

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
ENGENHARIA HIDRÁULICA E SANEAMENTO



GUILHERME BARBOSA LOPES JÚNIOR

**ORGANIZAÇÃO DE EQUAÇÕES ESTATÍSTICAS PARA
TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM PROCESSOS TURBULENTOS**

Dissertação

Orientador: Harry Edmar Schulz

VERSÃO CORRIGIDA

São Carlos – SP

2012

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
ENGENHARIA HIDRÁULICA E SANEAMENTO

GUILHERME BARBOSA LOPES JÚNIOR

**ORGANIZAÇÃO DE EQUAÇÕES ESTATÍSTICAS PARA
TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM PROCESSOS TURBULENTOS**

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciência em Engenharia Hidráulica e Saneamento pela Escola de Engenharia de São Carlos – Universidade de São Paulo.

São Carlos – SP

2012

DEDICATÓRIA

Cada página aqui escrita está dedicada à família. Não posso jamais esquecer o apoio incondicional e, sem dúvida, imprescindível dado pelos meus pais, Guilherme e Margarida, cujo apoio, paciência e incentivo, foram a força motriz para o sucesso durante o desenvolvimento deste.

Aos avôs e avós, cujos ensinamentos diretos e indiretos foram essenciais na minha formação como pessoa, cujas lições valiosas me fazem discernir sobre os caminhos a tomar e sem cujo passado, não haveria o meu presente.

Agradeço também aos irmãos. Não só os de sangue: Renata, Roberta, e Rodrigo, que deram todo apoio possível, mas também os de coração que estiveram presentes de coração ao longo desses anos. Não vale citar nomes, que possam gerar ressentimento a outros, mas para quem aqui dedicar um pouco de tempo a esta leitura saberá que estou falando dos AMIGÕES, primos, primas e cunhado que me foram leais do começo ao fim e serviram de impulso nas minhas conquistas.

Também não me esqueço dos padrinhos de coração. Meus tios Fábio e Alexandre e as minhas tias Malba e Elza, que foram como pais para mim, dando apoio em tudo que me foi necessário ao longo da minha vida. Aos tio Ivo e Graça, de cujo amor e carinho se deve uma grande parcela do meu equilíbrio na distância de casa, tendo sido excelentes representantes da família tão amada.

Aos meus pais, Guilherme e Margarida.

Aos meus avôs (*in memoriam*) e minhas avós.

Aos meus irmãos de sangue e de coração.

Aos padrinhos e madrinhas.

AGRADECIMENTOS

Esta é, talvez, uma das páginas mais importantes do presente trabalho. Aqui é o espaço reservado para se prestar as devidas homenagens, mesmo que singelas, àqueles que foram primordiais na sua elaboração.

Ao meu orientador e incentivador, Prof. Harry E. Schulz, que me guiou até este ponto através de um caminho de conhecimentos turbulentos, que me deu a oportunidade de aprofundar em um tema tão interessante e que possibilitou a continuação de maneira sólida da construção de meus conhecimentos, devo com toda sinceridade um MUITO obrigado!

Também agradeço pelo apoio e pelos conselhos de meus amigos e “companheiros acadêmicos” André e Raquel, cujas longas conversas geraram ideias, pensamentos e conhecimentos, além dos laços de amizade.

Agradecimentos ao departamento de Hidráulica e Saneamento e a todos os seus funcionários que foram de suma importância para que os conhecimentos pudessem ser consolidados e que o presente trabalho fosse alcançado.

É de praxe eu também agradecer a uma pessoa que foi de suma importância na minha formação de base: Prof. Roberaldo C. de Souza, pois qualquer engenheiro sabe que sem uma boa fundação, não se pode construir uma obra grandiosa. A minha obra ainda está começando, quase tudo em planejamento ainda, mas sei que posso edificá-la sem medo, pois a base é sólida e firme.

RESUMO

Em mecânica dos fluidos, especificamente em processos turbulentos, o problema de fechamento representa um dos maiores desafios para qualquer pessoa interessada nesta área. Durante décadas, cientistas vêm usando abordagens estatísticas com o objetivo de "fechar" o problema ou, pelo menos, diminuir as dificuldades inerentes. Assim, o presente trabalho apresenta uma criteriosa análise com base em ferramentas estatísticas em que ondas quadradas aleatórias, aliadas a um número fixo de parâmetros, foram utilizadas para criar equações paramétricas para representar um fluxo turbulento unidimensional com uma abordagem *a priori*, diferenciando de outras abordagens aplicadas amplamente na área, que utilizam uma abordagem *a posteriori*. Em seguida, simulações foram realizadas, a fim de avaliar o comportamento do modelo. Nas simulações pôde-se reproduzir o comportamento observado na literatura e estipular a abrangência do método. Além disso, uma importante discussão acerca das condições de contorno foi desenvolvida.

Palavras-chave: Escoamento turbulento; problema de fechamento; abordagem *a priori*; condições de contorno.

ABSTRACT

In fluid mechanics, specifically in turbulent processes, the closure problem represents one of the biggest challenges for anyone interested in this area. For decades, scientists have been using statistical approaches aiming to “close” the problem or, at least, decrease the inherent difficulties. So, the present project presents a judicious analyze based on statistical tools in which random square waves, allied with a fixed numbers of parameters, were used to create parametric equations to represent a turbulent flow with an *a priori* approach, differentiating from other approaches broadly applied in the area, which use an *a posteriori* approach. Then simulations were done, in order to evaluate the behavior of the model. In the simulations, the behavior of some data from the literature could be followed and the scope of the method was stipulated. Besides this, an important discussion about boundary conditions was developed.

Key-words: Turbulent flow; closure problem; *a priori* approach; boundary conditions.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1: concentração em função de z e do tempo. (SCHULZ ET AL., 2011a)	20
Figura 2-2: comportamento da concentração e sua simplificação ao longo do tempo para uma seção z . (SCHULZ ET AL., 2011a)	21
Figura 2-3: camada limite de transferência no meio em análise	24
Figura 2-4: perfil da camada limite de transferência.	26
Figura 2-5: superposições extremas entre concentração e velocidade.	27
Figura 2-6: análise de m a partir de β e n	27
Figura 2-7: oscilações da velocidade. (SCHULZ ET AL., 2011b)	30
Figura 2-8: simulação do comportamento de n em função de y	35
Figura 2-9: esquema espacial de pontos de auxílio para o método de Runge-Kutta.	37
Figura 3-1: gráfico da simulação de n para $\alpha cp = 0,5$ e $S = 600$	47
Figura 3-2: gráfico da simulação para de n para $\alpha cp = 0,6$ e $S = 600$	48
Figura 3-3: gráfico de simulação de n a partir de αcp predominante variável com mudança na segunda derivada como condição de contorno.	49
Figura 3-4: gráfico de simulação para αcp e as condições de contorno do tipo Neumann variáveis.	50
Figura 3-5: comparação das curvas de $\alpha cp = 0,4$ das Figuras 3-3 e 3-4.	51
Figura 3-6: comparação das curvas de $\alpha cp = 0,6$ das Figuras 3-2 e 3-4.	51
Figura 3-7: esquema geral para as condições de contorno em relação aos resultados. ...	55
Figura 4-1: Escoamento turbulento entre placas planas (SCHULZ ET AL., 2011b).	59
Figura 4-2: dados de Wei e Willmarth (1989) para a estimativa de $V +$ (POPE, 2000). 61	
Figura 4-3: dados de Wei e Willmarth (1989) para a obtenção de V' (POPE, 2000).	62
Figura 4-4: distribuições Normais (MONTGOMERY E RUNGER, 2003).	63
Figura 4-5: verificação do comportamento da equação 4.18 com os dados de Wei e Willmarth (1989 apud POPE, 2000) (SCHULZ ET AL., 2011b)	64

LISTA DE SÍMBOLOS

θ	Ordem do balanço dos momentos centrais;
ϕ	Expoente de elevação qualquer;
O	Ordem da derivada;
ν_t	Viscosidade turbulenta;
D	Difusividade molecular;
e	Espessura da camada limite de transferência;
z^*	Posição relativa (z/e);
\bar{r}	Coefficiente de correlação;
κ	Constante de von Kármán (equação 4.16);
δ_{ij}	Delta de Kronecker;
κ	Energia cinética turbulenta;
ϵ	Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta;
ω	Frequência turbulenta (ϵ/κ);
z^*	Posição relativa (z/e);
z^+	Razão entre a distância da parede e a escala de comprimento viscosa;
Z'	Seção qualquer no interior da camada limite;
C	Concentração;
\bar{C}	Concentração média;
c	Oscilação de concentração;
c_1	Oscilação de concentração positiva em relação à media;
c_2	Oscilação de concentração negativa em relação à media;
C_p	Concentração anterior;
C_n	Concentração posterior;
P	Variável de redução;
N	Variável de incremento;
\bar{g}	Geração média ou consumo médio de massa por unidade de tempo;
K	Coefficiente de crescimento;
t	Tempo;
i, j	Coordenadas espaciais quaisquer;
V_i	Velocidade pontual em uma coordenada espacial i ;
\bar{V}_i	Velocidade pontual média em uma coordenada espacial i ;

v_i	Oscilação da velocidade pontual em uma coordenada espacial i ;
$\sqrt{\overline{v^2}}$	<i>Root Mean Square</i> (RMS) da velocidade;
v_1	Oscilação da velocidade positiva em relação à média;
v_2	Oscilação da velocidade negativa em relação à média;
V_τ	Velocidade de atrito ou cisalhante;
V^+	Velocidade relativa (\overline{V}/V_τ);
V'	Velocidade relativa do RMS ($\sqrt{\overline{v^2}}/V_\tau$);
V'_p	Velocidade virtual máxima relativa (V_p/V_τ);
$\overline{vC^\phi}$	Fluxo de massa turbulento de expoente de concentração ϕ ;
δv	Escala de comprimento viscoso (ν/V_τ);
n	Função de partição para a concentração;
m	Função de partição para a velocidade;
α_c	Função de redução para concentração;
α_c^p	Função de redução predominante para concentração;
α_v	Função de redução para velocidade;
β	Função de superposição;
P_{base}^1	Coefficiente intermediário do processo de parametrização;
S	Coefficiente de sintetização do processo de parametrização (D/Ke^2);
ψ	“Taxa” de variação para o método de Runge-Kutta;
h	Variação para o método de Runge-Kutta;
k	Coefficiente de ponderação para o método de Runge-Kutta;
δR	Fronteira da região R .

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	12
1.1	Contextualização.....	12
1.2	Objetivos.....	14
1.2.1	Geral.....	14
1.2.2	Específicos.....	14
1.3	Modelos de Turbulência.....	14
1.4	Ponto de Partida.....	17
2	METODOLOGIA.....	18
2.1	Equações Básicas.....	18
2.2	Considerações Iniciais.....	19
2.3	Funções Paramétricas.....	22
2.3.1	Função de Partição.....	22
2.3.2	Função de Redução.....	23
2.3.3	Superposição e Correlação entre Velocidade e Concentração.....	26
2.4	Processo de Parametrização.....	28
2.4.1	Flutuações de Concentração e Velocidade.....	29
2.4.2	Fluxos de Massa Turbulentos.....	31
2.4.3	Derivadas.....	32
2.4.4	Produtos entre Flutuações e Derivadas.....	33
2.5	Simulação.....	34
2.5.1	Método de Runge-Kutta.....	36
2.5.2	Processo de Simulação.....	39
2.6	Análise dos Resultados.....	42
3	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	43
3.1	Modelo Proposto.....	43

3.1.1	Equação Global.....	44
3.1.2	Simulações.....	46
3.1.3	Comentários.....	52
3.2	Análises Subsequentes Alternativas	56
4	ANÁLISE BIDIMENSIONAL PRÉVIA.....	58
5	COMENTÁRIOS FINAIS	65
	APÊNDICE I: equação para média de oscilações exponenciais.	68
	APÊNDICE II: equação para oscilações de velocidade.	70
	APÊNDICE III: expressão geral para o fluxo de massa turbulento.	71
	APÊNDICE IV: derivadas parciais para a concentração média.....	78
	APÊNDICE V: derivadas parciais para oscilações exponenciais médias.	80
	APÊNDICE VI: produtos entre flutuações e derivadas.	84
	APÊNDICE VII: parametrização por partes para o primeiro modelo.....	85
	APÊNDICE VIII: equações para primeira simulação.	102
	APÊNDICE IX: tabelas resumos para a aplicação do método de Runge-Kutta.	106
	REFERÊNCIAS	108

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização

A mecânica, aqui entendida como a área do conhecimento que estuda o movimento e suas causas, é uma área de estudos que tem apresentado grandes desafios à ciência desde a antiguidade. Nesse sentido, dá-se destaque à mecânica dos fluidos, na qual a “turbulência” não possui quantificação definitiva devido à complexidade física inerente de seus fenômenos. A turbulência tem sido estudada com ferramentas desenvolvidas para a “mecânica dos fluidos estatística”, as quais evoluem com o crescimento em paralelo da matemática moderna.

O escoamento turbulento, como o próprio nome já sugere, representa um fenômeno não regular ou previsível do fluido em questão. Alguns autores ainda classificam como sendo aquele em que as partículas fluidas misturam-se rapidamente enquanto se movimentam, devido a flutuações aleatórias de velocidades que podem ocorrer tridimensionalmente (FOX ET AL., 2010).

Os fenômenos turbulentos, em sua origem, têm sido explicados utilizando conceitos da teoria da instabilidade e caos e, quando é considerada a turbulência já estabelecida, ou seja, quando suas características médias podem ser quantificadas a partir de uma amostragem conveniente, uma abordagem estatística é feita. Já a não linearidade do equacionamento básico, gera mais incógnitas do que equações, o que é denominado de “problema de fechamento” da turbulência. Para tanto, estudiosos têm tentado encontrar relações estatísticas para contornar o problema decorrente do número de incógnitas que esses fenômenos envolvem.

Não há, entretanto, consenso em como quantificar definitivamente a turbulência. Ferramentas estatísticas valorizam grandezas médias de variáveis que possuem características “quase aleatórias”, uma vez que suas flutuações são limitadas por propriedades moleculares como viscosidade e difusividade.

Por outro lado, a instabilidade de um escoamento (se bem que nem de todos) pode ser acompanhada usando conceitos desenvolvidos para o caos, que é um estado final essencialmente aleatório. A evolução para esse estado aleatório, entretanto, pode seguir padrões determinísticos, o que é explorado nas teorias de caos. Assim, para estudar

turbulência é preciso “adentrar” nesse mundo de definições eventualmente “contraditórias” e organizar as informações úteis e potencialmente esclarecedoras.

As teorias estatísticas consideram que as oscilações podem ser representadas como uma parcela sobreposta ao escoamento médio. Este processo é conhecido amplamente como a decomposição de Reynolds e, com isso, uma grandeza G qualquer em uma coordenada i é dada pela média somada com a oscilação, na forma:

$$G_i = \overline{G}_i + g_i \quad (1.01)$$

Segundo Ramos et al. (2006), as teorias clássicas de turbulência são baseadas fortemente em argumentos heurísticos e fenomenológicos e, portanto, são advindos de problemas simplificados ou com aproximações que tornam as soluções particulares.

Com isso, torna-se essencial aplicar teorias matemáticas avançadas para se obterem modelos mais globais, de forma a abranger mais situações de trabalho. Esse aumento da robustez do modelo estatístico passa, então, a ser um desafio, uma vez que não é uma tarefa óbvia produzir um que “feche” o sistema de equações com um número finito de incógnitas, mantendo a simplicidade almejada pelo cálculo das grandezas médias.

Na mecânica são utilizados os princípios físicos clássicos de conservação: Massa, Quantidade de Movimento e Energia. Assim, em um escoamento turbulento esses princípios se aplicam ao próprio fluido. Adicionalmente, ao estudar o transporte de uma grandeza escalar neste escoamento, tem-se um fenômeno que é consequência da existência da turbulência, mas que também segue princípios de conservação para a própria grandeza. Desta forma, podem-se estudar características da turbulência a partir do estudo de seus efeitos sobre um composto transportado no fluido, que é a abordagem seguida neste estudo.

Tal abordagem, na qual o estudo destas características a partir de seus efeitos sobre a grandeza “transportada” no fluido, especificamente a transferência de massa, caracteriza tanto os aspectos principais como os detalhes do processo de transferência, que são vitais na caracterização do escoamento turbulento (TOWNSEND, 1980).

1.2 Objetivos

1.2.1 Geral

Como objetivo geral, busca-se organizar o conhecimento gerado na obtenção de um modelo unidimensional robusto para a transferência de massa em regime turbulento baseado em teorias estatísticas. Na sequência, pretende-se avançar na tipificação dessa nova abordagem, procurando avaliar generalizações.

1.2.2 Específicos

- Organizar os conceitos em um texto de língua portuguesa, uma vez que a maioria dos textos gerados foi apresentada em língua inglesa;
- Análise detalhada das funções paramétricas do modelo;
- Análise detalhada do conjunto de equações gerado para o modelo;
- Analisar a abrangência do modelo através de simulações;
- Detalhar a sistemática de análise do problema unidimensional de transferência de massa para um regime turbulento;
- Detalhar uma proposta de abordagem, indicando os desafios e possíveis empecilhos, para uma análise bidimensional.
- Apresentar novas conclusões vinculadas aos contornos adequados aos problemas unidimensionais de transporte de escalares.

1.3 Modelos de Turbulência

Os modelos de turbulência são alternativas criadas na tentativa de “driblar” as dificuldades inerentes do problema de fechamento em turbulência através de relações para as tensões de Reynolds.

É verdade, no entanto, que o uso de Simulações Numéricas Diretas (SND) tem aumentado seu espectro, mas mesmo assim, suas limitações quanto à precisão e ao custo computacional ainda inviabilizam seu uso para tais modelos.

Conforme destacado por Silveira Neto (2001), em 1991 os estudos em escala mundial se limitavam na utilização de SND para um número de Reynolds de até 600, enquanto que no ano de 2000 já existiram estudos em desenvolvimento e alguns já finalizados (com resultados razoáveis) de número de Reynolds de até 1700.

Atualmente, com os avanços tecnológicos, é possível que esta fronteira seja ultrapassada, mas mesmo assim ainda há limitações do uso de simulação direta, o que reforça o uso dos modelos turbulentos.

Dentre os modelos turbulentos, verificou-se ser conveniente fazer uma distinção entre os modelos *a priori* e os modelos *a posteriori* (Schulz et al., 2011b). Os primeiros são assim chamados por definirem, no conceito inicial que os molda, todas as grandezas físicas e conceituais que eventualmente venham a surgir pelo problema de fechamento ou quaisquer outros.

Já nos modelos *a posteriori*, que são amplamente difundidos no meio acadêmico, as grandezas estatísticas que caracterizam o não fechamento são estudadas de forma independente, inserindo modelos empíricos ou heurísticos, por exemplo, o uso da viscosidade turbulenta de Boussinesq.

No presente trabalho, detalha-se um modelo *a priori*, apresentando contribuições referentes aos contornos adotados para a sua solução, mas cabe, no presente item, uma abordagem resumida sobre alguns dos principais modelos *a posteriori*. Vale ressaltar que o assunto será apenas tangenciado, já que não é foco do presente trabalho, servindo para situar o tema no atual contexto.

- Viscosidade Turbulenta

O conceito de viscosidade turbulenta, proposta por Boussinesq, é que o tensor de Reynolds ($-\rho\overline{v_i v_j}$) poderia ser expresso através das variações das oscilações das velocidades nas coordenadas espaciais. Para isso, foi feito uso de uma função que representaria as características do escoamento, diferentemente da viscosidade molecular, que depende das características do fluido.

Desta forma o “tensor de Reynolds” é apresentado na seguinte forma:

$$\overline{v_i v_j} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \nu_t \left(\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial j} + \frac{\partial \overline{v_j}}{\partial i} \right) \quad (1.02)$$

Onde ν_t é a viscosidade turbulenta, k é a energia cinética turbulenta e δ_{ij} é o delta de Kronecker (valor oscilante entre 1, para $i = j$, e 0, para $i \neq j$). A energia cinética

turbulenta, por sua vez, pode ser incorporada à pressão hidrodinâmica ao longo de algumas metodologias, por depender apenas do tensor de Reynolds.

Infelizmente, para muitos escoamentos, as precisões das hipóteses da viscosidade turbulenta estão aquém das esperadas (POPE, 2000), mas mesmo assim são amplamente utilizadas pelos modelos *a posteriori*.

- Classificação dos Modelos

Os modelos podem ser classificados em quatro tipos, a partir do número de equações de transporte utilizadas para solucionar o problema de fechamento, sendo assim descritos:

- i. Zero equação: existem dois tipos de modelo de zero equação: o primeiro não considera a viscosidade turbulenta em sua modelagem, fazendo uso de relações algébricas com a velocidade para modelar as tensões turbulentas; e há ainda o segundo tipo, no qual os modelos são baseados no comprimento de Prandtl para modelar a viscosidade turbulenta a fim de solucionar o problema.
- ii. Uma equação: acrescenta-se uma equação de transporte adicional para a resolução do problema. Por exemplo, cita-se o modelo $k - L$, onde o k é modelado pela equação de transporte e o L representa um comprimento característico em questão. Este tipo de modelo representa um grande avanço em relação aos anteriores, mas mesmo assim possui limitações quanto ao uso em escoamentos complexos, o que motivou a criação do próximo tipo;
- iii. Duas equações: são utilizadas duas equações de transporte adicionais para modelar a viscosidade turbulenta. Neste caso, citam-se como exemplo os modelos $k - \varepsilon$ (amplamente utilizados em códigos comerciais de Dinâmica dos Fluidos Computacional, este modelo utiliza uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta, k , e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, ε) e o $k - \omega$ (este modelo utiliza uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta, k , e outra para a frequência turbulenta, $\omega = \varepsilon/k$);
- iv. Seis equações: já esta classe de modelos utilizam seis equações de transporte para as componentes de tensões do tensor de Reynolds.

