 2000.
- [Bray e Peters] BRAY, K. N. C.; PETERS, N.. **Laminar flamelets in turbulent flames.** Turbulent Reacting Flows, Academic Press Limited, London, 1994.
- [Bray et al.] BRAY, K. N. C.; CHAMPION, M.; LIBBY, P. A.. **Premixed flames in stagnation turbulence Part IV: A new theory for the Reynolds stresses and Reynolds fluxes applied to impinging flows.** Combustion and Flame, 120:1-18, 2000.
- [Bray, Moss e Libby] BRAY, K.N.C.; LIBBY, P.A.; MOSS, J.B.. **Unified modeling approach for premixed turbulent combustion - Part I: general formulation.** Combustion and Flame, 61:87-102, 1985.
- [Browand e Latigo] BROWAND, F. K.; LATIGO, B. O.. **Growth of the two dimensional mixing layer from a turbulent and nonturbulent boundary layer.** Physics of fluids, 22(6):1011-1019, 1979.
- [Bruker e Sarkar] BRUKER, K. A.; SARKAR, S.. **Evolution of an initially turbulent stratified shear layer.** Physics of fluids, 19:105105, 2007.
- [Buckmaster et al.] BUCKMASTER, J.; CLAVIN, P.; LINAN, A.; MATALON, M.; PETERS, N.; SIVASHINSKY, G.; WILLIAMS.. **Combustion theory and modeling.** Proceedings of the Combustion Institute, 30:1-19, 2005.
- [Campregher] CAMPREGHER, R B.. **Modelagem matemática tridimensional para problemas de interação fluido-estrutura.** Tese de Doutorado, Dept. de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2005.
- [Campregher et al.] CAMPREGHER, R.; MARINHO, W. P.; SILVEIRQ NETO, A.. **Three-dimensional heat transfer simulation as a benchmark for na in-house beowulf-class cluster .** Proceedings of the 10th Brazilian Congresso f Thermal Sciences and Engineering, Paper Number CIT04-0241, 2004.
- [Cant e Bray] CANT, R. S.; BRAY, K.N.C.. **Strained laminar flamelet calculations of premixed turbulent combustion in a closed vessel.** 22<sup>nd</sup> Symposium (International) of Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 791-799, 1988.

- [Cant e Hawkes] CANT, R. S.; HAWKES, E. R.. **Implications of a flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion.** Combustion and Flame, 126:1617-1629, 2001.
- [Chen e Bilger] CHEN, Y. C.; BILGER, R.. **Simultaneous 2-D imaging measurements of reaction progress variable and OH radical concentration in turbulent premixed flames: instantaneous flame front structure.** Combustion Science Technology, 167:187-222, 2001.
- [Chergui et al.] CHERGUI, J.; DUPAYS, I.; GIROU, D.; REQUENA, S.; WAUTELET P.. **Cours MPI – message passing interface.** Institut du Developpement et des Ressources en Informatique Scientifique, IDRIS, Paris, 2006.
- [Colucci et al.] COLUCCI, P. J.; JABERI, F. A.; GIVI, P.; POPE, S. B.. **Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows.** Physics of Fluids, 10, Number 2, 499-515, 1998.
- [Correa e Pope] CORREA, S. M.; POPE, S. B.; **Comparison of a Monte Carlo PDF finite volume mean flow model with bluff body Raman data.** 24<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 279-285, 1992.
- [Curl] CURL, R. L.. **Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors.** AIChE Journal, 9:175-181, 1963.
- [Dinkelacker] DINKELACKER, F.. **Experimental validation of flame regimes for highly turbulent premixed flames.** Proceedings of the First European Combustion Meeting, ECM2003, 2003.
- [Dopazo] DOPAZO, C.. **Recent developments in pdf methods.** Turbulent Reactive Flows, 1:375-474, 1994.
- [Dopazo e O'Brien] DOPAZO, C.; O'BRIEN, E.. **An approach to the autoignition of a turbulent mixture.** Acta Astronautica, 1:1239-1266, 1974.
- [Dumont et al.] DUMONT, J. P.; DUROX, D.; BORGUI, R.. **Experimental study of the mean reaction rates in a turbulent premixed flame.** Combustion Science Technology, 89:219-251, 1993.
- [Ferziger e Peric] FERZIGER, J.; PERIC, M.. **Computational methods for fluid dynamics.** Third Edition, Ed. Springer Verlag, New York, USA, 2002.
- [Fox] FOX, R. O.. **Computational models for turbulent reacting flows.** Cambridge University Press, First Edition, 2003.
- [Frank et al.] FRANK, J. H.; KALT, P. A.; BILGER, R.. **Measurements of conditional velocities in turbulent premixed flames by simultaneous OH PLIF and PIV.** Combustion and Flame, 116:220-232, 1999.