Para os modelos de duas equações, existem ainda as variações dos modelos citados, mostrando, assim, o amplo espectro de estudos realizados sobre os dois modelos. Em

todos os casos, o problema de fechamento é apresentado e, tenta-se contornar através de uma postura *a posteriori*, apresentando equações e novos conceitos à medida que se sente a necessidade.

1.4 Ponto de Partida

O presente estudo fundamenta-se no equacionamento estatístico apresentado em Schulz et al. (2011a, b).

No referido equacionamento, os autores adotaram ondas quadradas aleatórias para definir grandezas e gerar relações entre as grandezas envolvidas. Para avaliar a sua adequação no problema de fechamento, foi utilizada a equação para o balanço dos momentos centrais. Ambos os procedimentos utilizados serão destacados mais adiante.

Para a comparação dos resultados obtidos no presente estudo com dados experimentais, buscaram-se dados da literatura, como aqueles descritos por Schulz e Janzen (2009).

Vale ressaltar que existem hoje modelos amplamente utilizados para quantificar escoamentos turbulentos, como o modelo κ - ϵ , já comentado, que utiliza uma primeira relação semiempírica proposta por Kolmogorov ao equacionar a assim denominada “viscosidade turbulenta”. No entanto, essa aproximação já considera a hipótese de Boussinesq, na qual o fluxo turbulento de quantidade de movimento é definido como proporcional ao gradiente da velocidade média.

No presente trabalho esse tipo de hipótese não é seguido. Os fluxos turbulentos são quantificados diretamente a partir do produto das flutuações, o que representa uma vantagem inicial, já que incorpora desde o início da análise as características físicas do problema, sendo, portanto, definido como um modelo *a priori*.

Portanto, visa-se aqui detalhar as bases, bem como aprofundar e aprimorar um modelo proposto mais recentemente e cuja simplicidade pode representar um avanço na análise de turbulência. Pretende-se que este trabalho contribua no desenvolvimento e concretização desta abordagem.

2 METODOLOGIA

2.1 Equações Básicas

Como o próprio tema sugere, a proposta aqui abordada busca, através de alguns conceitos estatísticos, contornar o problema de fechamento clássico recorrente no equacionamento de escoamentos turbulentos.

Para tanto, o problema necessita inicialmente uma equação que represente de maneira geral o problema de transferência de massa unidimensional e outra que represente de maneira estatística o mesmo problema.

Obviamente, vale ressaltar, que mais equações podem ser inseridas no problema como forma de tentar auxiliar a resolução, mas existem duas possibilidades que devem ser atentadas:

- a primeira é que ao se inserir novas equações no sistema são geradas novas variáveis, caracterizando o problema de fechamento em si;
- a segunda é que elas, mesmo com novas variáveis, não inutilizem o modelo, o que pode ocorrer devido ao aumento de sua complexidade.

As equações para o escoamento turbulento são originadas das equações originais de conservação. Para o corrente trabalho, foca-se na conservação de massa de um composto em um escoamento qualquer.

Assim, para coordenadas cartesianas, a conservação de massa é dada pela equação 2.01.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_x \frac{\partial C}{\partial x} + V_y \frac{\partial C}{\partial y} + V_z \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \dot{g} \quad (2.01)$$

Seguindo os procedimentos clássicos, Schulz (2006), substitui-se a concentração C e velocidades V_i da expressão 2.01 pelas suas componentes média e oscilatória, apresentando como expressão final para a conservação de massa em regime turbulento em coordenadas cartesianas i quaisquer, a equação 2.02.

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{V}_i \frac{\partial \bar{C}}{\partial i} = \frac{\partial}{\partial i} \left(D_i \frac{\partial \bar{C}}{\partial i} - \overline{v_i c} \right) + \bar{g} \quad (2.02)$$

Como a análise inicial proposta será unidimensional em z e ao considerar que não haja geração ou consumo do composto, nem velocidade preferencial ao longo de z , pode-se simplificar a equação para:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \overline{v_z c} \right) \quad (2.03)$$

Nota-se que esta é uma equação estatística, uma vez que trata de grandezas médias. Esta equação envolve duas incógnitas: a concentração média e o fluxo de massa turbulento, este último representado pelo produto das flutuações de massa e velocidade. Portanto, para fechar o problema, mais uma equação é necessária. Schulz et al. (2011a) desenvolveram sua análise considerando os balanços de momentos centrais de diferentes ordens, de modo a gerar pelo menos mais uma equação envolvendo as mesmas incógnitas. A equação fornecida é

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \overline{c^\theta}}{\partial t} + \frac{\overline{c^{\theta-1}}}{c^{\theta-1}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\overline{v_z c^{\theta-1}}}{v_z c^{\theta-1}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \overline{v_z c^\theta}}{\partial z} = D \left(\frac{\overline{c^{\theta-1}}}{c^{\theta-1}} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \overline{c^{\theta-1}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (2.04)$$

Onde θ é a ordem do balanço. Por exemplo, uma análise inicial do problema será feita com o balanço de segunda ordem, então para $\theta = 2$, tem-se que:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \overline{c^2}}{\partial t} + \frac{\overline{v_z c}}{v_z c} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{v_z c^2}}{\partial z} = D \left(c \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (2.05)$$

Nota-se que ao considerar $\theta = 1$ produz-se a equação (2.03).

2.2 Considerações Iniciais

Os desenvolvimentos aqui apresentados têm por base aqueles definidos em Schulz e Janzen (2009) e Schulz et al. (2011a). Ao observar a transferência de massa a partir de uma interface para o seio do líquido e ao longo de um eixo z , podem-se representar as oscilações de acordo com a Figura 2-1.

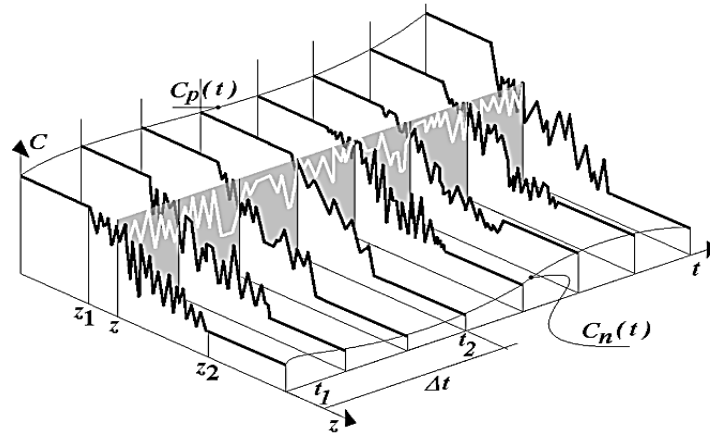


Figura 2-1: concentração em função de z e do tempo. (SCHULZ ET AL., 2011a)

Isso mostra que as oscilações são, no mínimo, bidimensionais (z e t) e que ao longo de z elas ocorrem preferencialmente em uma determinada faixa, entre z_1 e z_2 . Essas oscilações variam entre uma concentração anterior e outra posterior, C_p e C_n , respectivamente. É considerado também um regime estacionário, onde não haverá variações cinéticas ao longo do tempo, sendo ressaltado, no entanto, que a concentração varia ao longo desta dimensão (conforme pode ser visualizado na Figura 2-1).

É de conhecimento que o fluxo de massa é determinado pelo gradiente de concentração, que depende de cada situação. Por exemplo, se estiver sendo analisado um corpo de água com altas concentrações de amônia, o fluxo de massa ocorre de dentro do líquido para fora. Se for considerado o mecanismo natural de reoxigenação, o fluxo de massa ocorre no sentido contrário.

No entanto, nota-se que o esquema da Figura 2-1 é geral, sendo, portanto, aplicado a ambos os processos, só alterando o posicionamento do sentido de z no referencial do problema.

Vale ressaltar, entretanto, que ao longo do tempo as concentrações C_p e C_n podem apresentar uma variação significativa, de forma que, em sistemas sem outras fontes ou sumidouros, as concentrações tendem a se igualar.

Em uma seção qualquer de z , a média temporal das oscilações é assim definida:

$$\bar{C}_z = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} C_{z,t} dt \quad (2.06)$$

Essa definição pode ser aplicada igualmente para o balanço dos momentos centrais. Já outra consideração, essencial para o desenvolvimento do modelo, engloba a questão de simplificar a representação das oscilações. Assim, optou-se pela utilização de ondas quadradas aleatórias, o que é esquematizado na Figura 2-2.

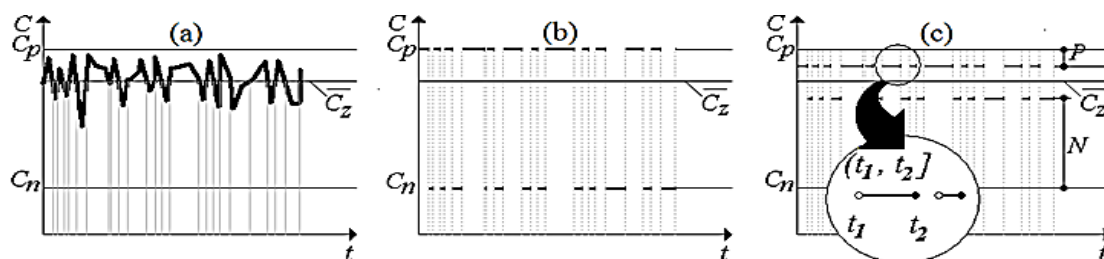


Figura 2-2: comportamento da concentração e sua simplificação ao longo do tempo para uma seção z . (SCHULZ ET AL., 2011a)

No modelo da onda quadrada aleatória, as oscilações variam entre um valor e outro de maneira instantânea. Portanto, as ondas servem para simplificar e quantificar parâmetros, quantificações estas que posteriormente devem ser corrigidas. De acordo com as ondas quadradas aqui adotadas, as oscilações são representadas de forma bimodal, como mostram as Figuras 2-2 (b) e (c), onde se observam os intervalos de tempo com oscilações acima e abaixo da média.

A Figura 2-2 mostra também $\overline{C_z}$, que representa a média das concentrações observadas. A simplificação básica desta aproximação é considerar que as quantificações associadas ao fenômeno oscilatório original podem ser obtidas a partir de quantificações obtidas de uma onda quadrada aleatória acrescida de coeficientes de correção. Adiante (item 2.3) será mais discutida a questão da faixa de oscilação, bem como os coeficientes paramétricos adotados.

A faixa de oscilação real é menor do que o salto entre C_p e C_n , de modo que se impõe uma redução ou o incremento desse salto utilizando as variáveis P e N , respectivamente, que distanciam os valores observados do máximo e mínimo em qualquer z . Como as oscilações variam em z , P e N também são variáveis em função de z . Assim, a concentração limite superior e inferior em um determinado z pode ser expressa por $C_p - P$ e $C_n + N$, respectivamente, conforme apresentado na Figura 2-2 (c).

2.3 Funções Paramétricas

A parametrização é provavelmente um dos caminhos mais difíceis de seguir. Na verdade ela representa a essência da metodologia, pois é com ela que o mesmo pode ser gerado. Ao longo dos anos, vários estudiosos de turbulência têm buscado um sistema de coeficientes paramétricos eficazes para representar de maneira robusta um escoamento turbulento, como o já mencionado exemplo do modelo κ - ε .

O presente trabalho baseia-se, portanto, em um conjunto de funções paramétricas adotadas desde o início da análise do problema (abordagem *a priori*), sendo destacadas:

2.3.1 Função de Partição

A função de partição é uma ponderação adotada para exprimir as parcelas de tempo em que as oscilações estão com valores máximos ou mínimos na abordagem de onda quadrada aleatória para os valores extremos.

A ponderação mencionada gera uma função n , que representa o tempo no qual a concentração é maior que a média, assim:

$$n = \frac{\Delta t_{C_p - P}}{\Delta t_{total}} \quad (2.07)$$

Portanto, para as ondas quadradas bimodais, quando a concentração não for $C_p - P$, ela será $C_n + N$, o que pode ser representado, utilizando a função de partição, por:

$$1 - n = \frac{\Delta t_{C_n + N}}{\Delta t_{total}} \quad (2.08)$$

Sendo a média das oscilações nula, então a soma das áreas das oscilações superiores e inferiores são iguais, portanto:

$$N \cdot \Delta t_{C_n + N} = P \cdot \Delta t_{C_p - P} \quad (2.09)$$

Conseqüentemente, dividindo-se ambas as parcelas pelo tempo total observado, tem-se a seguinte relação entre P e N :

$$N = \frac{Pn}{1 - n} \quad (2.10)$$

Assim, para obter valores médios decorrentes de oscilações quadradas bimodais, a função de partição é utilizada para qualquer variável. Considerando a concentração média, por exemplo, tem-se que:

$$\overline{C_z} = nC_p + (1 - n)C_n \quad (2.11)$$

Esta relação é importante, porque resume a forma de obter qualquer grandeza média com o presente procedimento em relação a uma ponderação temporal. Exemplos são a velocidade e a temperatura, dentre outras.

Partindo da equação 2.11 obtém-se a relação para n :

$$n = \frac{\overline{C_z} - C_n}{C_p - C_n} \quad (2.12)$$

Nota-se que n passa a ser o perfil adimensionalizado da concentração. Em outros termos, o perfil da função de partição é exatamente o perfil médio da variável em estudo.

Ao analisar o comportamento de n ao longo de z , vale observar que o sentido do eixo é concordante com o fluxo de massa (vide figura 2-1), assim o valor de n varia entre aproximadamente igual a 0 (ao fim da camada de transferência, z_2) e 1,0 (no início da referida camada, z_1). Se, por exemplo, $e = z_2 - z_1$ e $z^* = (z - z_1)/e$, então se $z^* = 0 \Rightarrow n = 1,0$, e se $z^* = 1,0$, $n \cong 0$.

2.3.2 Função de Redução

A função de redução, designado por α , representa a parcela da amplitude máxima de oscilação que é referente à variável P . Assim, pode-se afirmar que:

$$P = \alpha_c(C_p - \overline{C_z}) \quad (2.13)$$

Onde α_c é a função de redução de concentração, que define uma dependência entre P e $(C_p - \overline{C_z})$, sendo, portanto, também uma função de z . Ao substituir a expressão 2.11 na 2.13, obtém-se a relação da expressão 2.14.

$$P = \alpha_c(1 - n)(C_p - C_n) \quad (2.14)$$

De forma análoga, pode-se determinar uma relação semelhante para o N , na qual:

$$N = \alpha_c n(C_p - C_n) \quad (2.15)$$

Apesar de a análise considerada ser unidimensional, é importante se ter a noção de que o processo turbulento se desenvolve tridimensionalmente. No entanto, para a ilustração do comportamento das camadas de transferência, buscar-se-á uma análise mais didática.

No entendimento do comportamento da função de redução, α_c , observa-se o seguinte perfil proposto na Figura 2-3. Nela, tem-se o eixo z no início da camada de transferência e toma-se uma seção em um Z' qualquer.

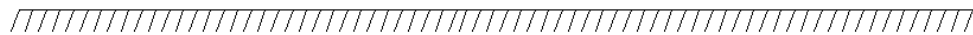
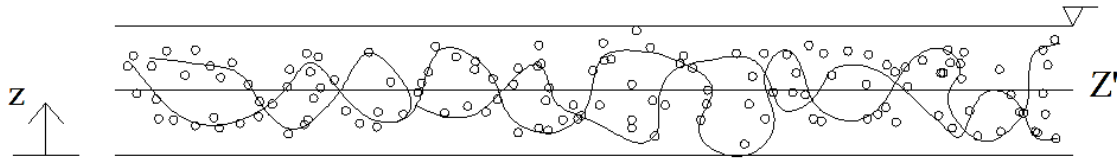


Figura 2-3: camada limite de transferência no meio em análise

Portanto, haverá uma concentração média $\overline{C_{Z'}}$, referente a este Z' . Por consequência haverá certa oscilação em torno deste $\overline{C_{Z'}}$ e, assim, haverá um P e um α_c correspondentes a esse Z' .

De uma observação da expressão 2.13, quanto maior for o α_c , maior será o valor de P e, analisando a Figura 2-2, as amplitudes de oscilações tendem a se reduzir. Se as amplitudes de oscilações reduzem é coerente afirmar que o efeito da turbulência será menor, isto porque a concentração passa a ser mais “estável”. Em resumo:

$$\uparrow \alpha_c \Rightarrow \uparrow P \Rightarrow \downarrow \text{Oscilações} \Rightarrow \downarrow \text{Efeito da Turbulência}$$

Para poder entender melhor tal relação, observa-se a Figura 2-2 (c). Com o aumento da função de redução, o valor de P (conforme destacado pela relação 2.13) também irá aumentar até que ele atinja seu valor máximo. Desta forma, à medida que P se aproxima de $(C_p - \overline{C_z})$, a faixa de amplitude de oscilações diminui de forma a tender a zero.

Isso ocorrerá nos extremos da camada limite de transferência, indicando que α_c atinge o seu valor máximo (1,0) e que a transferência é exclusivamente difusiva. Nessa situação, o $\overline{C_z}$ tende a permanecer praticamente constante ou a C_p ou a C_n , a depender do n em questão, já que o mesmo determinará a posição dentro da camada.

Resumidamente, se z^* (z/e) for próximo de zero, n será próximo de 1,0 e, para o valor máximo de α_c , $\overline{C_z} \cong C_p$. Em contrapartida, se z^* é próximo de 1,0, n será assintoticamente igual a zero e $\overline{C_z} \cong C_n$.

No entanto pode ocorrer uma situação inversa: se o α_c diminuir, isso indica que o P também reduzirá, assim as amplitudes de oscilações crescem, o que caracteriza uma maior influência do efeito de turbulência. Portanto:

$$\downarrow \alpha_c \Rightarrow \downarrow P \Rightarrow \uparrow \text{Oscilações} \Rightarrow \uparrow \text{Efeito da Turbulência}$$

Para este caso o $\overline{C_z}$ irá tender a uma amplitude de oscilação máxima, onde seu valor irá variar entre o C_p e o C_n , alternadamente. Aqui o α_c tem o seu valor mínimo e ocorre no interior da camada limite.

Na teoria este valor seria zero, o que caracterizaria uma transferência exclusivamente turbulenta, mas na prática isso é impossível, porque os efeitos difusivos estão sempre presentes. Com isso, pode-se dizer que a função de redução irá tender a um valor próximo a zero, que dependerá do tamanho da influência difusiva no meio.

Portanto, pode-se descrever o perfil da camada limite de transferência, dividindo-a em duas: uma cujos efeitos difusivos são mais significativos e outra cujos efeitos turbulentos são preponderantes. Se o α_c tende a 1,0 nas extremidades, então a camada difusiva ganha força nas extremidades da camada limite, enquanto que a camada limite turbulenta passaria a ocupar a parte central da camada.

Fica claro, assim, que haverá teoricamente quatro faixas que “compõe” a camada limite, duas difusivas e duas turbulentas conforme destacado na Figura 2-4. A divisão das camadas limites turbulentas é o ponto onde o α_c é mais próximo a zero.

Vale ressaltar que os termos afastadas e próximas são em referência a superfície e que a camada limite difusiva afastada é usualmente incluída no próprio seio, no entanto foi dado destaque aqui para se poder melhor visualizar a divisão das camadas.

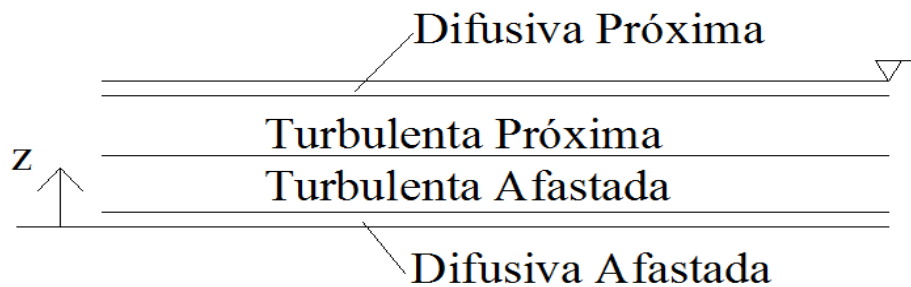


Figura 2-4: perfil da camada limite de transferência.

Vale destacar, contudo, que a função de partição e a função de redução são independentes entre si, já que representam características distintas. Resumidamente, a primeira é uma ponderação em relação ao tempo, enquanto que a segunda em relação à concentração, tendo em comum a dependência em relação às variáveis espaciais.

2.3.3 Superposição e Correlação entre Velocidade e Concentração

A função de superposição é conceitualmente simples de ser entendida. Em um escoamento, no qual esteja havendo transferência de massa na direção de um determinado eixo, haverá uma relação entre a velocidade e a concentração, ou seja, uma sobreposição total ou parcial, que deve ser considerada para a análise de conservação de massa, por exemplo.