- [Gardiner] GARDINER, C.. **Handbook of stochastic methods.** Springer, Berlim, Third Edition, 1990.
- [Germano] GERMANO, M.. **On the physical effects of variable filtering lenghts and time in LES.** In: Friedrich, R.; Rodi, W., Editors, *Advances in LES of complex flows, proceedings of the Euromech colloquium, 412, 3:11*, 2000.
- [Germano et al.] GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. H.. **A dynamic sub-grid scale eddy viscosity model.** *Physics of Fluids, A 3*, 7:1760-1765, 1991.
- [Geurts] GEURTS, B.. **Elements of direct and large eddy simulations.** Edwards Inc., Second Edition, 2003.
- [Gropp et al.] GROPP, W.; LUSK, E.; SKJELLUM, A.. **Using MPI: portable parallel programing with the message-passing interface.** MIT Press, 1999a.
- [Gropp et al.] GROPP, W.; LUSK, E.; THAKUR, R.. **Using MPI-2: advanced feautures of the message-passing interface.** MIT Press, 1999b.
- [Hawkes] HAWKES, E.. **Large eddy simulation of premixed turbulent combustion.** PhD Thesis, Engineering Department, Cambridge University, England, 2000.
- [Higham] HIGHAM, D. J.. **An algorithmic introduction to numerical simulation of stochastic differential equations.** Society for Industrial and Applied Mathematics Review, Volume 43, 3:525-546, 2001.
- [James et al.] JAMES, S.; ZHU, J.; ANAND, M. S.. **Large eddy simulations of turbulent flames using the filtered density function model.** Proceedings of the Combustion Institute, 31:1737-1745, 2007.
- [Kaludercic] KALUDERCIC, B.. **Parallelization of the Lagrangian model in a mixed Eulerian-Lagrangian CFD algorithm.** *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 64:277-284, 2004.
- [Kee et al.] KEE, R. J.; RUPLEY, F. M.; MILLER, J. A.. **PREMIX-CHEMKIN Release 4.1.**, Sandia Laboratory, Reaction Design, San Diego, CA, 2006.
- [Kim et al.] KIM, W. W.; MENON, S.; MONGIA, H. C.. **Large eddy simulation of a gas turbine combustor flow.** *Combustion Science Technology*, 143:25-62, 1999.
- [Klein et al.] KLEIN, M.; SADIKI, A.; JANICKA, J.. **A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulation.** *Journal of Computational Physics*, 186:652-665, 2003.

- [Kuo] KUO, K. K.. **Principles of Combustion**. Wiley-Interscience, Second Edition, 2005.
- [Law] LAW, C.K.. **Combustion Physics**. Cambridge University Press, Second Edition, 2006.
- [Lesieur et al.] LESIEUR, M.; METAIS, O.; COMTE, P.. **Large eddy simulation of turbulence**. Cambridge University Press, First Edition, 2005.
- [Lewis e Von Elbe] LEWIS, B.; VON ELBE, G.. **Combustion, flames and explosions of gases**. New York Academic Press, Second Edition, 1961.
- [Libby e Bray] LIBBY, P. A.; BRAY, K. N. C.. **Countergradient diffusion in premixed turbulent flames**. Journal of the AIAA, 19:205-213, 1981.
- [Libby e Williams] LIBBY, P. A.; WILLIAMS, F. A.. **Fundamental aspects and a review in turbulent reacting flows**. Academic Press Milited, London, 1:61, 1994.
- [Magre et al.] MAGRE, P.; MOREAU, P.; COLLIN, G.; BORGHI, R.; PEALAT, M.. **Further studies by CARS of premixed turbulent combustion in a high velocity flow**. Combustion and Flame, 71:147-168, 1988.
- [Mahesh e Park] MAHESH, K.; PARK, N.. **Analysis of numerical error in large eddy simulation using statistical closure theory**. Journal of Computational Physics, 222:194-216, 2007.
- [Meyers et al.] MEYERS, J.; GEURTS, B. J.; SAGAUT, P.. **A computational error assessment of central finite volume discretizations in large eddy simulation using a Smagorinsky model**. Journal of Computational Physics, 227:156-173, 2007.
- [Moreau] MOREAU, P.. **Turbulent flame development in a high velocity premixed flow**. 15th Meeting of Aerospacial Sciences, AIAA, Paper number 77-49, 1977.
- [Moreau e Boutier] MOREAU, P.; BOUTIER, A.. **Laser velocimeter measurements in a turbulent flame**. Symposium (international) on combustion, 16:1747-1756, 1977.
- [Moss] MOSS, J. B.. **Simutaneous measurements of concentration and velocity in an open premixed turbulent flame**. Combustion Science Technology, 22:119-129, 1980.
- [MME] BOLETIN ENERGETICO NACIONAL DO MINISTERIO DE MINAS E ENERGIA..  
<http://www.mme.gov.br>, 2008.