Como o problema aqui tratado é inicialmente unidimensional, apenas há velocidade em z e como as flutuações de concentração dependem do campo de velocidades, o conhecimento de sua interação é relevante no entendimento da transferência de massa.

Como forma ilustrativa, destinada ao esclarecimento, apresenta-se a Figura 2-5. Podem ocorrer dois cenários extremos: as oscilações serem perfeitamente superpostas (a) e serem totalmente opostas (b).

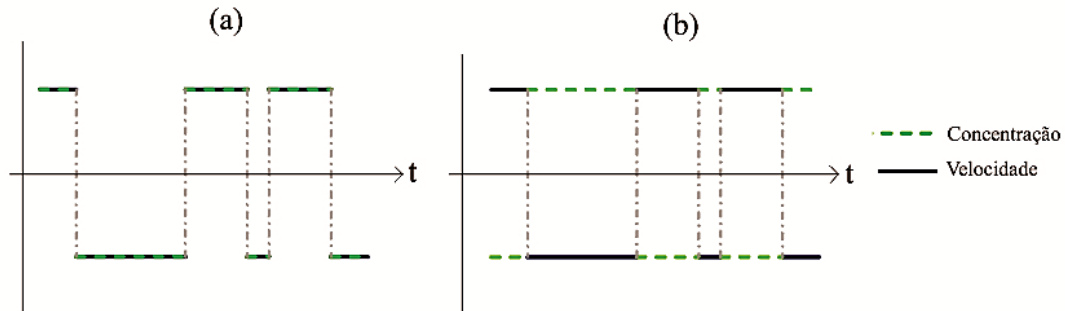


Figura 2-5: superposições extremas entre concentração e velocidade.

Nesse caso, representando a superposição por uma função β e as funções de partição da velocidade e da concentração por m e n , respectivamente, observa-se a Figura 2-6.

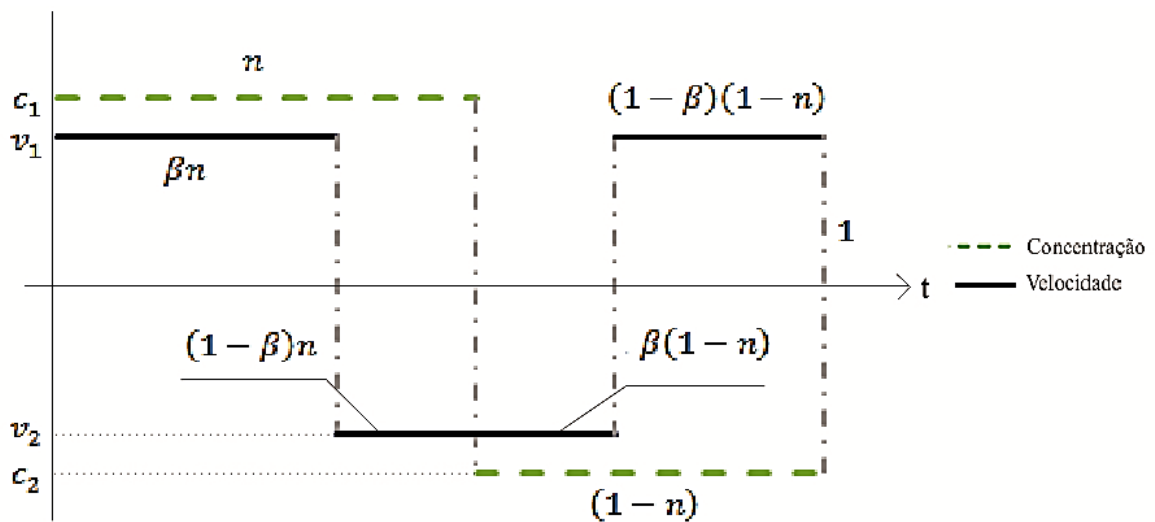


Figura 2-6: análise de m a partir de β e n .

Dela, pode-se obter a equação 2.16, relacionando as três funções que serão utilizadas no processo de parametrização.

$$m = 1 - (\beta + n - 2\beta n) \quad (2.16)$$

Torna-se também essencial descrever, através de uma relação, a grandeza principal em estudo (a concentração) e a velocidade. Tradicionalmente, o coeficiente de correlação é utilizado para caracterizar esta relação, sendo definido como:

$$\bar{r}_z = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} r_{z,t} dt \quad (2.17)$$

Onde o integrando é dado por:

$$r_{z,t} = \frac{v_z c}{\sqrt{\overline{v_z^2}} \sqrt{\overline{c^2}}} \quad (2.18)$$

Uma característica do coeficiente de correlação é que, fisicamente, ele representa o fluxo de massa turbulento normalizado com os valores RMS da velocidade e da concentração. Ao usar ondas quadradas aleatórias, é simples quantificar a sobreposição com base nas funções de partição para a concentração e para a velocidade, conforme anteriormente apresentadas.

Conseqüentemente, para reforçar a validade da relação da expressão 2.16 na representação da superposição, se a correlação for perfeita conforme proposto na Figura 2-5 (a), tem-se que: $\bar{r}_z = 1$; $\beta = 1$; $m = n$. E caso elas sejam totalmente opostas, Figura 2-5 (b): $\bar{r}_z = 0$; $\beta = 0$; $m = 1 - n$.

2.4 Processo de Parametrização

Com base nas equações escolhidas para formar o sistema, pode-se, então, transformá-las de forma a se tornarem funções dos parâmetros adotados (n , α_c e β). Além destes parâmetros, que são ligados mais diretamente à concentração, ainda é necessária uma variável que represente a escala de velocidade que caracteriza o escoamento, afinal, a massa é transportada pelo movimento turbulento. A escala de velocidade é o valor RMS da velocidade ($\sqrt{\overline{v_z^2}}$), conforme destacado por Schulz et al. (2011a).

Vale observar que os parâmetros mencionados são funções da distância e, com isso, todo o sistema gira em torno da mesma variável (z). Outra observação importante sobre o processo de parametrização seguido é que cada termo dela possibilita que os demais

das equações originais sejam trabalhados separadamente, deste modo se possibilita trabalhar com os termos de maneira isolada para apenas posteriormente uni-los na equação de origem. Com isso, podem ser avaliadas as derivadas, fluxos e produtos de oscilações de maneira separada para serem concatenados posteriormente nas equações governantes.

2.4.1 Flutuações de Concentração e Velocidade

A metodologia seguida considera as oscilações de concentração, onde:

$$c_1 = (C_p - P - \bar{C}) \quad (2.19)$$

Substituindo os termos pelas suas respectivas equações parametrizadas:

$$c_1 = (1 - n)(C_p - C_n)(1 - \alpha_c) \quad (2.20)$$

De maneira análoga:

$$c_2 = (C_n + N - \bar{C}) = -n(C_p - C_n)(1 - \alpha_c) \quad (2.21)$$

Onde c_1 e c_2 representam as oscilações de concentração positiva e negativa, respectivamente, em relação à média para uma determinada posição z . Note-se que a concentração média, conforme indicado na figura 2-1, oscila entre os dois valores extremos situados no início e no fim da camada limite de transferência.

Ao se aplicar para a velocidade o mesmo raciocínio já aplicado para a concentração, seria preciso haver dois valores distintos de velocidade (em z , porque o problema é unidimensional) nas fronteiras da camada-limite. Entretanto, isso implicaria em um problema de conservação de massa, pois ou haveria mais fluido chegando à região, ou haveria mais fluido saindo dela. Assim, o que se necessita, para a velocidade, é considerar uma escala que seja realística com o problema unidimensional proposto. Esta escala já é utilizada classicamente em turbulência, através do valor RMS da velocidade (intensidade turbulenta), conforme destacado anteriormente.

Assim, para um determinado z qualquer, a oscilação pode ser escrita com base em uma ponderação temporal com relação as suas oscilações positivas e negativas em relação à

média, de forma que ao se usar a função de partição, conforme demonstrado no Apêndice I, obtém-se:

$$\overline{c^\phi} = n \cdot c_1^\phi + (1 - n) \cdot c_2^\phi \quad (2.22)$$

Onde ϕ é um expoente qualquer. O que permite encontrar, após substituir as expressões 2.20 e 2.21 em 2.22, a relação 2.23:

$$\overline{c^\phi} = n(1 - n)(C_p - C_n)^\phi (1 - \alpha_c)^\phi [(1 - n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \quad (2.23)$$

Esta expressão é de suma importância para a parametrização de termos com base nas oscilações de concentração, como as derivadas das oscilações e o produto de uma oscilação pela derivada da mesma por exemplo.

Já na Figura 2-7, observa-se que as flutuações de velocidade devido à conservação de massa, que se anulam ao calcular o seu valor médio. Ou seja, as áreas que representam o produto entre o valor da flutuação e o tempo de atuação desta são iguais acima e abaixo do eixo do tempo.

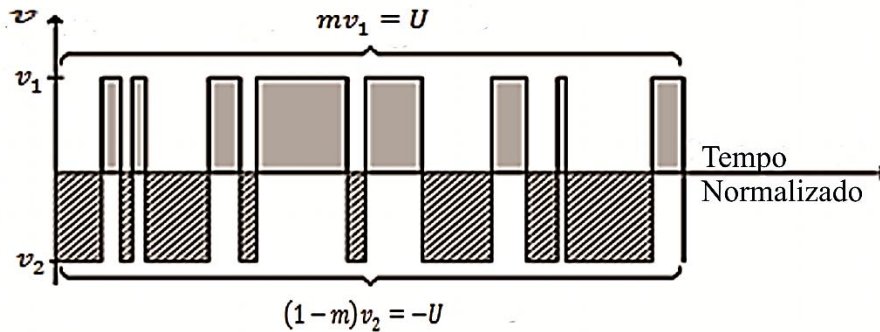


Figura 2-7: oscilações da velocidade. (SCHULZ ET AL., 2011b)

Na figura é, portanto, definida uma escala de velocidade U . Ela pode ser representada pelas expressões seguintes.

$$mv_1 = U = (m - 1)v_2 \quad (2.24)$$

Lembra-se, entretanto, que v_2 é um valor negativo e, assim, U é sempre positivo. Ao aplicar as expressões 2.16 e 2.24, partindo da expressão da velocidade baseada no Apêndice I, obtém-se, conforme proposto no Apêndice II:

$$v_1 = \sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \quad (2.25)$$

$$v_2 = -\sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \quad (2.26)$$

2.4.2 Fluxos de Massa Turbulentos

O fluxo de massa turbulento é definido como a média do produto entre as oscilações de velocidade e de concentração, \overline{vc} . De acordo com estudos realizados por Janzen (2006, apud SCHULZ ET AL., 2011b), o fluxo de massa turbulento é relevante na maioria das situações práticas, sendo de extrema importância quantificar essa grandeza, e, portanto, a mesma foi parametrizada seguindo os procedimentos sugeridos para ondas quadradas aleatórias.

Como explicado no item 2.3.3, uma das formas de se representar essa grandeza em termos adimensionais foi descrita pela equação 2.18, onde o módulo de r (coeficiente de correlação) varia entre 0 e 1. Para obter r a partir das ondas quadradas aleatórias utilizam-se as duas oscilações da concentração e as duas oscilações da velocidade, as quais podem estar parcialmente superpostas, o que é quantificado com β , além do fluxo de massa turbulento de expoente unitário para a concentração.

Esse fluxo de massa, por sua vez, pode ser quantificado através das combinações possíveis dos produtos entre as oscilações de concentração e de velocidade. A oscilação c_1 é ponderada com n , enquanto que c_2 é ponderada com $(1 - n)$, já que a função de partição está relacionada diretamente com a parcela positiva em relação a concentração média.

Quando analisadas as superposições das duas grandezas, c_1 e v_1 estão em situação de oscilação coincidente, bem como c_2 e v_2 , sendo assim relacionadas por β . No entanto, com oscilações opostas, c_1 e v_2 ou c_2 e v_1 , a superposição será indicada por $(1 - \beta)$. Com isso, pode-se escrever a expressão 2.27:

$$\overline{vc} = v_1[c_1 n \beta + c_2 (1 - n)(1 - \beta)] + v_2[c_1 n (1 - \beta) + c_2 (1 - n) \beta] \quad (2.27)$$

De acordo com o proposto no Apêndice III, tem-se a expressão 2.27 transformada na equação 2.28:

$$\overline{vc} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)\sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}} \quad (2.28)$$

E de maneira geral, obtém-se a equação 2.29, que abrange uma gama de aplicações maior, partindo de uma expressão geral de forma semelhante a 2.27:

$$\overline{vc^\phi} = v_1 [c_1^\phi n\beta + c_2^\phi (1-n)(1-\beta)] + v_2 [c_1^\phi n(1-\beta) + c_2^\phi (1-n)\beta] \quad (2.29)$$

De maneira análoga a aplicada à equação 2.28, no Apêndice III, destaca-se a obtenção da equação geral para fluxo de massa turbulento. Na equação 2.30, por exemplo, evidencia-se o fluxo de massa turbulento para um expoente $\phi = 2$, assim:

$$\overline{vc^2} = \frac{n(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2\sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}} \quad (2.30)$$

Para a análise de expoentes de concentração diferentes de 1, que ocorrem quando são trabalhados os momentos dos balanços centrais de ordens superiores a 2, devem ser utilizadas as equações geradas a partir da geral proposta no Apêndice III.

2.4.3 Derivadas

Na equação 2.04, para o balanço dos momentos centrais, podem ser observadas algumas derivadas parciais, que devem ser representadas de forma parametrizada, em congruência com as outras parcelas já apresentadas.

Desta maneira, a derivada de qualquer ordem da concentração média é dada pela expressão 2.31, onde O é a ordem da derivada (Apêndice IV).

$$\frac{\partial^O \overline{C}}{\partial z^O} = (C_p - C_n) \frac{\partial^O n}{\partial z^O} \quad (2.31)$$

Já a derivada parcial temporal é descrita por diversos autores de forma empírica baseada na lei análoga à lei de resfriamento de Newton, que sugere que a taxa de variação temporal é proporcional ao déficit de concentração média. Na realidade, há uma conotação química inerente, que se baseia em uma reação de primeira ordem, a qual é obtida a partir da Lei da Ação das Massas com relação ao $(C_p - C_n)$. Assim, tem-se que:

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = K(C_p - C_n) \quad (2.32)$$

O coeficiente K pode ser apelidado, no presente contexto, de coeficiente de “crescimento”, já que ele representa o crescimento da concentração C_n ao longo do tempo. Já a variação temporal do C_p foi desprezada, já que a concentração da “fonte de massa” permaneceria com o seu valor inalterado.

Conforme descrito no Apêndice IV e V, as derivadas parciais temporais para a concentração média e media das oscilações a um expoente qualquer são representadas pelas equações 2.33 e 2.34.

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = K(1 - n)(C_p - C_n) \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial \bar{c}^\phi}{\partial t} = -Kn\phi(1 - n)(1 - \alpha_c)^\phi [(1 - n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] (C_p - C_n)^\phi \quad (2.34)$$

No Apêndice V também está descrito o procedimento para alcançar a derivada da média de uma flutuação exponencial em relação à z . Esta equação é de suma importância para a dedução proposta no Apêndice VI, cujo equacionamento é comentado no item seguinte.

2.4.4 Produtos entre Flutuações e Derivadas

Para representar este produto, tomar-se-á como base o mesmo princípio aplicado para o fluxo de massa turbulento e, assim, aplica-se uma ponderação temporal (fazendo uso da função de partição) para a parametrização do produto entre flutuações e derivadas, de modo que:

$$\overline{c^{\phi_1} \frac{\partial^O c^{\phi_2}}{\partial z^O}} = n c_1^{\phi_1} \frac{\partial^O c_1^{\phi_2}}{\partial z^O} + (1-n) c_2^{\phi_1} \frac{\partial^O c_2^{\phi_2}}{\partial z^O} \quad (2.35)$$

Para entender, basta lembrar a relação da equação 2.22, assim o n estaria relacionado com c_1 a um expoente ϕ_1 e o mesmo com um expoente distinto ϕ_2 , sendo derivado a uma ordem O qualquer. E o mesmo para a oscilação de concentração inferior c_2 .

Desta forma, conforme especificado no Apêndice VI, a expressão geral pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} \overline{c^{\phi_1} \frac{\partial^O c^{\phi_2}}{\partial z^O}} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^{\phi_1} (C_p \\ &\quad - C_n)^{(\phi_1+\phi_2)} \left[(1-n)^{\phi_1-1} \frac{\partial^O (1-n)^{\phi_2} (1-\alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} \right. \\ &\quad \left. + (-n)^{\phi_1-1} \frac{\partial^O (-n)^{\phi_2} (1-\alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} \right] \end{aligned} \quad (2.36)$$

2.5 Simulação

A simulação aqui abordada consiste em verificar o comportamento do modelo para uma situação específica de modo a analisá-lo com base em dados obtidos e outras simulações realizadas.

Existe atualmente uma gama de métodos numéricos que são aplicados a uma vasta gama de problemas de simulação. Isso sugere que exista ao menos uma maneira de se tentar resolver o problema de simulação para os modelos gerados através da parametrização do escoamento turbulento unidimensional.

Em uma primeira proposta, segundo proposto por Schulz et al. (2011a), utilizou-se o método de Runge-Kutta para simular o modelo e o método Quase-Newton como otimizador de um de seus coeficientes, o que gerou uma avaliação de comportamento da função de partição, n , em função de uma profundidade relativa, y .

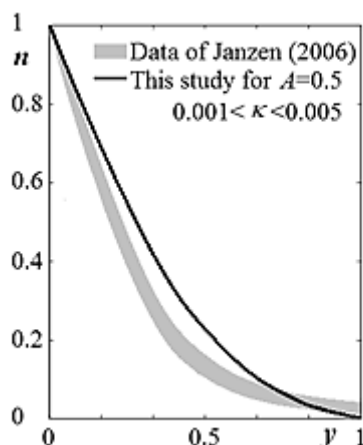


Figura 2-8: simulação do comportamento de n em função de y .

(SCHULZ ET AL., 2011a)

Esta primeira previsão, apesar de ter apresentado resultados animadores (considerando a tendência geral da Figura 2-8), considerava uma parcela no seu equacionamento final que se mostrou inadequada, seguindo as bases do modelo de ondas quadradas, como foi destacado por Schulz et al. (2011b).

A simulação a ser realizada no presente trabalho, bem como nos trabalhos já citados, é feita com uma equação reduzida, onde a função de redução (α_c) é dita constante em relação a z . Desta forma, admite-se um α_c predominante, ou seja, um valor constante para α_c que representa o escoamento de maneira significativa em uma situação específica, de modo a diminuir a complexidade do modelo, possibilitando uma simulação mais simples.

Apesar de fisicamente improvável, uma situação com α_c constante pode ser utilizada para gerar o comportamento da função de partição (n) em uma situação onde um determinado valor de α_c é significativo.

Como será discutido mais adiante, para se obter uma estimativa mais precisa do escoamento, sabe-se que seria preciso observar também o comportamento do coeficiente de redução em conjunto com o de partição. Entretanto, para tal simulação, seriam necessárias mais três condições de contorno ligadas ao coeficiente de redução, baseadas em dados iniciais observados (bem como foi feito para o coeficiente de partição).

No presente trabalho também é utilizado o método de Runge-Kutta, como será descrito mais adiante (2.1.5), e são feitas tentativas com um método das Diferenças Finitas, por

ser um método mais simples e de ampla aceitação, para testar a possibilidade de também ser usado para este tipo de simulação.

Ressalta-se, entretanto, que foram observadas algumas limitações quanto ao uso do método das Diferenças Finitas, ligadas às condições de contorno. O método em si não será alvo de discussão do presente trabalho, tendo destaque nos itens subsequentes apenas o procedimento utilizado para as simulações finais. Contudo, serão destacadas algumas observações sobre as tentativas nos comentários finais (3.1.3).

A verificação da simulação, assim, é bem definida já que partirá das análises propostas por Schulz e Janzen (2009). As comparações serão semelhantes às propostas por Schulz et al. (2011a, b), dando ênfase as representações físicas e detalhamento aos outros coeficientes.

2.5.1 Método de Runge-Kutta

Existem diversos métodos que poderiam ser utilizados para gerar a simulação do comportamento de n . A diferença entre os métodos estaria, sobretudo, na complexidade de aplicá-los ao problema, o erro envolvido e o custo computacional inerente.

Apesar de existirem maneiras mais simples de discretizar a equação, por exemplo, ao utilizar o já mencionado método das Diferenças Finitas, opta-se no presente trabalho pela utilização do método de Runge-Kutta devido à ampla utilização pelo meio acadêmico, o que facilita a busca de informações mais detalhadas sobre o mesmo, e ao erro e custo computacional serem baixos em comparação a outros métodos.

O método de Runge-Kutta se baseia nas séries de Taylor de maneira a preservar os erros de ordens altas, mas sem necessitar determinar ou avaliar as derivadas parciais (FAIRES E BURDEN, 2002).

O método de Runge-Kutta consiste em utilizar a série de Taylor para buscar taxas de variação da função em análise em pontos próximos ao de interesse, o que garante ao método uma eficácia maior se comparada a de outros métodos. Esta eficácia elevada, por sua vez, permite a utilização de malhas mais grossas, diminuindo também o custo computacional envolvido.