- [Mura et al.] MURA, A.; GALZIN, F.; BORGHI, R.. **A unified PDF-Flamelet model for turbulent premixed combustion.** Combustion Science and Technology, 175:1573-1609, 2003.
- [Muradoglu et al.] MURADOGLU, M.; POPE, S. B.; JENNY, P.; CAUGHEY, D. A.. **A consistent hybrid finite volume / particle method for the PDF equations of turbulent reactive flows.** Journal of Computational Physics, 154:342-371, 1999.
- [Muzaferija e Peric] MUZAFERIJA, S.; PERIC, M.. **Computation of free surface flows using the Finite-Volume method and moving grids.** Numerical Heat Transfer, Part B, 32:369-384, 1997.
- [Nishiki et al.] NISHIKI, S.; HASEGAWA, T.; BORGHI, R.; HIMENO, R.. **Modeling of flame generated turbulence based on DNS database.** Proceedings of the Combustion Institute, 29:2017-2022, 2002.
- [Nishiki et al.] NISHIKI, S.; HASEGAWA, T.; BORGHI, R.; HIMENO, R.. **Modeling of turbulent scalar flux in turbulent premixed flames based on DNS database.** Combustion Theory and Modeling, 10(1):39-55, 2006.
- [Nooren et al.] NOOREN, P. A.; WOUTERS, H. A.; PETERS, T. W. J.; ROEKAERTS, D.; MAAS, U.; SCHMIDT, D.. **Monte Carlo PDF simulation of a turbulent natural gas diffusion flame.** 26<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996.
- [Nooren] NOOREN, P. A.. **Stochastic modeling of turbulent natural gas flames.** PhD Thesis, Engineering Department, Delft Technical University, Holland, 1998.
- [Oran e Boris] ORAN, E. S.; BORIS, J. P.. **Numerical simulation of reactive flow.** Cambridge University Press, Second Edition, Naval Research Laboratory, 2001.
- [Orbegoso] ORBEGOSO, E. M. M.. **Estudo de modelos de mistura estocásticos para a combustão em escoamentos turbulentos.** Dissertação de Mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2007.
- [Orbegoso e Figueira da Silva] ORBEGOSO, E. M. M.; FIGUEIRA DA SILVA, L. F.. **Study of stochastic mixing models for combustion in turbulent flows.** Proceedings of the Combustion Institute, 32:1595-1603, 2009.
- [Patankar] PATANKAR, S. V.. **Numerical heat transfer and fluid flow.** Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences, Taylor & Francis, 1980.

- [Peirano et al.] PEIRANO, E.; CHIBBARO, S.; POZORSKI, J.; MINIER, J. P.. **Mean-field / PDF numerical approach for polydispersed turbulent two-phase flow**. Progress in Energy and Combustion Science, 32:315-371, 2006.
- [Peters] PETERS, N.. **The turbulent burning velocity for large scale and small scale turbulence**. Journal of Fluid Mechanics, 384:107-132, 1999.
- [Peters] PETERS, N.. **Turbulent Combustion**. Cambridge University Press, First Edition, 2000.
- [Piomelli e Balaras] PIOMELLI, U.; BALARAS, E.. **Wall-layer models for large eddy simulations**. Annual Review of Fluid Mechanics, p. 34-349, 2002.
- [Piomelli] PIOMELLI, U.. **Large eddy simulation: achievements and challenges**. Progress in Aerospace Sciences, 35:335-362, 1999.
- [Pitsch] PITSCHE, H.. **A consistent level set formulation for large eddy simulation of premixed turbulent combustion**. Combustion and Flame, 143:587-598, 2005.
- [Pitsch] PITSCHE, H.. **Large eddy simulation of turbulent combustion**. Annual Review of Fluid Mechanics, 38:453-482, 2006.
- [Poinsot et al.] POINSOT, T.; CANDEL, S.; TROUVE, A.. **Applications of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion**. Progress in Energy and Combustion Sciences, 21:531-576, 1996.
- [Poinsot et al.] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.; CANDEL, S.. **Diagrams of premixed turbulent combustion based on direct simulation**. 23<sup>rd</sup> Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 613-619, 1990.
- [Poinsot et al.] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.; CANDEL, S.. **Quenching process and premixed turbulent combustion diagrams**. Journal of Fluid Mechanics, 228:561-606, 1991.
- [Poinsot e Veynante] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.. **Theoretical and numerical combustion**. Edwards Inc., Second Edition, 2005.
- [Pope] POPE, S. B.. **Computations of turbulent combustion: progress and challenges**. 23<sup>rd</sup> Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 591-612, 1990.
- [Pope] POPE, S. B.. **Lagrangian PDF methods for turbulent flows**. Annual Review of Fluid Mechanics, 26:23-63, 1994a.

- [Pope] POPE, S. B.. **On the relationship between stochastic lagrangian models of turbulence and second moment closures.** Physics of Fluids, 6:793-849, 1994b.
- [Pope] POPE, S. B.. **Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation.** Combustion Theory and Modeling, 1:41-63, 1997.
- [Pope] POPE, S. B.. **PDF methods for turbulent reactive flows.** Progress in Energy and Combustion Sciences, 11:119-192, 1985.
- [Pope] POPE, S. B.. **Turbulent flows.** Cambridge University Press, First Edition, 2000.
- [Pope] POPE, S. B.. **Turbulent premixed flames.** Annual Review of Fluid Mechanics, 19:237-270, 1987.
- [Pope e Anand] POPE, S. B.; ANAND, M. S.. **Flamelet and distributed combustion in premixed turbulent flames.** Proceedings of the Combustion Institute, 20:403-410, 1984.
- [Pope et al.] POPE, S. B.; MURADOGLU, M.; LIU, K.. **PDF modeling of a bluff body stabilized turbulent flame.** Combustion and Flame, 132:115-137, 2003.
- [Raman e Pitsch] RAMAN, V.; PITSCHE, H.. **A consistent LES / filtered density function formulation for the simulation of turbulent flames with detailed chemistry.** Proceedings of the Combustion Institute, 31:1711-1719, 2007.
- [Raman e Pitsch] RAMAN, V.; PITSCHE, H.. **LES/filter-density-function simulation of turbulent combustion with detailed chemistry.** Annual Research Briefs of the Center for Turbulence Research, Stanford University, USA, p. 297-309, 2005.
- [Raman et al.] RAMAN, V.; FOX, R. O.; HARVEY, A. D.. **Hybrid finite volume / transported PDF simulations of a partially premixed methane-air flame.** Combustion and Flame, 136:327-350, 2004.
- [Raman et al.] RAMAN, V.; PITSCHE, H.; FOX, R. O.. **Hybrid large eddy simulation / Lagrangian filtered density function approach for simulating turbulent combustion.** Combustion and Flame, 143:56-78, 2005.
- [Rembold et al.] REMBOLD, B.; GRASS, M.; JENNY, P.. **Parallel hybrid particle / finite volume algorithm for transported PDF methods employing subtime stepping.** Computers and Fluids, 37:181-193, 2008.