De maneira ilustrativa, tem-se a Figura 2-9:

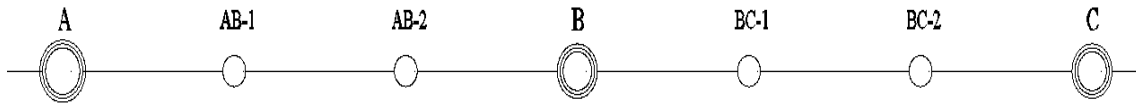


Figura 2-9: esquema espacial de pontos de auxílio para o método de Runge-Kutta.

Nesta figura, observa-se um esquema simplificado para o método. Os pontos A, B e C, serão analisados pelo problema. Desta forma, para avaliar, por exemplo, o ponto B, busca-se os pontos próximos a ele, no entanto, não necessariamente o ponto de apoio deve ser um ponto em análise. Podem-se ter, então, pontos intermediários entre os próprios pontos de análise (AB-1, AB-2, BC-1 e BC-2). Estes, por sua vez, são dispensados após a avaliação de B, participando apenas indiretamente da análise.

Com relação ao embasamento matemático do método, ele é bem simples conceitualmente. Ele parte de uma equação geral, a qual representa uma relação linear entre uma função y qualquer e uma variável x , tal que $y = g(x)$:

$$\psi = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Representando de outro modo:

$$y_{i+1} = y_i + \psi \cdot h \quad (2.37)$$

Onde i é a iteração atual, h é uma função que representa a variação de uma variável x qualquer. E ψ é uma função que pode ser definida como uma “taxa” de variação de y em relação à variação h .

São diversas as formas que os autores consagrados da área utilizam para representar a função ψ (e suas equivalentes, representadas por outras formas). Aqui, adaptou-se a apresentada por Chapra e Canale (2006), de maneira a deixar em uma forma didática e sistemática.

Deste modo, a função de variação pode ser representada por:

$$\psi = \sum_{j=0}^{0-1} a_j k_j \quad (2.38)$$

Na qual O é a ordem do método Runge-Kutta. Já a_j representa um coeficiente de ponderação para a função k_j que a função de variação específica que indica a taxa de variação de y em função de uma variação de x em um ponto próximo ao analisado.

A ordem do método, por sua vez, representa a que expoente o erro global do método está relacionado ao refinamento da malha, por exemplo. Assim, quanto maior a ordem do método, maior será a redução do erro global ao ser refinada a malha do problema (aumentado o número de pontos analisados).

Os coeficientes a_j são encontrados ao final, quando um sistema de equações deve ser solucionado e as funções k_j são definidas como:

$$\left\{ \begin{array}{l} k_0 = f(x_i, y_i) \\ k_1 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_0 h) \\ k_2 = f(x_i + p_2 h, y_i + q_{20} k_0 h + q_{21} k_1 h) \\ \vdots \\ k_{O-1} = f(x_i + p_{O-1} h, y_i + q_{(O-1)0} k_0 h + \dots + q_{(O-1)(O-2)} k_{O-2} h) \end{array} \right. \quad (2.39)$$

Observa-se que f é a função derivada de y_i , ou seja: y'_i . Nota-se que o que se faz é calcular cada parcela acrescida do produto entre a taxa de variação de y_i pela variação $\Delta x = h$. Nota-se também que a cada passo de k , os valores acrescidos de y recebem influência dos k s anteriores.

Encontrar a equação final parece ser complicado e, por vezes, realmente se exige certo trabalho algébrico. Primeiro, emprega-se as equações de 2.39 na série de Taylor, de modo a encontrar uma equação equivalente em função das derivadas e variações. Em seguida, utilizam-se as expressões encontradas na equação 2.37 e evidenciam-se as derivadas e variações.

De posse disso, compara-se com a série de Taylor original e daí resulta um sistema de equações ao tentar zerar as parcelas que multiplicam as variações de Δx . O sistema encontrado, no entanto, possui mais incógnitas do que equações e, por isso, é um sistema possível, mas indeterminado. Isso indica que há mais de uma solução para o mesmo sistema e, assim, diz-se que existe uma família de equações do método Runge-Kutta para cada ordem.

O presente trabalho não busca desenvolver tais equações, não por dificuldade, mas por praticidade. Desta forma, será utilizada uma equação amplamente difundida para o método de Runge-Kutta de terceira ordem adaptada de Chapra e Canale (2006):

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_0 + 4k_1 + k_2) \quad (2.40)$$

Onde:

$$\begin{cases} k_0 = f(x_i, y_i) \\ k_1 = f(x_i + 0,5h, y_i + 0,5k_0h) \\ k_2 = f(x_i + h, y_i - k_0h + 2k_1h) \end{cases} \quad (2.41)$$

2.5.2 Processo de Simulação

As equações adotadas para a simulação (2.40 e 2.41) são bem simples, já a forma de aplicá-las necessita certo cuidado. Para tanto, um procedimento metódico e simples pode ser usado.

Inicialmente é preciso entender que o método de Runge-Kutta calcula o valor subsequente de y a partir do anterior e da derivada composta do mesmo também no ponto anterior. Desta forma, para aplicá-lo ao presente trabalho, no qual a equação a ser simulada é uma equação diferencial parcial (EDP) de terceira ordem, deve-se fazer uso de alguns mecanismos:

- verifica-se que as derivadas da equação são totais e não parciais e, assim, o problema se resume a uma equação diferencial ordinária (EDO);
- às derivadas de primeira e segunda ordem são atribuídas funções a fim de facilitar a sistemática, já que a primeira derivada (y') vai ter seus valores computados da mesma forma que o y , mas com relação a segunda derivada, que por sua vez é computada em relação a terceira derivada;
- já a terceira derivada deve ser isolada e seus valores computados a partir da própria equação.

Este procedimento fica simples de ser aplicado de maneira sistemática em qualquer planilha de trabalho. No presente trabalho, por exemplo, fez-se uso do Microsoft Excel[®]

e algumas indicações de uso do método podem também ser encontradas em Schulz et al. (2011b).

Com o procedimento determinado, basta determinar o tamanho da malha de análise, quais serão as condições de contorno a serem empregadas e os valores dos outros parâmetros de entrada. Apesar de saber que a precisão do método de Runge-Kutta é boa, optou-se por uma malha fina de 1000 pontos, já que não dificulta em nada a simulação.

Em relação às condições de contorno, a análise é mais complexa. Nesse sentido, o presente estudo representa uma contribuição ao entendimento da influência das definições dos contornos na resolução do problema, o que pode ter repercussões no tratamento de problemas com mais dimensões. Supõe-se, de maneira a ilustrar, que se tenha uma variável dependente d em uma região R qualquer cuja região de fronteira é definida por δR . Assim, existem resumidamente três tipos de condição de contorno (ou condições de fronteira):

- Dirichlet: um valor específico de d é determinado na fronteira da região δR ;
- Neumann: também é especificado um valor de fronteira, mas na forma de um gradiente normal ou tangencial. Quando este gradiente é nulo, diz-se que a condição de fronteira é natural ou homogênea;
- Robin: já neste tipo de condição de contorno, há uma combinação linear dos dois primeiros tipos, de forma que a condição de contorno é representada por uma equação diferencial.

Obviamente, nem todos os problemas vão recair a um único tipo de condição de contorno e, com isso, ter-se-á uma condição de contorno mista. Para o presente trabalho, por exemplo, a condição de contorno “global” do problema será uma mista entre Dirichlet e Neumann.

Mas mesmo definindo o tipo de condição de contorno como mista, ainda resta dizer quantas serão determinadas por cada tipo, isto porque a equação final do modelo recai em uma equação diferencial parcial de terceira ordem e, desta forma, necessita de ao menos três condições de contorno individuais.

Diferentes estruturas de condições de contorno podem e foram testadas, mas para a aplicação do método de Runge-Kutta, utilizou-se, então, uma condição de Dirichlet ($n(z^* = 0)$) e duas tipo Neumann ($\partial n / \partial z^*(z^* = 0)$ e $\partial^2 n / \partial z^{*2}(z^* = 0)$).

Vale ressaltar que usualmente se atribui à condição do tipo Neumann apenas a primeira derivada da grandeza transportada, no entanto, no presente texto, será feito uso da mesma nomenclatura para a segunda derivada, relacionando-a também ao conceito de derivada do fluxo e não apenas ao de fluxo da grandeza propriamente dita, a fim de facilitar as discussões ao longo do trabalho.

Assim, essa segunda condição tipo Neumann entra de forma a satisfazer o que seria uma quarta condição de contorno do tipo Dirichlet ($n(z^* = 1)$), que na verdade entra como fator de análise da simulação. Isso porque o valor da segunda derivada deve ser estimado de forma que haverá uma simulação dentro da simulação principal, cuja condição de contorno para encontrar o valor é $n(z^* = 1)$.

O processo pode ser o mais diversificado, desde a utilização da ferramenta Solver do Microsoft Excel[®] ao utilizar a mesma planilha de cálculo ou semelhante a da simulação principal até ferramentas mais avançadas de programação envolvendo linguagens como o Matlab[®] ou simples iterações manuais, já que na prática ao definir a primeira derivada haverá um intervalo estreito de segundas derivadas que atendem a condição de análise.

A partir destes dados de entrada, fica simples visualizar a aplicação do método. Nas tabelas (a) e (b) do Apêndice IX pode ser observada a aplicação do método de Runge-Kutta de uma maneira geral.

Nas tabelas (a) do Apêndice IX, têm-se os parâmetros de entrada. Nas condições iniciais estão as três condições de contorno e o valor de h que indica o tamanho da malha. Já os valores de S e $A(1 - \alpha_c)$ são referentes a equação do modelo. Ainda é computado o valor de κ (kappa) para comparação com as aproximações de Schulz et al. (2011a, b).

Já nas tabelas (b) do mesmo apêndice constam os procedimentos de cálculo. Para uma iteração qualquer i , na qual haverá um valor de z^* correspondente, o cálculo dos valores correspondentes da linha ocorrerá de acordo com as expressões indicadas em cada célula. Nota-se em algumas células há três pontos verticais, que indicam que as células seguem o mesmo princípio da célula acima.

Como foi dito anteriormente, o valor de n dependerá dos valores de n' , os quais dependeram de n'' e que, por sua vez, são relacionados com os valores de n''' . Os valores das derivadas terceiras, k_0'' , k_1'' e k_2'' , são computados ao se isolar a equação do modelo de tal forma que é apresentada a equação no final do Apêndice IX.

2.6 Análise dos Resultados

A análise dos resultados consiste na observação do perfil gerado pelo modelo discretizado quando comparado aos dados dispostos por Janzen (2006). Apesar de ser baseada em um método simples, outros pontos devem ser observados a cerca dos resultados obtidos, como:

- Valor final de n , que não deve ultrapassar 0,01, no qual este valor representa a tolerância adotada para o valor da função de partição que, conceitualmente, tende ao zero;
- Possíveis valores negativos podem aparecer ao longo da simulação quando, ao depender dos valores iniciais, o modelo passa a ter um perfil “parabólico” perto do final, quando deve apresentar uma “curva assintótica”;
- Pode haver certa distinção com os dados propostos por Janzen (2006), desde que satisfeitas essas duas primeiras observações e ao observar semelhança no comportamento.

A análise parece simples, mas na verdade ela abrange uma série de problemas relacionados às condições de contorno inicialmente adotadas. A análise da primeira derivada a partir do comportamento inicial é de grande importância para a determinação do comportamento da função de partição representativa para uma concentração, mas é a segunda derivada inicial que irá restringir o comportamento assintótico final.

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

No presente item serão apresentados os resultados para o modelo proposto e, não menos importante, as discussões que foram conduzidas durante e após o término do mesmo. Como foi mencionado anteriormente, um processo de parametrização foi utilizado gerando um modelo na forma de uma equação dita, portanto, paramétrica.

Conforme pode ser verificado nos Apêndices do presente trabalho, a parametrização das equações básicas ocorreu em partes, nas quais cada termo da equação original foi parametrizado separadamente e, em seguida, juntaram-se todos os termos parametrizados para compor a equação (Apêndice VII).

Algumas simulações foram geradas para descrever o comportamento do modelo ao utilizar uma função de redução predominante conforme foi comentado em itens anteriores.

Os comentários finais a cerca da metodologia e resultados são, então, apresentados e, de forma a finalizar o item, fazem-se comentários a cerca de modelos equivalentes.

3.1 Modelo Proposto

O primeiro modelo será composto pelas expressões 2.03 e 2.05 apresentadas anteriormente. Nesta equação é considerado o balanço de segunda ordem, assim $\theta = 2$ na equação 2.04, conforme explanado no item correspondente.

Com isso, o sistema se resume ao seguinte:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \overline{v_z c} \right) \\ \frac{1}{2} \frac{\partial \bar{c}^2}{\partial t} + \overline{v_z c} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{v_z c^2}}{\partial z} = D \left(c \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \end{array} \right. \quad (3.01)$$

Essas são as duas equações básicas estatísticas para representar os fenômenos de transferência de massa turbulenta no presente trabalho.

3.1.1 Equação Global

A partir das equações 3.01, pode-se gerar uma equação global para o primeiro modelo ao ser aplicado o processo de parametrização por partes. No Apêndice VII foi realizado tal procedimento, tendo sido, portanto, encontrado as seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \right) = \left[\frac{D}{Ke^2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right] \quad (3.02)$$

$$\begin{aligned} -n(1-n)(1-\alpha_c)^2 + \frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\ + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \right) \\ = \frac{Dn(1-n)(1-\alpha_c)}{Ke^2} \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right] \end{aligned} \quad (3.03)$$

Após gerar as duas equações paramétricas de base, é feito uso de operações algébricas de forma a gerar apenas uma, eliminando termos em comum que poderiam vir a complicar a aplicação do modelo final.

São observados dois coeficientes adotados ao longo do Apêndice VII:

$$P_{base}^1 = \frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)\sqrt{\overline{v^2}}}{Ke \sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}} \quad (3.04)$$

$$S = \frac{D}{Ke^2} \quad (3.05)$$

O coeficiente expresso em 3.04 é apenas um coeficiente intermediário, criado para facilitar as passagens algébricas, não só diminuindo a apresentação dos termos envolvidos, como sendo isolado na segunda equação para ser utilizado na primeira, servindo como parâmetro de base. Já o segundo (3.05), só possui a função de reunir as constantes envolvidas de forma a deixar a apresentação mais simples e facilitar a entrada de dados no momento da simulação.

De posse destas equações, ficam mais claros os procedimentos que devem ser adotados para que destas duas equações resulte a equação final do modelo. Tais procedimentos estão claramente empregados no Apêndice VII, os quais resultam na equação 3.06.

$$\begin{aligned}
& \left\{ \left[2\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - (1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \left\{ 8S(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} [n(1-n) + 1] \right. \right. \\
& \quad + 8S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \\
& \quad + 2S(-1+10n-10n^2)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \\
& \quad - 8Sn(1-n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \left(\frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right)^2 - 4S(1-\alpha_c)^2(1-2n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& \quad - S(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} [4n(1-n)(1-\alpha_c) + (1-2n)] \\
& \quad - 2Sn(1-n)(1-2n) \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 \alpha_c}{\partial z^{*3}} - \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
& \quad + 2(1-2n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial n}{\partial z^*} - 4n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \\
& \quad + 2S(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + S(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& \quad \left. + (4n-3)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} - (1-n)(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right\} \\
& - \left[8Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 4Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
& - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + 2n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
& - S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& \left. + (1-n)(1-2n)(1-\alpha_c) \right] \left[2\alpha_c \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + 4 \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right. \\
& \left. - (1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
& = 4 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned} \tag{3.06}$$

Onde z^* é uma profundidade relativa.

A equação geral do modelo é complexa, mas isso já era esperado de uma equação que possa representar uma transferência de massa em escoamento turbulento.

3.1.2 Simulações

Para as simulações, conforme já foi destacado, é utilizada uma equação cuja função de redução é constante (α_c^p) e igual a um valor predominante a um determinado escoamento. Com isso, tem-se a equação 3.07, derivada da equação 3.06 (Apêndice VIII), que é uma equação diferencial parcial de terceira ordem.

$$\begin{aligned}
& -S(1 - \alpha_c^p)[4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \\
& + (1 - \alpha_c^p)[2(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) + (4n - 3)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \\
& + 2S(1 - \alpha_c^p)[1 - 2(1 - \alpha_c^p)(1 - 2n)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& + S(1 - \alpha_c^p)[(1 - 2n) + 4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p)] \left(\frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right)^2 \\
& - (1 - n)(1 - \alpha_c^p)[2n(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& = 2\alpha_c^p \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right]
\end{aligned} \tag{3.07}$$

Onde $z^* = z/e$, sendo e a espessura da camada turbulenta.

Assim, a partir da equação 3.07, podem ser geradas algumas simulações, iniciando com a tentativa de representar os dados adaptados de Janzen (2006) e ressaltados por Schulz e Janzen (2009), descritos como uma nuvem de pontos por Schulz et al. (2011a, b).

Os dados apresentam um parâmetro κ variando entre 0,001 e 0,005. Este parâmetro, na realidade, foi estipulado por Schulz e Janzen (2009) e equivale ao inverso do coeficiente S aqui apresentado, ou seja: $200 < S < 1000$.

Com relação às condições de contorno foram utilizadas três condições de contorno, dos tipos já mencionados no item 2.5.2, as quais podem ser visualizadas no Quadro 3-1 a seguir.

Quadro 3-1: condições de contorno para as primeiras simulações.

Tipo de Condição	Condição de Contorno
Dirichlet	$n_{(0)} = 1,00$
Neumann	$n'_{(0)} = \frac{\partial n}{\partial z^*} = -3,00$
Neumann	$n''_{(0)} = \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} = -3,04$

As condições de contorno iniciais dispostas nesse quadro foram obtidas a partir da nuvem de pontos provenientes dos dados de Janzen (2006).

Desta forma, pode-se apresentar a Figura 3-1, para um α_c predominante de 0,5 e um S médio do intervalo, 600.

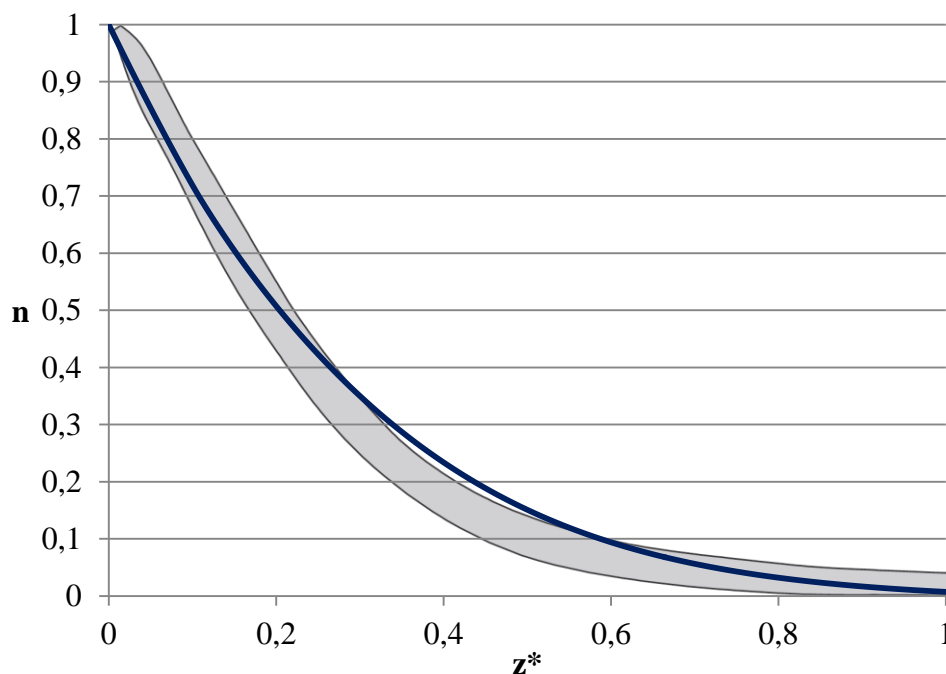


Figura 3-1: gráfico da simulação de n para $\alpha_c^p = 0,5$ e $S = 600$.

Pode-se observar que o comportamento da curva de simulação representa muito bem os dados observados, mesmo com as considerações e erros envolvidos, conforme foi comentado anteriormente.

O que se constatou durante as simulações foi que os valores S que representam os dados em questão não alteram de maneira representativa o comportamento da curva, se mantido o mesmo valor da função de redução predominante.

Isso não quer dizer que os valores da função de partição não se alteram com a mudança de S , mas apenas que n é pouco, ou muito pouco, sensível em relação ao S . Em alguns casos a amplitude de S chega a ser bem maior do que a apresentada como limite para os dados. Só ressaltando que os valores de S são limitados pela própria física do problema, já que depende da difusividade, espessura da camada limite e da constante de “crescimento” K .

O mesmo não se pode falar da mudança da função de redução predominante. Se o seu valor for alterado, por exemplo, para $\alpha_c^p = 0,6$, obtém-se, para o mesmo valor de S e as mesmas condições de contorno (Quadro 3-1), a curva descrita na Figura 3-2.