- [Renou e Boukhalfa] RENOU, B.; BOUKHALFA, M.. **An experimental study of freely propagating premixed flames at various Lewis number.** Combustion Science Technology, 162:347-371, 2001.
- [Rhie e Chow] RHIE, C.; CHOW, W.. **Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation .** AIAA Journal, 21(11):1525-1532, 1983.
- [Ribert e Champion] RIBERT, G.; CHAMPION, M.. **Modeling turbulent reactive flows with variable equivalence ratio: application to the calculation of a reactive shear layer .** Combustion Science and Technology, 178:907-923, 2004.
- [Robin et al.] ROBIN, V.; MURA, A.; CHAMPION, M.; HASEGAWA, T.. **A new analysis of the modeling of pressure fluctuations effects in premixed turbulent flames and its validation based on DNS data.** Combustion Science and Technology, 180:996-1009, 2008.
- [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 and Shear Flow Phenomena, Royal Institute of Technology (KTH), 4:27-29, 2001.
- [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: applications to diesel spray combustion.** Combustion Theory and Modeling, 10:155-169, 2005.
- [Sagaut] SAGAUT, P.. **Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction.** Springer Science and Business Media, Third Edition, 2005.
- [Sampaio] SAMPAIO, L. E. B.. **Simulação de grandes escalas da bolha de separação em placas finas a pequeno ângulo de incidência.** Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2006.
- [Schmidt et al.] SCHMIDT, R. C.; KERSTEIN, A. R.; WUNSCH, S.; NILSEN, V.. **Near wall LES closure based on one-dimensional turbulence modeling.** Journal of Computational Physics, 186:317-355, 2003.
- [Silveira-Neto et al.] SILVEIRA-NETO, A.; LIMA E SILVA, A. L. F.; DAMASCENO, J. J. R.. **Numerical simulation of two dimensional flows over a circular cylinder using the immerser boundary method.** Journal of Computational Physics, 189:351-370, 2003.

- [Smagorinsky] SMAGORISNKY, J.. **General circulation experiments with the primitive equations. I: the basic experiment.** Monthly Weather Review., 91(3): 99-165, 1963.
- [Smirnov et al.] SMIRNOV, A.; SHI, S.; CELIK, I.. **Random flow generation technique for large eddy simulations and particle dynamics modeling.** Journal of Fluids Engineering, 123:359-371, 2001.
- [Spalding] SPALDING, D. B.. **Mixing and chemical reaction in steady, confined turbulent flames.** 13th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 649-657, 1970.
- [Spode] SPODE, C.. **Simulação de grandes escalas e simulação híbrida RANS / LES do escoamento sobre o degrau com condições de contorno turbulentas.** Dissertação de Mestrado, Dept. de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Uberlândia, 2006.
- [Stanley] STANLEY, F. B.. **On the role of structure in turbulent mixing.** Paper AIAA 97-2636, 1997.
- [Stanley e Sarkar] STANLEY, S. A.; SARKAR, S.. **Direct numerical simulation of the developing region of turbulent planar jets.** Paper AIAA 99-0288 in the 37<sup>th</sup> Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Reno, NV, 1999.
- [Steinberg et al.] STEINBERG, A. M.; DRISCOLL, J. F.; FILATYEV, S.; CARTER, C. D.. **High resolution cinema stereo PIV system for the measurement of turbulent flame dynamics.** Paper B-13 in the 5<sup>th</sup> US Section meeting of the Combustion Institute, San Diego, CA, 2006.
- [Subramaniam e Pope] SUBRAMANIAM, S.; POPE, S. B.. **A mixing model for turbulent reacting flows based on euclidian minimum spanning trees.** Combustion and Flame, 115(4):487-514, 1998.
- [Thibaut e Candel] THIBAUT, D.; CANDEL, S.. **Numerical study of unsteady turbulent premixed combustion: application to flashback simulation.** Combustion and Flame, 113:53-65, 1998.
- [Tong e Wang] TONG, C.; WANG, D.. **Experimental study of velocity scalar filtered joint density function for LES of turbulent combustion.** Proceedings of the Combustion Institute, 330:567-574, 2005.
- [Trinite et al.] TRINITE, M.; FLOCH, A.; FISSON, F.; KAGEYAMA, T.; KWON, C. H.; POCHEAU, A.. **Proceedings of the Twelfth ICEDERS.** University of Michigan, Ann Arbor (EUA), p. 379-393, 1989.
- [Turns] TURNS, S. R.. **An introduction to combustion.** McGraw-Hill International Edition, Second Edition, 2000.

- [van Doormal e Raithby] VAN DOORMAL, J.; RAITHBY, G.. **Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows.** Numerical Heat Transfer, 7:147-163, 1984.
- [Veynante e Poinsot] VEYNANTE, D.; POINSOT, T.. **Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion.** New Tools in Turbulence Modeling, Les Editions de Physique, Springer Verlag, p. 105-140, 1997.
- [Veynante et al.] VEYNANTE, D.; TROUVE, A.; BRAY, K. N. C.; MANTEL, T.. **Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames.** Journal of Fluid Mechanics, 332:263-293, 1997.
- [Villermaux e Falk] VILLERMAUX, J.; FALK, L.. **A generalized mixing model for initial contacting of reactive fluids.** Chemical Engineering Science, 49:5127-5140, 1994.
- [Vreman et al.] VREMAN, A. W.; SANDHAM, N. D.; LUO, K. H.. **Compressible mixing layer growth rate and turbulence characteristics.** Journal of Fluid Mechanics, 320:235-258, 1996.
- [Waldherr et al.] WALDHERR, G. A.; DEGROOT, W. C.; STRAHLE, W. C.. **Pressure-density correlation in turbulent reacting flows.** Combustion and Flame, 83:17-26, 1991.
- [WEO] WORLD ENERGY OUTLOOK.. <http://www.iea.org/weo/2008.asp>, 2008.
- [Westbrook et al.] WESTBROOK, C. K.; MIZOBUCHI, Y.; POINSOT, T.; SMITH, P. J.; WARNATZ, J.. **Computational combustion.** Proceedings of the Combustion Institute, 30:125-157, 2005.
- [Williams] WILLIAMS, F. A.. **The mathematics of combustion.** Ed. Buckmaster, SIAM, Philadelphia, 1985.
- [Xu e Pope] XU, J.; POPE, S. B.. **Assessment of numerical accuracy of PDF / monte carlo methods for turbulent reacting flows.** Journal of Computational Physics, 152:192-230, 1999.
- [Zimont et al.] ZIMONT, V. L.; BIAGIOLI, F.; SYED, K.. **Modelling turbulent premixed combustion in the intermediate steady propagation regime.** Progress in Computational Fluid Dynamics, Volume 1, Nos 1/2/3:14-28, 2001.

## A

### Hipóteses Simplificadoras da Descrição da Cinética Química da Combustão

Este Apêndice apresenta a formulação que descreve a cinética das reações químicas e as hipóteses simplificadoras sobre estas adotadas, as quais permitem chegar a formulação do termo de taxa de reação química adimensional para uma reação única, global e irreversível.

Primeiramente, as equações fundamentais da cinética química são apresentadas. Considere-se um sistema químico composto por  $K$  espécies químicas reagindo através de  $M$  reações químicas elementares,

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{km} \mathcal{M}_k = \sum_{k=1}^K \nu''_{km} \mathcal{M}_k , \quad (\text{A-1})$$

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

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{km} W_k = \sum_{k=1}^K \nu''_{km} W_k , \quad (\text{A-2})$$

onde  $W_k$  é a massa molar da  $k$ -ézima espécie. Esta equação também se escreve,

$$\sum_{k=1}^K \nu_{km} W_k = 0 , \quad (\text{A-3})$$

com  $\nu_{km} = \nu'_{km} - \nu''_{km}$ .

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

$$S_k = \sum_{m=1}^M S_{km} = W_k \sum_{m=1}^M \nu_{km} q_m , \quad (\text{A-4})$$

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

$$\sum_{k=1}^K S_k = \sum_{k=1}^K \left[ W_k \sum_{m=1}^M v_{km} q_m \right] = \sum_{m=1}^M \left[ q_m \sum_{k=1}^K v_{km} W_k \right] = 0 . \quad (\text{A-5})$$

A velocidade da  $m$ -ézima reação,  $q_m$ , é dada por,

$$q_m = k_m^f \prod_{k=1}^K [X_k]^{v'_{km}} - k_m^r \prod_{k=1}^K [X_k]^{v''_{km}} , \quad (\text{A-6})$$

onde  $[X_k]$  é a concentração da  $k$ -ézima espécie, e  $k_m^f$  e  $k_m^r$  são as taxas de reação direta e inversa da  $m$ -ézima reação, respectivamente. As concentrações molares podem ser escritas como,

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k} = \frac{\rho_k}{W_k} = \frac{\rho}{\bar{W}} X_k , \quad (\text{A-7})$$

onde  $Y_k$ ,  $X_k$  e  $\rho_k$  representam, respectivamente, a fração mássica, a fração molar, e a densidade parcial da  $k$ -ézima espécie. As quantidades  $k_m^f$  e  $k_m^r$  constituem no problema central da modelagem dos processos químicos, as quais são descritas mediante a utilização da lei empírica de Arrhenius,

$$k_m^f = A_m T^{\beta_m} \exp\left(-\frac{E_m}{RT}\right) , \quad (\text{A-8})$$

onde  $A_m$ ,  $\beta_m$  e  $E_m$  são a constante pré-exponencial, o expoente da temperatura e a energia de ativação da  $m$ -ézima reação química, respectivamente. A velocidade de  $k_m^r$  pode ser calculada a partir de  $k_m^f$  e da constante de equilíbrio da  $k$ -ézima reação elementar,  $K_{cm}$  (Poinsot e Veynante, 2005).