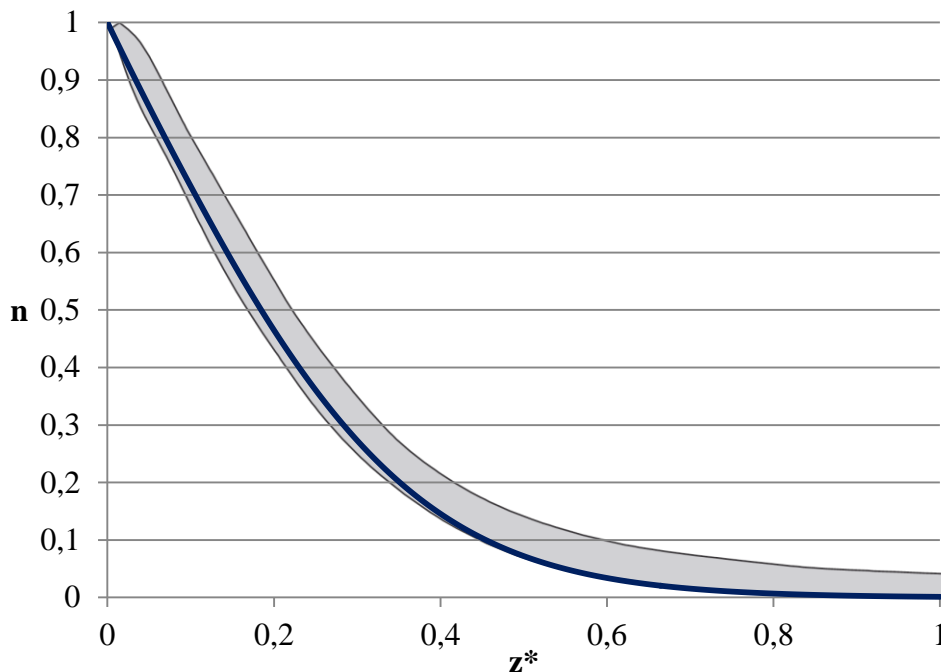


Figura 3-2: gráfico da simulação para de n para $\alpha_c^p = 0,6$ e $S = 600$.

Ao analisar a Figura 3-2, pode-se concluir que com o valor de $\alpha_c^p = 0,6$ a curva se aproxima ainda mais dos dados apresentados, mais precisamente de seu limite inferior,

o que representa mais uma confirmação da representatividade do modelo perante os dados.

Outro fator de suma importância no resultado a ser encontrado são as condições de contorno adotadas. A cada conjunto de condições será encontrada uma nova curva correspondente que pode representar o conjunto de dados, mesmo que a partir de uma função de redução predominante distinta.

No item 3.1.3 será feita uma discussão melhor a cerca da questão das condições de contorno. Mas para se ter uma boa ideia, na Figura 3-3 podem ser observadas algumas curvas a partir da variação do α_c^p , alterando-se apenas o valor da segunda derivada e mantendo as demais condições de contorno.

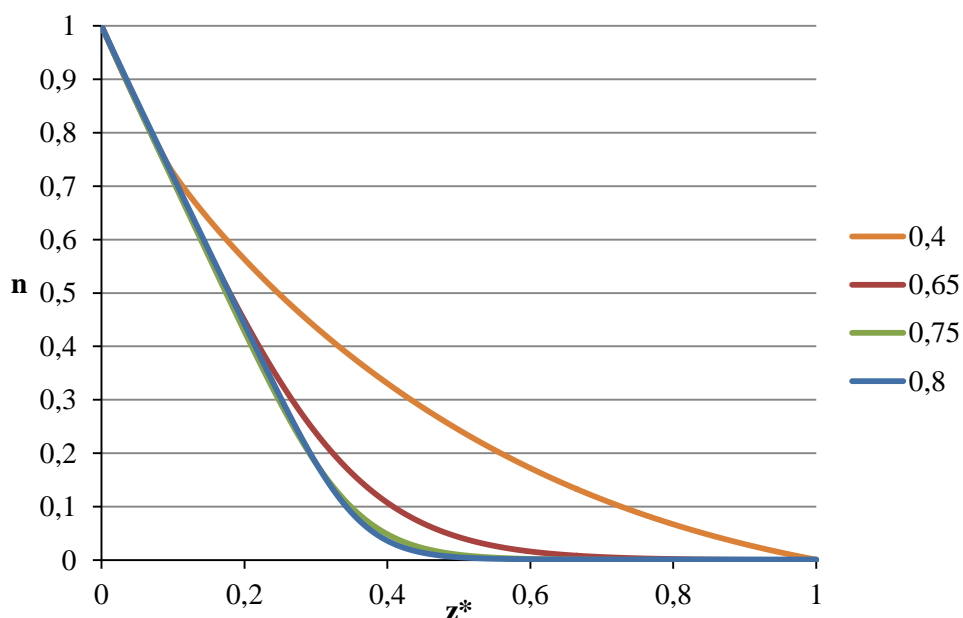


Figura 3-3: gráfico de simulação de n a partir de α_c^p predominante variável com mudança na segunda derivada como condição de contorno.

Várias observações podem ser feitas a partir desta figura, mas o que é mais importante é observar que há uma ampla faixa de α_c^p que podem representar um processo de transferência de massa, visto o comportamento das curvas.

Uma ressalva também deve ser feita quanto ao comportamento inicial das curvas que é praticamente idêntico, devido à condição de contorno referente à primeira derivada. Ainda em se tratando das condições de contorno, as segundas derivadas tiveram valores variáveis, conforme foi dito, estando entre: $2,99812 \leq n''_{(0)} \leq 3,2111$. Outras

abordagens deste tipo também podem ser vistas em Schulz et al. (2011b), inclusive com o aumento da ordem do método de Runge-Kutta utilizado na simulação.

Também a fim de verificar a amplitude de alcance do α_c^p , podem ser simuladas algumas situações para o comportamento da função de partição com a variação da função de redução, alterando-se eventualmente as duas condições de contorno do tipo Neumann. Desta forma pode ser apresentada a Figura 3-4.

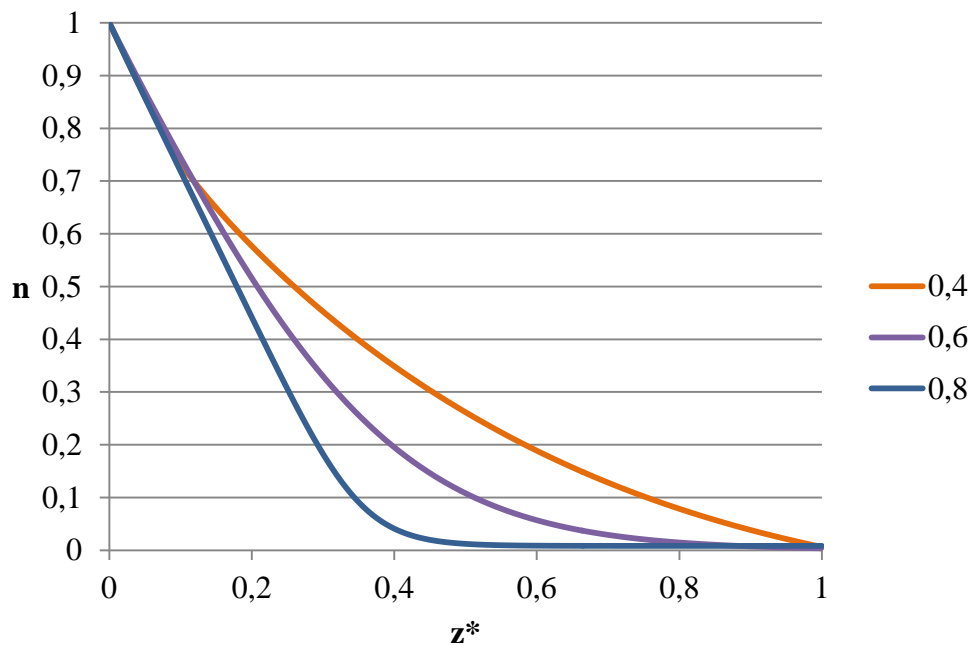


Figura 3-4: gráfico de simulação para α_c^p e as condições de contorno do tipo Neumann variáveis

Na figura anterior estão representados os comportamentos de n para três funções de redução distintas. Para esta simulação, as condições de contorno do tipo Neumann foram alteradas em relação aos seus valores inicialmente apresentados. No Quadro 3-2 constam os valores utilizados.

Quadro 3-2: condições de contorno tipo Neumann usadas para cada α_c^p .

Função de Redução	Primeira Derivada	Segunda Derivada
0,4	-2,90	3,08300
0,6	-2,69	2,66600
0,8	-2,90	3,00836

Duas comparações importantes podem ser feitas: a primeira comparando a Figura 3-4 e Figura 3-3 ao observar a curva para $\alpha_c^p = 0,4$. Na Figura 3-5 pode ser observado que apesar de as curvas parecerem idênticas, há uma pequena distinção entre elas. Isso é de se esperar, já que as condições de contorno são distintas.

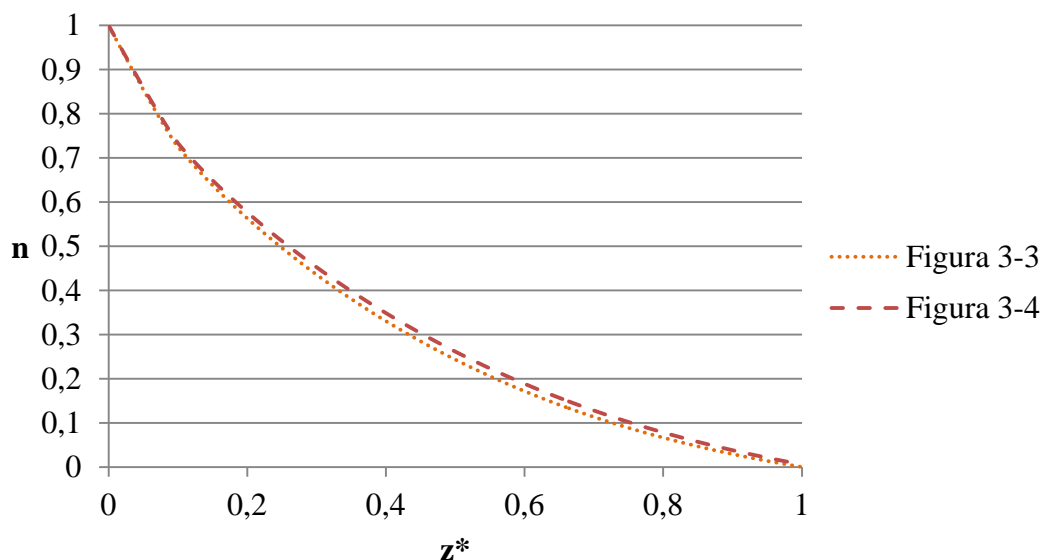


Figura 3-5: comparação das curvas de $\alpha_c^p = 0,4$ das Figuras 3-3 e 3-4.

O mesmo pode ser dito a respeito do $\alpha_c^p = 0,6$ conforme pode ser observado na Figura 3-6.

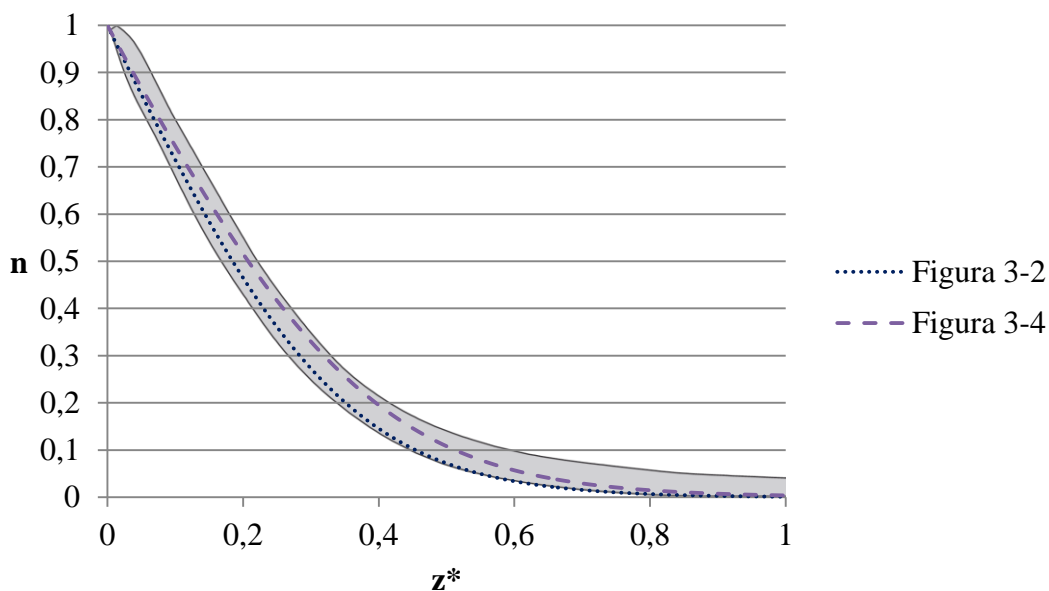


Figura 3-6: comparação das curvas de $\alpha_c^p = 0,6$ das Figuras 3-2 e 3-4.

Nota-se que as condições de contorno distintas geram comportamentos distintos e que ambas as curvas podem representar o conjunto de dados. Essas comparações reforçam a

importância das condições de contorno iniciais, sobretudo as do tipo Neumann para a análise do modelo.

3.1.3 Comentários

Neste tópico são abordadas questões diversas já apresentadas anteriormente como forma de analisar melhor alguns aspectos observados. Os comentários aqui feitos abordam pontos que possam ter suscitado alguma dúvida, de forma a esclarecê-los, ou até curiosidades, de maneira a saná-las.

- Função de Redução Predominante

Esse assunto já é recorrente, visto que já foi abordado em itens anteriores. Entretanto sua importância no trabalho exige mais uma ressalva, já que as simulações se basearam nessa premissa.

Fisicamente, sabe-se que a função de redução é variável ao longo da camada limite, mas ao observar o comportamento da mesma, pode-se, eventualmente, adotar um valor para α_c de modo que ele seja representativo com relação ao comportamento. Com esse valor predominante seria, então, possível caracterizar o fenômeno.

É óbvio, no entanto, que o mais correto seria simular o fenômeno com base na equação completa (sem simplificações com relação à α_c , conforme mencionado também em Schulz 2011a e b) acrescentando mais condições de contorno para resolver o problema.

Isto é possível, mesmo que mais complicado, já que a equação seria ainda mais complexa e as condições de contorno para α_c deveriam ser encontradas. Portanto, como a análise simplificada alcançou bons resultados, não foi preciso ampliar a análise para a função de redução variando ao longo de z^* .

Um questionamento possível pode ser feito sobre qual valor predominante aplicar. Mas isso dependerá das condições do fenômeno. É improvável que os valores a serem utilizados estejam fora do intervalo: $0,4 \leq \alpha_c^p \leq 0,8$; para o caso da análise de transferência de massa. Valores fora dessa faixa foram testados buscando encontrar condições físicas apropriadas para o fenômeno de transferência de massa em si, mas não foi obtido grande sucesso.

Mesmo dentro do intervalo foram evidenciadas algumas descontinuidades que não puderam representar os dados. Vale ressaltar que tais descontinuidades dentro do intervalo, no entanto, eram “deslocadas” ao se alterar a ordem do método de Runge-Kutta, bem como os valores de n de alguns pontos simulados. Ou seja, ao simular a função de partição utilizando o Runge-Kutta de terceira e quarta ordens, o resultado seria diferente, mesmo que sutil, sendo necessário em boa parte das vezes alterar as condições de contorno do tipo Neumann para alcançar os resultados pretendidos.

Essas descontinuidades provavelmente são em detrimento tanto do método de simulação quanto da consideração do valor predominante para o α_c . Desta forma a utilização de outros métodos ainda encontrariam faixas diferentes.

Uma ressalva deve ser feita ao se considerar valores muito altos para a função de redução, já que eles iriam “priorizar” as partes mais externas da camada limite, onde as oscilações são praticamente nulas, e, em contrapartida, ao se adotar valores muito baixos, dar-se-ia muito enfoque as oscilações altas, características da parte mais “central” da camada limite turbulenta. Com isso é necessária certa atenção na adoção do α_c^p fora da faixa indicada ao simular um fenômeno específico.

De maneira a finalizar o assunto, sabe-se que em alguns casos a abordagem da função de redução predominante não alcançará bons resultados ou, até mesmo, não obterá resultado algum. Nestes casos, fica clara a necessidade de se utilizar uma abordagem mais geral, computando na simulação a sua variação a partir de condições de contorno. Isso é importante deixar claro, já que para simulações com mais de uma dimensão espacial, por exemplo, pode ser necessária tal abordagem.

- Diferenças Finitas

Como foi dito anteriormente, inicialmente se optou por trabalhar com o método das diferenças finitas, o que gerou um custo computacional elevado e resultados bem abaixo dos esperados. No entanto, quando este método foi aplicado, foram usadas duas condições tipo Dirichlet ($n(z^* = 0)$ e $n(z^* = 1)$) e uma condição tipo Neumann ($\partial n / \partial z^*(z^* = 1)$).

Mas ao aplicar logo após o método de Runge-Kutta, utiliza-se uma condição de Dirichlet ($n(0) = 1$) e duas tipo Neumann ($\partial n / \partial z^*(z^* = 0)$ e $\partial^2 n / \partial z^{*2}(z^* = 0)$). Ao

fazer uma rápida tentativa com estas novas condições de contorno no método das diferenças finitas, notou-se uma melhora no resultado encontrado, bem como no custo computacional. Mesmo assim, descartou-se sua utilização, pois o método de Runge-Kutta se mostrou mais eficaz na análise realizada em ambos os aspectos.

Isto está sendo ressaltado, porque demonstrou que é possível fazer uso das diferenças finitas para a simulação, coisa que a princípio parecia uma possibilidade descartada, mesmo que sem explicação aparente.

Nota-se que a condição de Neumann que substituiu a de Dirichlet são diretamente “relacionadas”, pois ao satisfazer uma estará satisfazendo a outra, mas a estrutura de apresentação é distinta e obtiveram resultados distintos.

Dois pontos importantes devem ser chamados à atenção: primeiro a importância da estrutura das condições de contorno, já que sem ela a simulação torna-se muito mais longa e duvidosa quanto à convergência; e segundo abre mais um método a ser empregado nas análises de mais de uma dimensão, pois o método das diferenças finitas seria válido desde que as condições de contorno sejam propícias.

- Condições de Contorno

Já que acabam de serem citadas as condições de contorno, também é importante comentar algumas observações percebidas ao longo da elaboração do presente trabalho.

A primeira coisa a se chamar a atenção é que existe um conjunto de condições de contorno que possibilitam o comportamento da curva, a fim de representar o fenômeno em questão, para cada α_c predominante.

Cada solução distinta é alcançada através de um par de condições tipo Neumann (primeira e segunda derivada, conforme foi visto). Ou seja, para cada primeira derivada, há apenas uma derivada segunda que, para uma função de redução predominante qualquer, possa ser considerada uma solução para o fenômeno em questão ao se basear nas condições físicas necessárias (como as do item 2.6, por exemplo).

A Figura 3-7 ilustra a situação, onde cada linha ligando um valor de n' e n'' representa um resultado possível para um α_c predominante qualquer.

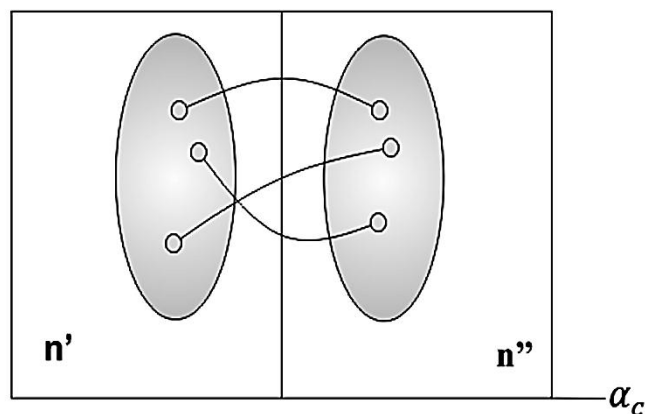


Figura 3-7: esquema geral para as condições de contorno em relação aos resultados.

Dentro do universo de pares possíveis para α_c existem inúmeros pontos de n' e n'' . Já nestes, é possível selecionar conjuntos de pontos possíveis (destacado através de uma nuvem elíptica na Figura 3-7) e para cada valor de n' existirá um valor de n'' correspondente a uma situação fenomenológica específica. E, dentre todos os pares possíveis, apenas um que representará a situação específica estudada.

Isso se deve a complexidade da equação do modelo, já que para cada derivada primeira de n em relação à z^* , haverá uma derivada segunda, tal que possa resolver o problema e tantas outras que podem representar outros problemas de transferências distintas. E ainda haverá outras derivadas primeiras com suas respectivas derivadas segundas, correlacionadas ao problema em análise, que também poderão simular bem os dados.

Assim, nas análises realizadas, ao se adotar um α_c constante em relação à z^* , mais de um par poderá representar de maneira aproximada o comportamento dos dados, mas nunca representarão a mesma curva simulada entre si. Vale ressaltar também que há pontos de descontinuidades ao longo da análise com a função de redução predominante, conforme já foi discutido, onde tais pares não são formados.

Se, entretanto, a função de redução for variável, o número de pares representativos irá reduzir de maneira a tender ao único par (à medida que os erros envolvidos são eliminados) de modo que o resultado tenda a um único par que poderá representar o fenômeno em questão.

Por exemplo, para a simulação base em questão ($\alpha_c^p = 0,5$), estimou-se a primeira derivada de n e em seguida se tem a segunda derivada correspondente para que a

simulação fosse concretizada. A escolha dessa segunda derivada está amarrada a uma “condição de contorno intrínseca” ($n(1) \cong 0$, com tolerância de 1%), mas seu valor é estimado a partir do comportamento inicial de n .