Definidas as equações fundamentais da cinética química, são necessárias algumas simplificações para obter-se a taxa de reação química adimensional para uma única reação global e irreversível. Sendo assim, as hipóteses simplificadoras empregadas neste trabalho incluem,

- (a) Reação de combustão única e global ( $m = 1$ ) e irreversível ( $k_m^r = 0$ ), ou seja,



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

- (b) O combustível  $C$  é o reagente minoritário, ou seja,  $[X_C] \ll [X_O]$ , o que implica em,

$$Y_O = \frac{\dot{m}_O}{\dot{m}_O + \dot{m}_C} \approx 1 = cte , \quad (\text{A-10})$$

- (c) A difusividade do combustível é igual a difusividade térmica da mistura, ou seja,

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p \Gamma} = 1 , \quad (\text{A-11})$$

- (d) Número de Mach extremamente pequeno,  $Ma \ll 1$ ,  
 (e) O expoente de temperatura presente na lei de Arrhenius é nulo, ou seja,  
 $\beta = 0$ .

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

$$q = [X_C][X_O]A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) . \quad (\text{A-12})$$

Utilizando as igualdades da Eq.(A-9) na Eq.(A-12), escreve-se,

$$q = \left(\frac{\rho}{W}\right)^2 X_C X_O A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) . \quad (\text{A-13})$$

O tempo característico das reações químicas é definido como,

$$\tau_c = \left[ \frac{\rho}{W} X_C|_o X_O|_o A \exp\left(-\frac{E}{RT_u}\right) \right]^{-1} , \quad (\text{A-14})$$

onde  $X_C|_o$ ,  $X_O|_o$  são os valores iniciais das frações molares de combustível e das frações molares de oxidante, e  $T_u$  é a temperatura dos gases frescos. Combinando as Eqs. (A-12) e (A-13), tem-se,

$$q = \frac{1}{\tau_c} \frac{X_C}{X_C|_o} \frac{X_O}{X_O|_o} \exp\left(-\frac{E}{RT} + \frac{E}{RT_u}\right) . \quad (\text{A-15})$$

A variável de progresso da reação química é definida como,

$$c = 1 - \frac{X_C}{X_C|_o} = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} , \quad (\text{A-16})$$

onde  $T$  é a temperatura,  $T_u$  é a temperatura dos gases frescos e  $T_b$  é a temperatura dos gases queimados. O valor de  $c = 0$  corresponde aos gases frescos e o valor de  $c = 1$  corresponde aos gases queimados.

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

$$\gamma = \frac{T_b - T_u}{T_u} , \quad (\text{A-17})$$

$$\beta = \frac{E}{RT_u} , \quad (\text{A-18})$$

e substituindo as Eqs. (A-10), (A-16), (A-17), (A-18) na Eq. (A-15), chega-se a seguinte expressão simplificada da taxa de progresso da reação única global,

$$q = \frac{1}{\tau_c} \frac{\rho}{\bar{W}} (1 - c) \exp \left( \beta \frac{c}{c + 1/\gamma} \right) . \quad (\text{A-19})$$

A taxa de reação química,  $S(c)$ , relaciona-se com a taxa de progresso da reação única global,  $q$ , e a taxa de produção química adimensional,  $\dot{S}$ , pela seguinte expressão,

$$S(c) = \bar{W} q(c) = A_\tau \rho \dot{S}(c) , \quad (\text{A-20})$$

onde  $A_\tau = 1/\tau_c$  e,

$$\dot{S}(c) = (1 - c) \exp \left( \beta \frac{c}{c + 1/\gamma} \right) . \quad (\text{A-21})$$

Cabe notar que este termo adimensional,  $\dot{S}(c)$ , apresenta uma dependência fortemente não linear dos valores de energia de ativação reduzida,  $\beta$ , dos valores de calor de reação reduzido,  $\gamma$ , e dos valores da variável de progresso,  $c$ , os quais são de  $c = 0$  nos gases queimados e  $c = 1$  nos gases frescos.

**B****Derivação das Equações de Transporte da PDF**

Neste Apêndice, inspirado no trabalho de Orbegoso (2007), é derivada a equação de transporte da função densidade probabilidade (PDF) conjunta do campo de velocidade, das frações mássicas das espécies químicas e da entalpia,  $P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{u}, \mathbf{Y}, h}(\mathbf{V}, \boldsymbol{\varphi}, H; \mathbf{x}, t)$ . Esta derivação é baseada nos trabalhos de Pope (1985) e Dopazo (1994), nos quais as equações de transporte de quantidade de movimento, de transporte da fração mássica das espécies químicas e de energia, apresentada sob a forma de entalpia, são escritas em termos das derivadas materiais das propriedades a serem transportadas. Para  $i$  e  $j = 1, 2, 3$  e  $k = 1, \dots, K$ , tais equações escrevem-se, respectivamente,

$$\frac{Du_i}{Dt} = \rho A_i, \quad \text{onde } \rho A_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i, \quad (\text{B-1})$$

$$\frac{DY_k}{Dt} = \rho C_k, \quad \text{onde } \rho C_k(\mathbf{x}, t) = -\frac{J_{kj}}{\partial x_j} + S_k, \quad (\text{B-2})$$

$$\frac{Dh}{Dt} = \rho C_h, \quad \text{onde } \rho C_h(\mathbf{x}, t) = -\frac{J_{hj}}{\partial x_j} + S_h. \quad (\text{B-3})$$

Nestas equações o termo  $\rho A_i$  representa a aceleração da partícula de fluido e os termos  $\rho C_k$  e  $\rho C_h$  representam a taxa de variação das frações mássicas das espécies químicas e da entalpia, respectivamente.

As Eqs. (B-1) a (B-3) mostram que 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 de espécies químicas,  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_K)$ , pela entalpia,  $h$ , e pela pressão,  $p$ . Sendo assim, uma descrição completa de um escoamento turbulento reativo pode ser realizada mediante o uso da PDF conjunta dos campos de velocidade, fração mássica das espécies químicas e da entalpia.

Seguindo as derivações baseadas nos tratamentos de Pope (1985) e Dopazo (1994), define-se um conjunto de variáveis aleatórias que representam o estado do fluido,  $\Phi(\mathbf{x}, t) = [\mathbf{u}(\mathbf{x}, t), \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t), h(\mathbf{x}, t)]$ . A PDF conjunta do campo vetorial  $\Phi$  é definida como,

$$\begin{aligned} P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi &\equiv Prob \{ \Psi \leq \Phi(\mathbf{x}, t) < \Psi + d\Psi \} \\ &\equiv Prob (\{\mathbf{V} \leq \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) < \mathbf{V} + d\mathbf{V}\} \cap \\ &\quad \{\boldsymbol{\varphi} \leq \mathbf{Y}(\mathbf{x}, t) < \boldsymbol{\varphi} + d\boldsymbol{\varphi}\} \cap \{H \leq h(\mathbf{x}, t) < H + dH\}) . \end{aligned} \quad (B-4)$$

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

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{DQ}{Dt} \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho(\Phi) Q(\Phi) \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho(\Phi) u_j Q(\Phi) \rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Phi) Q(\Phi) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi + \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Phi) u_j Q(\Phi) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi . \end{aligned} \quad (B-5)$$

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

$$\left\langle \rho \frac{DQ}{Dt} \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Phi) \left\{ \rho(\Phi) \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \rho(\Phi) V_j \frac{\partial P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right\} d\Psi . \quad (B-6)$$

Em resumo, devido a 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 massicas e da entalpia.

O valor médio da derivada material de  $Q$  também pode ser escrito de outra forma,

$$\rho \frac{DQ(\Phi)}{Dt} = \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} \frac{D\Phi_i}{Dt} = \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i , \quad (\text{B-7})$$

com,

$$R_i = \frac{D\Phi_i}{Dt} , \quad i = 1, \dots, K + 4 \quad (\text{B-8})$$

onde  $R_i$  representa a taxa de variação por unidade de volume do campo vetorial  $\Phi$ . Aplicando-se o operador de média na Eq. (B-7),

$$\left\langle \rho \frac{DQ}{Dt} \right\rangle = \left\langle \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i \right\rangle . \quad (\text{B-9})$$

O lado direito desta equação contém informação de natureza multiponto oriunda da média, dos gradientes e dos laplacianos das propriedades (Fox, 2003). Uma vez que estas informações não se encontram na formulação do tipo uniponto 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 uniponto de  $\Phi$  e  $\mathbf{Z}$  como  $P_{\Phi, \mathbf{Z}}(\Psi; \mathbf{z}, \mathbf{x}, t)$ . Esta PDF pode ser expressa em termos de uma PDF conjunta do campo vetorial  $\Phi$  segundo o teorema de Bayes,

$$P_{\Phi, \mathbf{Z}}(\Psi; \mathbf{z}, \mathbf{x}, t) = P_{\mathbf{Z}|\Phi}(\mathbf{z}|\Psi; \mathbf{x}, t) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) . \quad (\text{B-10})$$

Assim, o lado direito da Eq. (B-9) pode ser escrito como,

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i \right\rangle &= \iint_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial \Psi_i} R_i(\Psi, \mathbf{z}) P_{\Phi, \mathbf{Z}}(\Psi; \mathbf{z}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{z} d\Psi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial \Psi_i} \langle R_i | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi \end{aligned} \quad (\text{B-11})$$

Nesta equação o valor médio condicional é definido como,

$$\langle R_i | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} R_i(\Psi, \mathbf{z}) P_{\mathbf{Z}|\Phi}(\mathbf{z}|\Psi; \mathbf{x}, t) d\mathbf{z} . \quad (\text{B-12})$$

Nota-se que  $\langle R_i | \Psi \rangle$  é função de  $\Psi$ , de modo que o termo do lado direito da Eq. (B-11) pode ser escrito utilizando integração por partes,

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) Q(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi_{\neq i} \Big|_{\Psi_i=-\infty}^{\Psi_i=+\infty} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} [\rho(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi . \end{aligned} \quad (\text{B-13})$$