Para a representação da mesma nuvem de dados, pode-se obter através do mesmo método, outra primeira derivada associada à outra segunda derivada, com valores possivelmente próximos aos do primeiro par de condições de contorno, cuja curva irá representar uma situação distinta de mesma função de redução, com uma curva diferente, mas válida para a nuvem de pontos. E tal situação poderia se repetir com mais outros tantos pares possíveis.

Se, entretanto, α_c for tido como variável, o comportamento padrão predominante ($\alpha_c^p = 0,5$) da situação em análise permanece, mas se espera que o comportamento específico dele, ou seja, a curva de seu comportamento ao longo de z^* fará com que apenas um par de condições de contorno tipo Neumann (primeira e segunda derivadas) possa ser utilizado em conjunto com tal comportamento para representar a nuvem de dados, pois se imagina que o comportamento combinado de ambos, que caracteriza o fenômeno em questão, estará ligado a apenas um conjunto de condições de contorno que será o caracterizador do problema.

3.2 Análises Subsequentes Alternativas

O procedimento de parametrização empregado envolve uma metodologia sistemática aplicada sobre equações básicas que descrevem a transferência de massa em escoamentos turbulentos. Evidentemente tal metodologia pode ser aplicada sobre outro conjunto de equações básicas. Esta possibilidade é abordada no item *Challenges* (desafios) de Schulz et al. (2011b), no qual algumas possibilidades ainda não exploradas são aventadas.

Assim, é possível partir de outro conjunto de equações de momentos centrais para encontrar a solução do fenômeno. Este conjunto é alternativo, podendo igualmente representar o fenômeno em questão, mesmo sendo distinto da proposição aqui detalhada.

Um segundo conjunto de equações pode ser mais ou menos complexo, redutível ou não, mas as propriedades gerais das possíveis alternativas, como mencionado em Schulz et

al. (2011b), ainda não foram discutidas. Os mesmos autores comentam que α_c constante é uma primeira aproximação, cujos resultados em essência demonstram a aplicabilidade da proposta.

Como esta essência da aplicabilidade foi atingida (note-se que não se defende um “modelo”, mas a metodologia de abordagem estatística), não se buscou aqui os equacionamentos alternativos anteriormente citados, mas detalhar os passos e explorar como obter respostas melhores a partir das definições adequadas dos contornos.

Contudo, uma ampliação da análise para o caso bidimensional (conforme destacado no item 4), pode necessitar avançar sobre os aspectos ainda não explorados da metodologia. Não se pode especular sobre as tendências, como se o procedimento ficará mais robusto ou não, por exemplo, em se ajustando as simplificações iniciais, como a limitação de funções de redução preponderantes, bem como eventualmente testando as diferentes ordens do método de Runge-Kutta,

Um exemplo de análise alternativa, utilizando mais equações de momentos centrais e considerando aqueles de menor ordem (ver os desafios sugeridos por Schulz et al. 2001a), leva ao seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \overline{v_z \bar{C}} \right) \\ \frac{1}{3} \frac{\partial \bar{c}^3}{\partial t} + \overline{c^2} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \overline{v_z c^2} + \frac{1}{3} \frac{\partial \overline{v_z c^3}}{\partial z} = D \left(\overline{c^2} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \overline{c^2} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \\ \frac{1}{4} \frac{\partial \bar{c}^4}{\partial t} + \overline{c^3} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \overline{v_z c^3} + \frac{1}{4} \frac{\partial \overline{v_z c^4}}{\partial z} = D \left(\overline{c^3} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \overline{c^3} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \end{array} \right. \quad (3.08)$$

Estes são os momentos centrais de primeira, de terceira e de quarta ordens (equação já apresentada, 2.03).

4 ANÁLISE BIDIMENSIONAL PRÉVIA

A análise bidimensional aqui descrita serve de ponto inicial para a ampliação da análise de transferência de massa em escoamentos turbulentos para mais de uma dimensão com base na metodologia de ondas quadradas aleatórias. Esta apresentação segue aquela desenvolvida por Schulz et al. (2011b).

Esta abordagem representa uma primeira tentativa, podendo ser posteriormente ampliada. O que se observou é que se pode aplicar a análise a casos mais complexos, ficando o detalhamento desta ampliação para trabalhos futuros.

Conforme destacado por Schulz et al. (2011b), os autores consideraram o transporte de quantidade de movimento e não o de massa. Portanto, se antes era preciso conhecer as interações entre velocidade e grandezas escalares, a abordagem passa a incluir as interações entre velocidades em diferentes direções.

No caso da análise da velocidade, usam-se as equações de Reynolds (4.01), advindas das equações de Navier-Stokes.

$$\frac{\partial \bar{V}_j}{\partial t} + \bar{V}_i \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial i} = \frac{\partial}{\partial i} \left(\nu \frac{\partial \bar{V}_j}{\partial i} - \overline{v_i v_j} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial j} + B_j \quad (4.01)$$

Onde i é um vetor com todas as coordenadas espaciais cartesianas envolvidas e j é coordenada específica em análise. ν é a viscosidade cinemática do fluido, ρ é a massa específica e B_j é a chamada “força de campo” por unidade de massa.

Com uma abordagem estacionária, considerando um escoamento bidimensional, no qual as velocidades são predominantes e relevantes apenas em uma direção e sem ação de forças de campos, como a gravidade, pode-se resumir a equação 4.01 na equação 4.02:

$$\bar{V}_x \frac{\partial \bar{V}_x}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu \frac{\partial \bar{V}_x}{\partial x} - \overline{v_x^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial \bar{V}_x}{\partial z} - \overline{v_x v_z} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} \quad (4.02)$$

Assim, ao considerar um escoamento entre placas paralelas, \bar{V}_x passa a depender apenas da coordenada z e ao saber que o valor do RMS não irá se alterar ao longo de x , resume-se 4.02 em 4.03:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial \bar{V}_x}{\partial z} - \overline{v_x v_z} \right) \quad (4.03)$$

Essa última equação é a base para a definição das funções de partição, redução e superposição. Uma proposta para a função de partição foi dada a partir da consideração de escoamentos em placas paralelas de acordo com a Figura 4-1 (SCHULZ ET AL., 2011b).

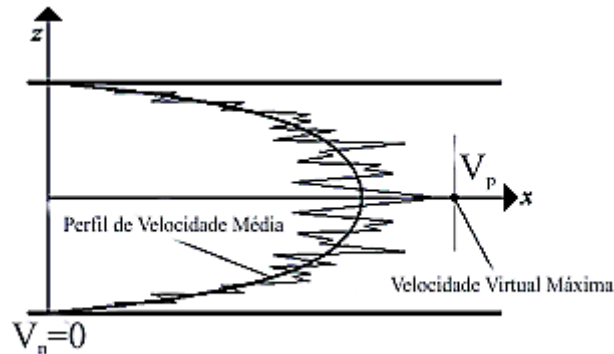


Figura 4-1: Escoamento turbulento entre placas planas (SCHULZ ET AL., 2011b)

Como pode ser observado, são definidas duas velocidades extremas V_n e V_p seguindo a mesma nomenclatura já utilizada, onde $V_p > V_n$. V_p representa uma velocidade virtual máxima, de modo que todo espectro de velocidades do campo esteja abaixo dela. Essa definição permite efetuar uma analogia direta com o caso da concentração.

Ainda seguindo de maneira análoga, definiu-se uma função de partição longitudinal para a velocidade, de forma que:

$$m_x = \frac{\Delta t_{V_p-P}}{\Delta t_{total}} \quad (4.04)$$

O que sugere, também de forma análoga:

$$1 - m_x = \frac{\Delta t_{V_n+N}}{\Delta t_{total}} \quad (4.05)$$

Seguindo os mesmos passos para a obtenção da equação 2.12, obtém-se:

$$m_x = \frac{\bar{V}_x - V_n}{V_p - V_n} \quad (4.06)$$

Além da função de partição, definiu-se também a função de redução para a velocidade considerando-se o escoamento ao longo do eixo x . Com isso, aplicando novamente a analogia, têm-se as equações 4.07 e 4.08.

$$N = \alpha_v^x m_x (V_p - V_n) \quad (4.07)$$

$$P = \alpha_v^x (1 - m_x) (V_p - V_n) \quad (4.08)$$

Seguindo os mesmos passos descritos no item 2.4.1, pode-se também obter:

$$v_{x1} = (1 - m_x) (V_p - V_n) (1 - \alpha_v^x) \quad (4.09)$$

$$v_{x2} = -m_x (V_p - V_n) (1 - \alpha_v^x) \quad (4.10)$$

Aplicando-se, então, a equação obtida no Apêndice I resulta:

$$\overline{v_x^2} = m_x v_{x1}^2 + (1 - m_x) v_{x2}^2 = m_x (1 - m_x) (1 - \alpha_v^x)^2 (V_p - V_n)^2 \quad (4.11)$$

De onde se pode encontrar a relação 4.12 ao aplicar raízes em ambos os lados e isolando-se o termo de $(1 - \alpha_v^x)$.

$$1 - \alpha_v^x = \frac{\sqrt{\overline{v_x^2}}}{(V_p - V_n) \sqrt{m_x (1 - m_x)}} \quad (4.12)$$

Schulz et al. (2011b) mencionam que se pode obter a função de redução utilizando dados medidos e apresentam uma metodologia que permite trabalhar com os dados existentes na literatura. Pope (2000) apresenta os dados de Wei e Willmarth (1989), utilizados na análise de Schulz et al. (2011b) e aqui descrita em detalhes.

Partindo da equação 4.06 e observando o proposto na Figura 4-1 ($V_n = 0$), pode-se chegar à equação 4.13 ao se dividir tanto o numerador quanto o denominador pela velocidade de atrito ou velocidade cisalhante (V_τ):

$$m_x = \frac{\overline{V_x}/V_\tau}{V_p/V_\tau} = \frac{V^+}{V_p'} \quad (4.13)$$

De modo a avaliar V_p' , observa-se o valor máximo para a razão entre a velocidade média e a velocidade de atrito e acrescenta-se a parcela proveniente das oscilações. Na figura

4-2, tem-se um gráfico dos valores de V^+ em função de z^+ , que representa a razão entre a distância da parede e a escala de comprimento viscoso ($\delta_v = \nu/V_\tau$). A partir do gráfico, extraem-se os valores máximos possíveis com base nos pontos de máximo dos dados.

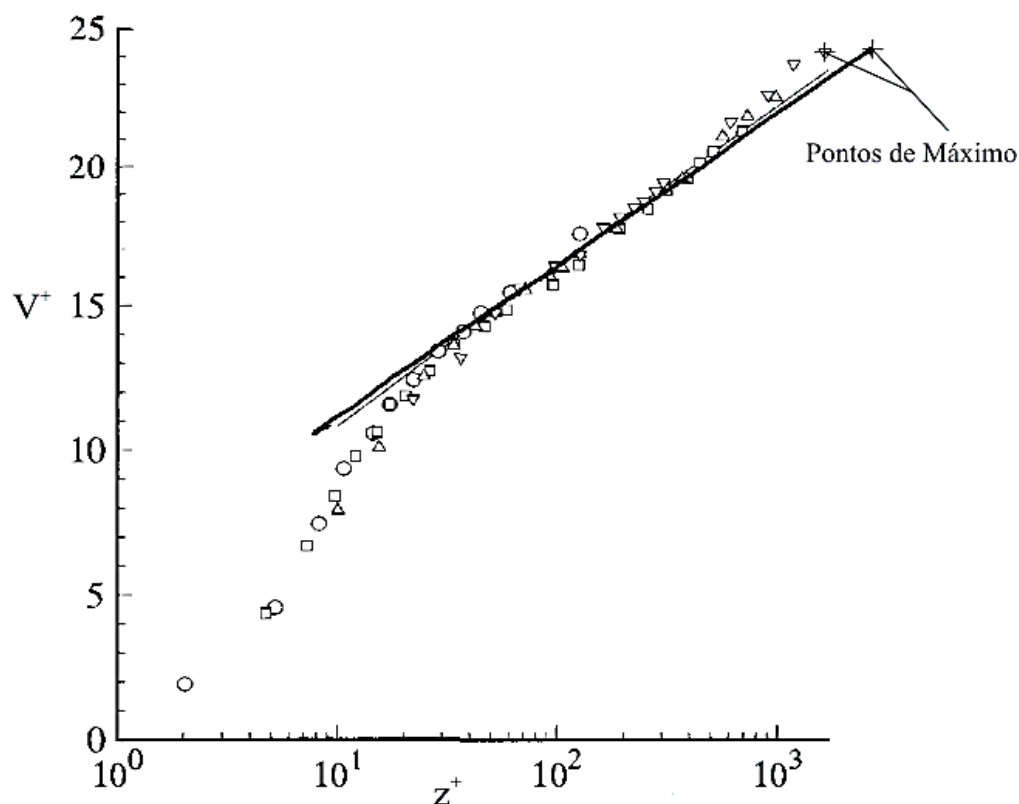


Figura 4-2: dados de Wei e Willmarth (1989) para a estimativa de V^+ (POPE, 2000).

Os pontos de máximo são o valor observado máximo dos dados e o valor máximo extrapolado da curva gerada. Ambos os pontos giram em torno do mesmo valor e são, assim, usados para o cálculo do $V_{máx}^+$, já que o objetivo será encontrar o valor da velocidade virtual máxima, V_p .

Desta forma, o valor máximo de V^+ observado pelos dados de Wei e Willmarth (1989 apud POPE, 2000) gira em torno de 24,2. Em sequência, encontra-se o valor da razão entre as oscilações (representada pelo valor do RMS) e a velocidade de atrito correspondente ao $V_{máx}^+$. Novamente recorrendo aos dados dos mesmos autores e também citados na mesma literatura base, tem-se a Figura 4-3.

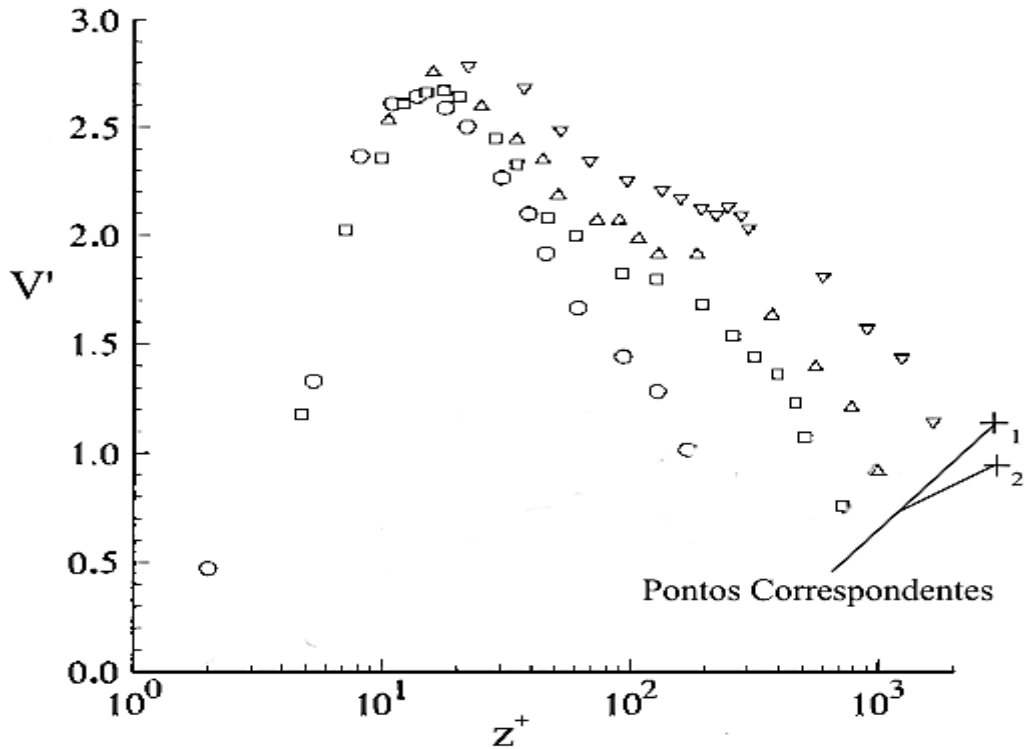


Figura 4-3: dados de Wei e Willmarth (1989) para a obtenção de V' (POPE, 2000).

O valor de V' ($\sqrt{\overline{v_x^2}}/V_t$) pode ser extraído a partir dos dados ilustrados na Figura 4-3. Para isso é necessário encontrar os pontos correspondentes, ou seja, o ponto cujo valor de z^+ é igual ao do ponto máximo encontrado na Figura 4-2.

No entanto, há dois pontos descritos na Figura 4-2. Tomou-se inicialmente, desta forma, o ponto extrapolado como base e, deste modo, pode-se optar por dois pontos. O ponto (1) é alinhado com o último dado descrito e o ponto (2) é baseado no comportamento extrapolado da nuvem de pontos, tomando-se o ponto mais elevado.

A escolha, portanto, recai sobre o ponto (1) por dois motivos: primeiro ele é o valor mais alto (aproximadamente 1,14, enquanto segundo ponto gira em torno do 0,95); e se for tomado de base o z^+ do último ponto observado na Figura 4-2, o valor da extrapolação se aproxima do último valor observado dos dados da Figura 4-3, ou seja, em torno de 1,14.

Mas ainda resta saber como compor o V_p' . Para tanto, pode-se fazer uso de uma distribuição estatística e estimar o seu valor a partir de uma probabilidade para definir tal composição.

Assim, utiliza-se uma distribuição Normal (ou Gaussiana). Na Figura 4-4, podem-se observar alguns valores de probabilidade e seus respectivos “comprimentos” da distribuição, conforme destacado por Montgomery e Runger (2003).

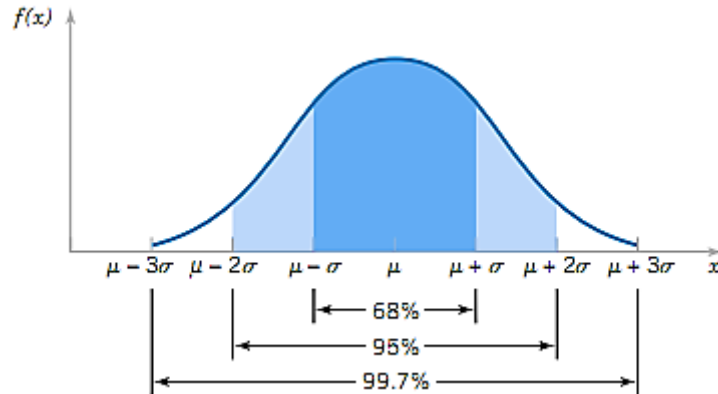


Figura 4-4: distribuições Normais (MONTGOMERY E RUNGER, 2003).

Com isso, baseando numa probabilidade de 99,7% de conter todos os valores de V'_p , pode-se apresentar a equação 4.14, já que se busca o valor máximo.

$$V'_p = V_{m\acute{a}x}^+ + 3V'_{correspondente} \quad (4.14)$$

Substituindo os valores extraídos das figuras 4-2 e 4-3, tem-se que V'_p é aproximado em 27,6. Em seguida, retorna-se a equação 4.13.

$$m_x = \frac{V^+}{27,6} \quad (4.15)$$

Mas V^+ pode ser substituído pela lei Log, descrita pela equação 4.16.

$$V^+ = \frac{1}{\kappa} \ln z^+ + B \quad (4.16)$$

Onde κ é constante de von Kármán e B uma constante qualquer. Usualmente os valores apresentados na literatura são 0,41 e 5,2, respectivamente. Desta forma a equação 4.15 pode ser descrita por:

$$m_x = \frac{2,44 \cdot \ln z^+ + 5,2}{27,6} \quad (4.17)$$

Reorganizando a equação 4.12, sabendo que $V_n = 0$ de acordo com o proposto anteriormente e dividindo ambos os termos pela velocidade de atrito, encontra-se a expressão 4.18.

$$V' = \frac{\sqrt{v_x^2}}{V_\tau} = V_p' \sqrt{m_x(1 - m_x)}(1 - \alpha_v^x) \quad (4.18)$$

Onde $V_p' = 27,6$, conforme os procedimentos já apresentados.

De forma a ilustrar o comportamento de $V_p' \sqrt{m_x(1 - m_x)}$ e compará-lo com os dados apresentados por Wei e Willmart (1989 apud POPE, 2000) para V' , Schulz et al. (2011b) apresentou a Figura 4-5. Nela pode ser observado o comportamento de $V_p' \sqrt{m_x(1 - m_x)}$ em comparação com os dados gerados por Wei e Willmarth (1989 apud POPE, 2000) para V' .

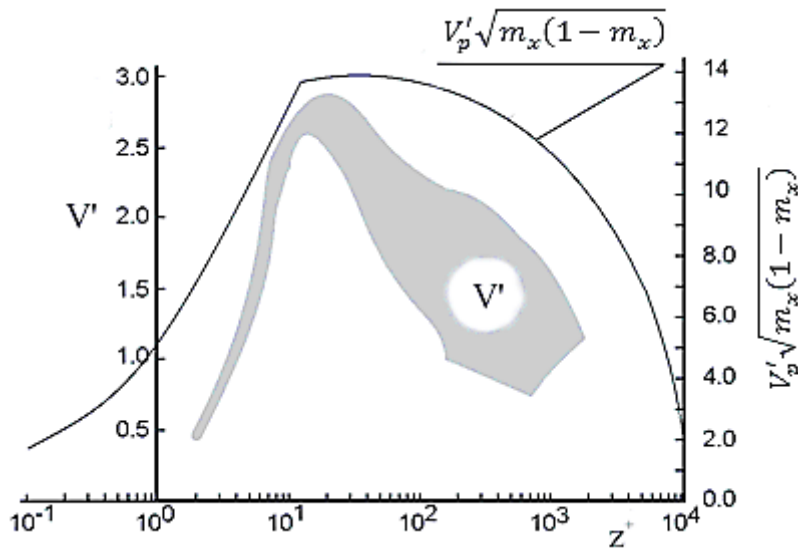


Figura 4-5: verificação do comportamento da equação 4.18 com os dados de Wei e Willmarth (1989 apud POPE, 2000) (SCHULZ ET AL., 2011b)

Observa-se que a equação obtida acompanha aproximadamente a forma da nuvem de pontos dos dados. Isso é coincidente com a conclusão de Schulz e Janzen (2009) para as flutuações de concentração.

Inferi-se que a ampliação para mais de uma dimensão espacial pode seguir os mesmos conceitos apresentados para o caso unidimensional.

5 COMENTÁRIOS FINAIS

A turbulência é um ramo desafiador da mecânica dos fluidos. Conforme foi discutido no início do presente trabalho, existem vários modelos ou propostas de abordagem que têm sido historicamente apresentados e utilizados por pesquisadores em todo o globo.

Este trabalho visou inicialmente detalhar as características de uma metodologia de abordagem estatística que se apresenta como promissora no contexto da turbulência. Não se trata, como geralmente se apresenta na literatura, de um modelo para turbulência, mas de uma “metodologia que se aplica muito bem à turbulência”. Descreveu-se o caso unidimensional de transferência de massa em regime turbulento, extensível para a transferência de quaisquer grandezas escalares nesse regime.

Apesar de os textos analisados considerarem uma proposta em estágio de consolidação, ela mostrou-se bastante eficaz nas análises realizadas, produzindo previsões bastante animadoras, encorajando o seu aprofundamento. Ao fazer uso de uma metodologia simples e de conceitos físicos, os procedimentos propostos formam uma ferramenta promissora em análises de escoamentos turbulentos.

Os objetivos de detalhamento e apresentação de um texto em língua portuguesa desta metodologia levaram à formalização da presente dissertação. Nesse contexto, a sequência de passos detalhada conduziu a uma equação para transferência unidimensional de massa que possui uma parcela distinta daquela equação inicialmente considerada em 2010 por Schulz et al., quando os autores aplicaram originalmente a metodologia da onda quadrada aleatória. A presente forma da equação é resultado de análises conjuntas dos pesquisadores envolvidos com esta metodologia e representa, no contexto dos passos seguidos, um modo mais adequado de exprimir o transporte unidimensional de um escalar em se considerando α_c constante. Nesse sentido, o presente texto expõe um equacionamento mais robusto do que aquele primeiramente testado.

Em adição ao detalhamento das características da metodologia, apresentou-se uma contribuição com o presente estudo, não contida nos textos precedentes, que é a equação para o transporte unidimensional na qual a função de redução é mantida variável em relação à z^* , isto é α_c é variável. Neste caso, apresenta-se também o sistema de

equações alternativo equivalente. Os desenvolvimentos subsequentes desta metodologia poderão necessitar deste novo sistema de equações.

A dedução das equações tem papel de destaque para a aplicação desta metodologia. Ela permite observar a sistemática de aplicação das funções definidas *a priori*, que é bastante intuitiva, característica que procurou ser evidenciada neste texto. As análises numéricas aqui apresentadas, por sua vez, geraram discussões importantes acerca dos problemas vinculados a esta metodologia na quantificação da transferência unidimensional de escalares, bem como a abrangência de utilização das conclusões unidimensionais. A utilização do método de Runge-Kutta, em detrimento do método das Diferenças Finitas, constitui uma ferramenta poderosa não só nas análises gráficas, mas também na simulação como um todo, sobretudo se observado o custo computacional envolvido.

Uma questão primordial que foi abordada no presente trabalho foi, sem dúvida, a análise das condições de contorno aplicáveis no caso unidimensional. A tentativa de se simular o modelo por diferentes métodos e com diferentes tipos de condições de contorno culminaram para uma análise de condições de contorno mais adequadas para o estudo de transferência de grandezas escalares.

Tais análises foram cruciais para firmar a utilização do modelo. A indicação e verificação da composição do conjunto de condições de contorno que melhor se aplicam representa uma contribuição importante no contexto de uso das ondas quadradas aleatórias.

Para o transporte unidimensional analisado, verificou-se que as melhores condições de contorno são: uma condição de Dirichlet e duas de Neumann no ponto de $z^* = 0$ (uma primeira derivada e uma segunda derivada).

Assim, de acordo com o exposto nessas conclusões, consideram-se atingidos os objetivos apresentados nos itens 1.2.1 e 1.2.2 do presente texto.

- Recomendações:

Entende-se que a metodologia, como aplicada ao caso turbulento, representa uma ferramenta que aponta para a possibilidade de soluções adequadas, melhor embasadas fisicamente em comparação com as hipóteses mais clássicas utilizadas na área.

Sugere-se, que nos estudos futuros, esforços sejam direcionados para:

- i. Aplicar metodologias de resolução para a_c variável no caso unidimensional.
- ii. Desenvolver o ambiente matemático (conjunto de equações e descrição de suas características) para os casos bi e tridimensionais.

APÊNDICE I: equação para média de oscilações exponenciais.

Toma-se inicialmente uma grandeza A , cuja função de partição é k' , onde se pode escrever a expressão seguinte:

$$\overline{A^\phi} = k'A_1^\phi + (1 - k')A_2^\phi$$

Onde A_1 e A_2 são, respectivamente, as grandezas positiva e negativa em relação à média e o expoente ϕ é um expoente qualquer de análise. Esta relação inicial indica que se tivermos grandezas elevadas a um determinado expoente, a média será ponderada pela função de partição das mesmas. Se for observado um expoente unitário, por exemplo, retorna-se a expressão 2.11 já apresentada.

Com isso, se $A = \bar{A} + a$, então:

$$\overline{(\bar{A} + a)^\phi} = k'(\bar{A} + a)_1^\phi + (1 - k')(\bar{A} + a)_2^\phi$$

Vale observar que, ao desenvolver os expoentes em ambos os lados, os membros elevados a expoentes ímpares do lado direito serão sempre anulados pelas parcelas equivalentes e opostas.

Além disso, todos os outros membros são anulados por termos dos dois lados da igualdade, podendo a expressão final ser escrita como:

$$k'a_1^\phi + (1 - k')a_2^\phi = \overline{a^\phi}$$

Como demonstração para essa equação pode-se utilizar a seguinte sequência, assim para $\phi = 2$; pode escrever que:

$$\begin{aligned} \overline{(\bar{A} + a)^2} &= k'(\bar{A} + a)_1^2 + (1 - k')(\bar{A} + a)_2^2 \\ \Rightarrow \overline{\bar{A}^2 + 2\bar{A}a + a^2} &= k'(\bar{A}^2 + 2\bar{A}a_1 + a_1^2) + \bar{A} + 2\bar{A}a_2 + a_2^2 - k'(\bar{A} + 2\bar{A}a_2 + a_2^2) \\ \Rightarrow \overline{\bar{A}^2 + 2\bar{A}a + a^2} &= k'(\bar{A}^2 + 2\bar{A}a_1 + a_1^2) + \bar{A}^2 + 2\bar{A}a_2 + a_2^2 - k'(\bar{A}^2 + 2\bar{A}a_2 + a_2^2) \\ \Rightarrow \overline{2\bar{A}a + a^2} &= 2\bar{A}[k'a_1 + (1 - k')a_2] + [k'a_1^2 + (1 - k')a_2^2] \end{aligned}$$

Lembrando que a média de uma oscilação é igual a zero e que conforme descrito na equação 2.24 ($k'a_1 + (1 - k')a_2 = 0$), então:

$$k'a_1^2 + (1 - k')a_2^2 = \overline{a^2}; c. q. d.$$

Se for aplicado para $\phi = 3$, seguir-se-á o mesmo procedimento, mas aparecerão agora dois membros conhecidos já encontrados em $\phi = 1$ e $\phi = 2$; já no $\phi = 4$, aparecerão termos já encontrados nos outros três ϕ antecessores e assim por diante.

Nota-se que o coeficiente de ponderação não acompanha o expoente das grandezas, isso porque ele representa, de maneira sintetizada, o tempo que a grandeza está acima ou abaixo da média, independente se esta grandeza estiver ao quadrado, for cúbica ou de quaisquer expoentes superiores.

APÊNDICE II: equação para oscilações de velocidade.

Utilizam-se a equação descrita no Apêndice I, com a grandeza sendo a velocidade e o sua função de partição m , tem-se:

$$mv_1^2 + (1 - m)v_2^2 = \overline{v^2}$$

De acordo com a expressão 2.24:

$$\frac{U^2}{m} + \frac{U^2}{1 - m} = \overline{v^2}$$

$$\Rightarrow \frac{U^2}{m - m^2} = \overline{v^2}$$

$$\Rightarrow U = \sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{m - m^2}$$

Portanto retornando a expressão para as oscilações, 2.24, podem-se escrever as oscilações de velocidade como:

$$v_1 = \sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{1 - m}{m}}$$

$$v_2 = -\sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{m}{1 - m}}$$

Substituindo m de acordo com a expressão 2.16 [$m = 1 - (\beta + n - 2\beta n)$]:

$$v_1 = \sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}}$$

$$v_2 = -\sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}}$$

APÊNDICE III: expressão geral para o fluxo de massa turbulento.

Uma expressão geral para o fluxo de massa turbulento pode ser obtido ao se substituir as equações 2.20, 2.21, 2.25 e 2.26 na 2.27. Com isso, ter-se-á:

$$\begin{aligned}\bar{v}c &= v_1[c_1 n\beta + c_2(1-n)(1-\beta)] + v_2[c_1 n(1-\beta) + c_2(1-n)\beta] \\ \Rightarrow \bar{v}c &= \sqrt{\frac{\bar{v}}{v^2}} \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} [(1-n)(C_p - C_n)(1 - \alpha_c)n\beta \\ &\quad - n(C_p - C_n)(1 - \alpha_c)(1-n)(1-\beta)] \\ &\quad - \sqrt{\frac{\bar{v}}{v^2}} \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} [(1-n)(C_p - C_n)(1 - \alpha_c)n(1-\beta) \\ &\quad - n(C_p - C_n)(1 - \alpha_c)(1-n)\beta]\end{aligned}$$

Ao se colocar em evidência os termos em comum, tem-se como etapa intermediária a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}\bar{v}c &= n(1-n)(1 - \alpha_c)(C_p - C_n)(1 - 2\beta)\sqrt{\frac{\bar{v}}{v^2}} \left(- \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \right) \\ \Rightarrow \bar{v}c &= -n(1-n)(1 - \alpha_c)(C_p - C_n)(1 \\ &\quad - 2\beta)\sqrt{\frac{\bar{v}}{v^2}} \left[\frac{(\sqrt{\beta + n - 2\beta n})^2 + (\sqrt{1 - (\beta + n - 2\beta n)})^2}{\sqrt{1 - (\beta + n - 2\beta n)} \cdot \sqrt{\beta + n - 2\beta n}} \right] \\ \Rightarrow \bar{v}c &= -n(1-n)(1 - \alpha_c)(C_p - C_n)(1 \\ &\quad - 2\beta)\sqrt{\frac{\bar{v}}{v^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{(\beta + n - 2\beta n) - (\beta + n - 2\beta n)^2}} \right]\end{aligned}$$

Após desmembrar todos os termos dentro dos colchetes e certo algebrismo, utilizando termos em evidência, pode-se obter:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \overline{vc} &= -n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)(1 \\
&\quad - 2\beta)\sqrt{\overline{v^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \right] \\
\Rightarrow \overline{vc} &= n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)(2\beta - 1)\sqrt{\overline{v^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \right] \\
\Rightarrow \overline{vc} &= n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)\sqrt{\overline{v^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}} \right] \\
\Rightarrow \overline{vc} &= \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)\sqrt{\overline{v^2}}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}}
\end{aligned}$$

Se for tomada uma expressão geral para o fluxo de massa turbulento, parte-se da seguinte equação:

$$\overline{vc^\phi} = v_1 [c_1^\phi n\beta + c_2^\phi (1-n)(1-\beta)] + v_2 [c_1^\phi n(1-\beta) + c_2^\phi (1-n)\beta]$$

Substituindo os termos v_1 , v_2 , c_1 e c_2 , tem-se:

$$\begin{aligned}
\overline{vc^\phi} &= \sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \left[[(1-n)(C_p - C_n)(1-\alpha_c)]^\phi n\beta \right. \\
&\quad \left. + [-n(C_p - C_n)(1-\alpha_c)]^\phi (1-n)(1-\beta) \right] \\
&\quad - \sqrt{\overline{v^2}} \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \left[[(1-n)(C_p - C_n)(1-\alpha_c)]^\phi n(1-\beta) \right. \\
&\quad \left. + [-n(C_p - C_n)(1-\alpha_c)]^\phi (1-n)\beta \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \overline{vc^\phi} = \sqrt{\frac{-}{v^2}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \left[(1 - n)^\phi (C_p - C_n)^\phi (1 - \alpha_c)^\phi n\beta \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^\phi n^\phi (C_p - C_n)^\phi (1 - \alpha_c)^\phi (1 - n)(1 - \beta) \right] \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \left[(1 - n)^\phi (C_p - C_n)^\phi (1 - \alpha_c)^\phi n(1 - \beta) \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^\phi n^\phi (C_p - C_n)^\phi (1 - \alpha_c)^\phi (1 - n)\beta \right] \right\} \end{aligned}$$

Ao evidenciar os termos em comum:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \overline{vc^\phi} = (1 - \alpha_c)^\phi (C_p - C_n)^\phi \sqrt{\frac{-}{v^2}} \left\{ n(1 - n) \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \left[(1 - n)^{\phi-1} \beta \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^\phi n^{\phi-1} (1 - \beta) \right] \right. \\ \left. - n(1 - n) \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \left[(1 - n)^{\phi-1} (1 - \beta) \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^\phi n^{\phi-1} \beta \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \overline{vc^\phi} = n(1 - n)(1 - \alpha_c)^\phi (C_p - C_n)^\phi \sqrt{\frac{-}{v^2}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \left[(1 - n)^{\phi-1} \beta \right. \right. \\ \left. \left. + (-1)^\phi n^{\phi-1} (1 - \beta) \right] \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \left[(1 - n)^{\phi-1} (1 - \beta) + (-1)^\phi n^{\phi-1} \beta \right] \right\} \end{aligned}$$

Essa é a equação geral pra o fluxo de massa turbulento, onde a oscilação da concentração está elevada a um expoente ϕ qualquer. Se, por exemplo, $\phi = 2$, tem-se que:

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \overline{vc^2} = n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left\{ \sqrt{\frac{\beta+n-2\beta n}{1-(\beta+n-2\beta n)}} [(1-n)\beta \right. \\
&\quad \left. + n(1-\beta)] - \sqrt{\frac{1-(\beta+n-2\beta n)}{\beta+n-2\beta n}} [(1-n)(1-\beta) + n\beta] \right\} \\
&\Rightarrow \overline{vc^2} = n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left\{ (\beta+n-2\beta n) \sqrt{\frac{\beta+n-2\beta n}{1-(\beta+n-2\beta n)}} \right. \\
&\quad \left. - [1-(\beta+n-2\beta n)] \sqrt{\frac{1-(\beta+n-2\beta n)}{\beta+n-2\beta n}} \right\} \\
&\Rightarrow \overline{vc^2} \\
&= n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p \\
&- C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left[\frac{(\beta+n-2\beta n)(\sqrt{\beta+n-2\beta n})^2 - [1-(\beta+n-2\beta n)](\sqrt{1-(\beta+n-2\beta n)})^2}{\sqrt{1-(\beta+n-2\beta n)}\sqrt{\beta+n-2\beta n}} \right] \\
&\Rightarrow \overline{vc^2} = n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p \\
&- C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left[\frac{(\beta+n-2\beta n)^2 - [1-(\beta+n-2\beta n)]^2}{\sqrt{1-(\beta+n-2\beta n)}\sqrt{\beta+n-2\beta n}} \right] \\
&\Rightarrow \overline{vc^2} \\
&= n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p \\
&- C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left[\frac{(\beta+n-2\beta n)^2 - 1 + 2(\beta+n-2\beta n) - (\beta+n-2\beta n)^2}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \right] \\
&\Rightarrow \overline{vc^2} = n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left[\frac{-1 + 2(\beta+n-2\beta n)}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \right] \\
&\Rightarrow \overline{vc^2} = n(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \sqrt{\frac{1}{v^2}} \left[\frac{(1-2n)(2\beta-1)}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \right]
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^2} = \frac{n(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}}$$

Sendo esta a expressão para o fluxo de massa turbulento com expoente 02 na concentração.

O princípio se aplica a outros expoentes, por exemplo, para o segundo modelo que seria gerado a partir do sistema 3.08 também seria necessário encontrar para o expoente 04 na concentração, desta forma:

$$\begin{aligned} \overline{vc^4} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2} \left\{ \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} [(1-n)^3 \beta \right. \\ &\quad \left. + n^3(1-\beta)] - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} [(1-n)^3(1-\beta) + n^3 \beta] \right\} \\ \Rightarrow \overline{vc^4} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2} \left\{ \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} [(1 - 3n + 3n^2 \right. \\ &\quad \left. - n^3)\beta + n^3 - \beta n^3] \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} [(1 - 3n + 3n^2 - n^3)(1-\beta) + n^3 \beta] \right\} \\ \Rightarrow \overline{vc^4} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2} \left\{ \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} [\beta - 3n\beta + 3n^2\beta \right. \\ &\quad \left. - 2\beta n^3 + n^3] \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} [1 - 3n + 3n^2 - n^3 - \beta + 3n\beta - 3n^2\beta \right. \\ &\quad \left. + 2\beta n^3] \right\} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{(\beta+n-2\beta n) - (\beta+n-2\beta n)^2}} \{(\beta+n-2\beta n)[\beta-3n\beta+3n^2\beta - 2\beta n^3 + n^3] - [1-(\beta+n-2\beta n)][1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3]\}$$

Com certo algebrismo no denominador, devidamente utilizado anteriormente:

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{(\beta+n-2\beta n)[\beta-3n\beta+3n^2\beta - 2\beta n^3 + n^3] - [1-(\beta+n-2\beta n)][1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3]\}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{(\beta+n-2\beta n)[\beta-3n\beta+3n^2\beta - 2\beta n^3 + n^3] - [1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3] + (\beta+n-2\beta n)[1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3]\}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{(\beta+n-2\beta n)[\beta-3n\beta+3n^2\beta - 2\beta n^3 + n^3 + 1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3] - [1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3]\}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{(\beta+n-2\beta n)[1-3n+3n^2] - [1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3]\}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{[\beta-3n\beta+3\beta n^2+n-3n^2+3n^3 - 2\beta n + 6\beta n^2 - 6\beta n^3] - [1-3n+3n^2-n^3-\beta+3n\beta-3n^2\beta + 2\beta n^3]\}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{ \beta - 3n\beta + 3\beta n^2 + n - 3n^2 + 3n^3 \\ - 2\beta n + 6\beta n^2 - 6\beta n^3 - 1 + 3n - 3n^2 + n^3 + \beta - 3n\beta + 3n^2\beta \\ - 2\beta n^3 \}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} \{ 2\beta - 8n\beta + 12\beta n^2 + 4n - 6n^2 + 4n^3 \\ - 8\beta n^3 - 1 \}$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n)(1-2\beta)^2 + \beta(1-\beta)}} (2\beta - 1)(1 - 4n + 6n^2 - 4n^3)$$

$$\Rightarrow \overline{vc^4} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)^4(C_p - C_n)^4 \sqrt{v^2}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}} (1 - 4n + 6n^2 - 4n^3)$$

APÊNDICE IV: derivadas parciais para a concentração média.

Segundo a equação 2.11, tem-se que:

$$\overline{C}_z = nC_p + (1 - n)C_n$$

Então, derivando-a parcialmente em relação a z , por exemplo, independente da ordem da derivada, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^o \overline{C}_z}{\partial z^o} &= \frac{\partial^o (C_p n + C_n (1 - n))}{\partial z^o} \\ \Rightarrow \frac{\partial^o \overline{C}_z}{\partial z^o} &= \frac{\partial^o C_p n}{\partial z^o} + \frac{\partial^o C_n (1 - n)}{\partial z^o} \end{aligned}$$

Ao lembrar que C_n e C_p são constantes em relação à z , pode-se retirá-los das derivadas parciais, enquanto que a função de partição varia ao longo da coordenada espacial, conforme já foi discutido anteriormente, assim:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^o \overline{C}_z}{\partial z^o} &= C_p \frac{\partial^o n}{\partial z^o} + C_n \frac{\partial^o (1 - n)}{\partial z^o} \\ \Rightarrow \frac{\partial^o \overline{C}_z}{\partial z^o} &= (C_p - C_n) \frac{\partial^o n}{\partial z^o} \end{aligned}$$

Com relação à variação no tempo, as derivadas parciais podem ser obtidas pelo mesmo procedimento, lembrando, contudo, que tanto o C_p e C_n podem variar no tempo, como o \overline{C}_z , já que este depende dos valores daqueles.