A primeira integral do lado direito possui uma dimensão a menos do que a segunda. O primeiro termo do lado direito da Eq. (B-13) está relacionado com os fluxos de probabilidade das fronteiras do domínio  $(-\infty, +\infty)$ . Para qualquer PDF que represente um processo físico não singular este fluxo deve ser nulo. Assim, o primeiro termo do lado direito é nulo (Pope, 1985). Logo, a derivada material de  $Q$  se reduz a,

$$\left\langle \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i \right\rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial \Psi_i} [\rho(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi . \quad (\text{B-14})$$

De acordo com a Eq. (B-9), as Eqs. (B-6) e (B-14) são equivalentes. Igualando os termos do lado direito das Eqs. (B-6) e (B-14) e supondo que a igualdade deve se manter para uma escolha arbitrária de  $Q$ , a equação de transporte da PDF conjunta do vetor  $\Phi$  apresenta a seguinte forma,

$$\rho(\Psi) \left[ \frac{\partial P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + V_j \frac{\partial P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial}{\partial \Psi_i} [\rho(\Psi) \langle R_i | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)] , \quad (\text{B-15})$$

onde o termo do lado direito é conhecido como fluxo condicionado.

Outra forma de escrever a equação de transporte para uma PDF decorre da definição de  $Q(\Phi) = Q(\mathbf{u}, \mathbf{Y}, h)$ . Levando em conta a Eq. (B-7), pode-se verificar que,

$$\rho \frac{DQ(\Phi)}{Dt} = \rho \left[ \frac{\partial Q}{\partial u_j} \frac{Du_j}{Dt} + \frac{\partial Q}{\partial Y_k} \frac{DY_k}{Dt} + \frac{\partial Q}{\partial h} \frac{Dh}{Dt} \right] , \quad (\text{B-16})$$

para  $j = 1, 2, 3$  e  $k = 1, \dots, K$ . Substituindo as derivadas materiais da Eq. (B-16) com aquelas das Eqs. (B-1), (B-2) e (B-3), escrevem-se,

$$\rho \frac{DQ(\Phi)}{Dt} = \rho \frac{\partial Q}{\partial u_j} A_j + \rho \frac{\partial Q}{\partial Y_k} C_k + \rho \frac{\partial Q}{\partial h} C_h . \quad (\text{B-17})$$

Igualando o lado direito das Eqs. (B-7) e (B-17) e aplicando a média,

$$\left\langle \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i \right\rangle = \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial u_j} A_j \right\rangle + \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial Y_k} C_k \right\rangle + \left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial h} C_h \right\rangle . \quad (\text{B-18})$$

Nota-se que o índice  $i$  representa o índice global do vetor  $\Phi$ , que corresponde a 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. (B-18) encontram-se representadas as seguintes igualdades,

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial u_j} A_j \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial V_j} \langle A_j | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi , \quad (\text{B-19})$$

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial Y_k} C_k \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial \varphi_k} \langle C_k | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi , \quad (\text{B-20})$$

$$\left\langle \rho \frac{\partial Q}{\partial h} C_h \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\Psi) \frac{\partial Q(\Psi)}{\partial H} \langle C_h | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t) d\Psi . \quad (\text{B-21})$$

Levando-se em conta o mesmo procedimento matemático da Eq. (B-13) para as Eqs. (B-19), (B-20) e (B-21), escreve-se

$$\begin{aligned} \left\langle \rho \frac{DQ}{D\Phi_i} R_i \right\rangle &= - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial \varphi_k} [\rho(\Psi) \langle C_k | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\Psi) \frac{\partial}{\partial H} [\rho(\Psi) \langle C_h | \Psi \rangle P_\Phi(\Psi; \mathbf{x}, t)] d\Psi . \end{aligned} \quad (\text{B-22})$$

Igualando as Eqs. (B-6) e (B-22) obtém-se uma forma equivalente para a equação de transporte da PDF conjunta do campo de velocidade, das frações mássicas e da entalpia, a qual é utilizada no presente trabalho,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\Psi) P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \rho(\Psi) u_j P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)}{\partial x_j} &= - \frac{\partial}{\partial V_j} [\rho(\Psi) \langle A_j | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] \\ &- \frac{\partial}{\partial \varphi_k} [\rho(\Psi) \langle C_k | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)] - \frac{\partial}{\partial H} [\rho(\Psi) \langle C_h | \Psi \rangle P_{\Phi}(\Psi; \mathbf{x}, t)]. \end{aligned} \quad (\text{B-23})$$

Na forma apresentada pela Eq. (B-23) os termos do lado direito são chamados fluxos condicionados de velocidade, das frações mássicas e da entalpia, respectivamente, os quais desempenham um papel importante na solução da equação de transporte da PDF conjunta. Uma das características desta formulação é de ser atrativa frente outras abordagens de escoamentos turbulentos reativos devido a sua implementação numérica simples. Como é visto no Cap. 3, para um dado tempo, o escoamento turbulento reativo é representado por uma grande quantidade de partículas, cada uma destas tendo seu próprio conjunto de propriedades (posição, velocidade, composição, etc...). Estas propriedades evoluem e acordo com uma formulação de equações estocásticas estatisticamente equivalentes a equação de transporte euleriana, Eq. (B-23), de forma que as partículas numéricas simulem as partículas do escoamento.