No entanto, o valor do n será constante em relação ao tempo de uma maneira geral, já que sendo um coeficiente de ponderação, ele só dependerá das coordenadas espaciais. Isto porque mesmo com a média mais próxima de um dos extremos, o que representa um P ou N reduzido, o tempo que a concentração de oscilação estará acima ou abaixo da média não irá variar temporalmente.

Para entender melhor isso, deve-se analisar a seguinte situação onde a concentração C_p aumentaria, mas a C_n permaneceria constante, ao longo do tempo para um mesmo z .

Nessa situação, ao aumentar o C_p a concentração média também aumentaria e o valor de P reduziria e o de N aumentaria.

No entanto, consegue-se perceber que a amplitude de oscilação diminuiria, mas o coeficiente de ponderação permaneceria inalterado, pois, como o z não se altera, a proporção de tempo acima da média e abaixo da média não se altera; já que a situação permanece em equilíbrio, o mesmo ocorre com o α_c , que permaneceria constante, ou praticamente, ao longo do tempo, só alterando em relação às variáveis dimensionais.

Enfim, a derivada parcial temporal da concentração média pode ser obtida ao derivar parcialmente a equação 2.11 em relação ao tempo, assim pode ser descrita como:

$$\frac{\partial \bar{C}_z}{\partial t} = n \frac{\partial C_p}{\partial t} + (1 - n) \frac{\partial C_n}{\partial t}$$

Pode-se então substituir a expressão 2.32 e, ressaltando que se considera que: $\frac{\partial C_p}{\partial t} = 0$, nessa equação, onde se obterá:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}_z}{\partial t} &= (1 - n)K(C_p - C_n) \\ \Rightarrow \frac{\partial \bar{C}_z}{\partial t} &= K(1 - n)(C_p - C_n) \end{aligned}$$

APÊNDICE V: derivadas parciais para oscilações exponenciais médias.

De maneira análoga ao Apêndice IV, aplica-se para a derivada parcial da média das oscilações a um expoente qualquer (ϕ), onde:

$$\overline{c^\phi} = n \cdot c_1^\phi + (1 - n) \cdot c_2^\phi$$

Assim, com relação à z , para uma derivada de ordem O qualquer:

$$\frac{\partial^O \overline{c^\phi}}{\partial z^O} = \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} = \frac{\partial^O (n \cdot c_1^\phi + (1 - n) \cdot c_2^\phi)}{\partial z^O}$$

Retirando os termos constantes em z :

$$\Rightarrow \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} = \left[\frac{\partial^O (n \cdot c_1^\phi)}{\partial z^O} + \frac{\partial^O ((1 - n) \cdot c_2^\phi)}{\partial z^O} \right]$$

Ao aplicar a regra do produto e da soma repetidamente em conjunto com a regra da cadeia, têm-se as seguintes etapas:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} &= \left[n \cdot \frac{\partial^O c_1^\phi}{\partial z^O} + c_1^\phi \frac{\partial^O n}{\partial z^O} + (1 - n) \frac{\partial^O c_2^\phi}{\partial z^O} + c_2^\phi \frac{\partial^O (1 - n)}{\partial z^O} \right] \\ \Rightarrow \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} &= \left[n \cdot \frac{\partial^O c_1^\phi}{\partial z^O} + c_1^\phi \frac{\partial^O n}{\partial z^O} + (1 - n) \frac{\partial^O c_2^\phi}{\partial z^O} + c_2^\phi \frac{\partial^O (1 - n)}{\partial z^O} \right] \\ \Rightarrow \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} &= \left[n \cdot \frac{\partial^O c_1^\phi}{\partial z^O} + c_1^\phi \frac{\partial^O n}{\partial z^O} + (1 - n) \frac{\partial^O c_2^\phi}{\partial z^O} - c_2^\phi \frac{\partial^O n}{\partial z^O} \right] \\ \Rightarrow \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} &= \left[n \cdot \frac{\partial^O c_1^\phi}{\partial z^O} + (c_1^\phi - c_2^\phi) \frac{\partial^O n}{\partial z^O} + (1 - n) \frac{\partial^O c_2^\phi}{\partial z^O} \right] \\ \Rightarrow \frac{\overline{\partial^O c^\phi}}{\partial z^O} &= \left[n \cdot \left(\frac{\partial^O c_1^\phi}{\partial z^O} - \frac{\partial^O c_2^\phi}{\partial z^O} \right) + (c_1^\phi - c_2^\phi) \frac{\partial^O n}{\partial z^O} + \frac{\partial^O c_2^\phi}{\partial z^O} \right] \end{aligned}$$

Substituindo as expressões 2.20 e 2.21, tem-se:

$$\begin{aligned}
\overline{\frac{\partial^o c \phi}{\partial z^o}} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n \cdot \left[\frac{\partial^o (1-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} - \frac{\partial^o (-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right] \right. \\
&\quad + \left. \left[(1-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi - (-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi \right] \frac{\partial^o n}{\partial z^o} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^o (-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right\} \\
\Rightarrow \overline{\frac{\partial^o c \phi}{\partial z^o}} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n \cdot \left[(1-n)^\phi \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} + (1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o (1-n)^\phi}{\partial z^o} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (-n)^\phi \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} - (1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o (-n)^\phi}{\partial z^o} \right] \right. \\
&\quad + \left. \left[(1-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi - (-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi \right] \frac{\partial^o n}{\partial z^o} + (-n)^\phi \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right. \\
&\quad \left. + (1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o (-n)^\phi}{\partial z^o} \right\} \\
\Rightarrow \overline{\frac{\partial^o c \phi}{\partial z^o}} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n \cdot \left[\left((1-n)^\phi - (-n)^\phi \right) \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (1-\alpha_c)^\phi \left(\frac{\partial^o (1-n)^\phi}{\partial z^o} - \frac{\partial^o (-n)^\phi}{\partial z^o} \right) \right] \right. \\
&\quad + \left. \left[(1-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi - (-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi \right] \frac{\partial^o n}{\partial z^o} + (-n)^\phi \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right. \\
&\quad \left. + (1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o (-n)^\phi}{\partial z^o} \right\}
\end{aligned}$$

Se os termos de c_1 e c_2 forem substituídos no começo, ou seja, utilizando a expressão 2.23 desde o início, tem-se que:

$$\overline{\frac{\partial^o c \phi}{\partial z^o}} = \frac{\partial^o \left(n(1-n)(C_p - C_n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \right)}{\partial z^o}$$

Portanto:

$$\begin{aligned}
\overline{\frac{\partial^o c \phi}{\partial z^o}} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o \left((1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1} \right)}{\partial z^o} \right. \\
&\quad \left. + \left[(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1} \right] \frac{\partial^o \left(n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi \right)}{\partial z^o} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\overline{\partial^o c^\phi}}{\partial z^o} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi \left[\frac{\partial^o (1-n)^{\phi-1}}{\partial z^o} + \frac{\partial^o (-1)^\phi n^{\phi-1}}{\partial z^o} \right] \right. \\ &\quad + [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \left[(1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o n(1-n)}{\partial z^o} \right. \\ &\quad \left. \left. + n(1-n) \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right] \right\} \end{aligned}$$

Pode-se resumir a equação acima ao se conhecer a ordem da derivada. Ainda podem ser feitas algumas simplificações, no entanto a forma final mais clara pode ser descrita apenas retirando o termo constante em relação à z , assim:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\partial^o c^\phi}}{\partial z^o} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi \left[\frac{\partial^o (1-n)^{\phi-1}}{\partial z^o} + (-1)^\phi \frac{\partial^o n^{\phi-1}}{\partial z^o} \right] \right. \\ &\quad + [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \left[(1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^o n(1-n)}{\partial z^o} \right. \\ &\quad \left. \left. + n(1-n) \frac{\partial^o (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^o} \right] \right\} \end{aligned}$$

Com relação à derivada parcial de primeira ordem temporal o procedimento é análogo a este e mais simples, assim:

$$\frac{\overline{\partial c^\phi}}{\partial t} = n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \frac{\partial (C_p - C_n)^\phi}{\partial t}$$

Pela regra da cadeia, a derivada parcial pode ser decomposta, assim:

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\partial c^\phi}}{\partial t} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \left[\phi \cdot (C_p - C_n)^{\phi-1} \frac{\partial (C_p - C_n)}{\partial t} \right] \\ \Rightarrow \frac{\overline{\partial c^\phi}}{\partial t} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] \phi \cdot (C_p - C_n)^{\phi-1} \left(\frac{\partial C_p}{\partial t} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial C_n}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

Substituindo as relações das derivadas parciais restantes (2.32 e 2.33), encontra-se que:

$$\Rightarrow \frac{\overline{\partial c^\phi}}{\partial t} = -Kn\phi(1-n)(1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] (C_p - C_n)^\phi$$

Vale ressaltar que esta derivada temporal poderia ter sido feita com outra ordem, no entanto, no momento, detém-se a análise mais simples como demonstração.

Outra ressalva importante é com relação às expressões encontradas com a substituição inicial de c_1 e c_2 é que nela não se computam a ordem da derivada, importante para o caso de derivadas espaciais, onde a ordem tende a ser diferente de 01.

Assim, ambas as expressões para derivadas espaciais podem ser utilizadas com uma ressalva de que expoente deve ser diferente de um, pois nesse caso a derivada é anulada ao utilizar a segunda expressão, já que desde o princípio a oscilação já está nula, sem levar em conta a ordem da derivada. Por isso, dar-se-á preferência à primeira expressão gerada para as espaciais.

Resumindo, as expressões a serem utilizadas serão:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \overline{\frac{\partial^0 c^\phi}{\partial z^0}} &= (C_p - C_n)^\phi \left\{ n \cdot \left[((1-n)^\phi - (-n)^\phi) \frac{\partial^0 (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^0} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1-\alpha_c)^\phi \left(\frac{\partial^0 (1-n)^\phi}{\partial z^0} - \frac{\partial^0 (-n)^\phi}{\partial z^0} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + [(1-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi - (-n)^\phi (1-\alpha_c)^\phi] \frac{\partial^0 n}{\partial z^0} + (-n)^\phi \frac{\partial^0 (1-\alpha_c)^\phi}{\partial z^0} \right. \\ &\quad \left. + (1-\alpha_c)^\phi \frac{\partial^0 (-n)^\phi}{\partial z^0} \right\} \\ \frac{\partial c^\phi}{\partial t} &= -Kn\phi(1-n)(1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] (C_p - C_n)^\phi \end{aligned}$$

Tendo sido feita a devida ressalva nos procedimentos para esclarecimento.

APÊNDICE VI: produtos entre flutuações e derivadas.

De acordo com o proposto no item 2.4.4, tem-se como ponto de partida:

$$\overline{c^{\phi_1} \frac{\partial^O c^{\phi_2}}{\partial z^O}} = n c_1^{\phi_1} \frac{\partial^O c_1^{\phi_2}}{\partial z^O} + (1-n) c_2^{\phi_1} \frac{\partial^O c_2^{\phi_2}}{\partial z^O}$$

Substituindo as expressões 2.20 e 2.21, tem-se:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \overline{c^{\phi_1} \frac{\partial^O c^{\phi_2}}{\partial z^O}} &= n(1-n)^{\phi_1} (C_p - C_n)^{\phi_1} (1 - \alpha_c)^{\phi_1} \frac{\partial^O (1-n)^{\phi_2} (C_p - C_n)^{\phi_2} (1 - \alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} + (1 - n)(-n)^{\phi_1} (C_p - C_n)^{\phi_1} (1 - \alpha_c)^{\phi_1} \frac{\partial^O (-n)^{\phi_2} (C_p - C_n)^{\phi_2} (1 - \alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} \\ \Rightarrow c^{\phi_1} \frac{\partial^O c^{\phi_2}}{\partial z^O} &= n(1-n)^{\phi_1} (C_p - C_n)^{(\phi_1 + \phi_2)} (1 - \alpha_c)^{\phi_1} \frac{\partial^O (1-n)^{\phi_2} (1 - \alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} + (1-n)(-n)^{\phi_1} (C_p - C_n)^{(\phi_1 + \phi_2)} (1 - \alpha_c)^{\phi_1} \frac{\partial^O (-n)^{\phi_2} (1 - \alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} \\ \Rightarrow \overline{c^{\phi_1} \frac{\partial^O c^{\phi_2}}{\partial z^O}} &= n(1-n)(1 - \alpha_c)^{\phi_1} (C_p - C_n)^{(\phi_1 + \phi_2)} \left[(1-n)^{\phi_1 - 1} \frac{\partial^O (1-n)^{\phi_2} (1 - \alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} + (-n)^{\phi_1 - 1} \frac{\partial^O (-n)^{\phi_2} (1 - \alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^O} \right] \end{aligned}$$

APÊNDICE VII: parametrização por partes para o primeiro modelo.

O primeiro modelo é proposto originalmente pelas equações dos balanços de momentos centrais de primeira ordem (equação básica de transferência de massa em processo turbulento) e de segunda ordem, assim:

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \overline{v_z c} \right) \\ \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{c^2}}{\partial t} + \overline{v_z c} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{v_z c^2}}{\partial z} = D \left(c \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \end{cases}$$

Para aplicar o processo de parametrização por partes é necessário revisar algumas equações paramétricas já deduzidas no presente trabalho, sendo destacadas:

- Fluxos Turbulentos:

Para o primeiro modelo podem ser observados dois tipos distintos de fluxo, assim:

I. $\overline{v_z c}$: $\phi = 1$;

Conforme já disposto no Apêndice III:

$$\overline{v_z c} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)\sqrt{\overline{v^2}}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}}$$

II. $\overline{v_z c^2}$: $\phi = 2$;

Conforme disposto no Apêndice III:

$$\overline{v_z c^2} = \frac{n(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2\sqrt{\overline{v^2}}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}}$$

$$\Rightarrow \overline{v_z c^2} = (1-2n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)\overline{v_z c}$$

- Derivadas:

$$\frac{\partial^0 \bar{C}}{\partial z^0} = (C_p - C_n) \frac{\partial^0 n}{\partial z^0}$$

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = K(1-n)(C_p - C_n)$$

$$\frac{\partial \bar{C}^\phi}{\partial t} = -Kn\phi(1-n)(1-\alpha_c)^\phi [(1-n)^{\phi-1} + (-1)^\phi n^{\phi-1}] (C_p - C_n)^\phi$$

Já com relação às derivadas, são notados três tipos diferentes, assim:

I. $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}$:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = K(1-n)(C_p - C_n)$$

II. $\frac{\partial \bar{C}}{\partial z}$: $O = 1$;

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = (C_p - C_n) \frac{\partial n}{\partial z}$$

III. $\frac{\partial \bar{C}^2}{\partial t}$: $\phi = 2$;

$$\frac{\partial \bar{C}^2}{\partial t} = -2Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2 [(1-n)^1 + (-1)^2 n^1] (C_p - C_n)^2$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \bar{C}^2}{\partial t} = -2Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2 (C_p - C_n)^2$$

- Produtos entre Flutuações e Derivadas:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \overline{c^{\phi_1} \frac{\partial^0 c^{\phi_2}}{\partial z^0}} &= n(1-n)(1-\alpha_c)^{\phi_1} (C_p \\ &\quad - C_n)^{(\phi_1 + \phi_2)} \left[(1-n)^{\phi_1 - 1} \frac{\partial^0 (1-n)^{\phi_2} (1-\alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^0} \right. \\ &\quad \left. + (-n)^{\phi_1 - 1} \frac{\partial^0 (-n)^{\phi_2} (1-\alpha_c)^{\phi_2}}{\partial z^0} \right] \end{aligned}$$

Já o produto entre flutuação de concentração e derivada, só há um caso evidenciado, assim $\phi_1 = 1$, $\phi_2 = 1$ e $O = 2$:

$$\overline{c \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}} = n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)^2 \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right]$$

Por consequência, podem ser geradas as equações parametrizadas para o primeiro modelo, sendo a primeira equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \overline{v_z c} \right) \\ \Rightarrow K(1-n)(C_p - C_n) &= \frac{\partial}{\partial z} \left[D(C_p - C_n) \frac{\partial n}{\partial z} - \overline{v_z c} \right] \\ \Rightarrow K(1-n)(C_p - C_n) &= \left[(C_p - C_n) D \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial n}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \right] \end{aligned}$$

Se a difusividade é constante em relação à z :

$$\begin{aligned} \Rightarrow K(1-n)(C_p - C_n) &= \left[D(C_p - C_n) \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \right] \\ \Rightarrow K(1-n) &= \left[D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \right] \end{aligned}$$

Para uma análise mais detalhada do comportamento em função da variação ao longo de um z , de forma a analisar o contexto na camada limite, propõe-se um coeficiente z^* , definido com uma razão entre a posição z e a espessura total da camada e .

Isso facilita a análise, já que monta uma situação adimensional, além de destacar o comportamento do coeficiente. Em ambos os casos a análise seria válida, no entanto se busca aqui uma ferramenta facilitadora da análise. Assim:

$$K(1-n) = \left[D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \right] = \left[\frac{D}{e^2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - \frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \right]$$

$$\Rightarrow (1 - n) = \left[\frac{D}{Ke^2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - \frac{1}{Ke} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \right]$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \right) = \left[\frac{D}{Ke^2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right]$$

Já a segunda equação pode ser representada por:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \overline{c^2}}{\partial t} + \overline{v_z c} \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{v_z c^2}}{\partial z} = D \left(c \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2} \left[-2Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \right] + \overline{v_z c} \left[(C_p - C_n) \frac{\partial n}{\partial z} \right]$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left((1-2n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n) \overline{v_z c} \right)$$

$$= D \left\{ n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)^2 \left[\frac{\partial^2 (1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{\partial^2 (-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right] \right\}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2} \left[-2Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \right] + \overline{v_z c} \left[(C_p - C_n) \frac{\partial n}{\partial z} \right]$$

$$+ \frac{(C_p - C_n)}{2} \left[(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \right.$$

$$\left. + \overline{v_z c} \frac{\partial}{\partial z} \left((1-2n)(1-\alpha_c) \right) \right]$$

$$= D \left\{ n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)^2 \left[\frac{\partial^2 (1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{\partial^2 (-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \frac{1}{2} \left[-2Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 \right] + \overline{v_z c} \left[(C_p - C_n) \frac{\partial n}{\partial z} \right] \\
&\quad + \frac{(C_p - C_n)}{2} \left\{ (1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \right. \\
&\quad \left. - \overline{v_z c} \left[(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} + 2(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z} \right] \right\} \\
&= D \left\{ n(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)^2 \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n)^2 + \overline{v_z c} (C_p - C_n) \frac{\partial n}{\partial z} \\
&\quad + \frac{(C_p - C_n)}{2} \left\{ (1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \right. \\
&\quad \left. - \overline{v_z c} \left[(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} + 2(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z} \right] \right\} \\
&= Dn(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n)^2 \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n) + \overline{v_z c} \frac{\partial n}{\partial z} \\
&\quad + \frac{1}{2} \left\{ (1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \right. \\
&\quad \left. - \overline{v_z c} \left[(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} + 2(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z} \right] \right\} \\
&= Dn(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n) + \overline{v_z c} \frac{\partial n}{\partial z} + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \\
&\quad - \overline{v_z c} \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} - \overline{v_z c} (1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z} \\
&= Dn(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right] \\
&\Rightarrow -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n) + \overline{v_z c} \left[\frac{\partial n}{\partial z} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} - (1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z} \right] \\
&\quad + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \\
&= Dn(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right] \\
&\Rightarrow -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2(C_p - C_n) + \overline{v_z c} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} \right] \\
&\quad + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z} (\overline{v_z c}) \\
&= Dn(1-n)(1-\alpha_c)(C_p - C_n) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right] \\
&\Rightarrow -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2 + \frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z} \right] \\
&\quad + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \\
&= Dn(1-n)(1-\alpha_c) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^2} \right]
\end{aligned}$$

Aplicando o mesmo procedimento de substituição de z , onde $z = ez^*$, tem-se que:

$$\begin{aligned}
& -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2 + \frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2e} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\
& + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2e} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \\
& = Dn(1-n)(1-\alpha_c) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{e^2 \partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{e^2 \partial z^{*2}} \right] \\
\Rightarrow & -Kn(1-n)(1-\alpha_c)^2 + \frac{\overline{v_z c}}{e(C_p - C_n)} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\
& + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2e} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \\
& = \frac{Dn(1-n)(1-\alpha_c)}{e^2} \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right]
\end{aligned}$$

Dividindo todos os termos pela constante K :

$$\begin{aligned}
\Rightarrow & -n(1-n)(1-\alpha_c)^2 + \frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\
& + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2Ke} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{(C_p - C_n)} \right) \\
& = \frac{Dn(1-n)(1-\alpha_c)}{Ke^2} \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right]
\end{aligned}$$

Reorganizando:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow & -n(1-n)(1-\alpha_c)^2 + \frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\
& + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\overline{v_z c}}{Ke(C_p - C_n)} \right) \\
& = \frac{Dn(1-n)(1-\alpha_c)}{Ke^2} \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right]
\end{aligned}$$

Substituindo em ambas as equações os termos recorrentes por um parâmetro base e um coeficiente qualquer, onde:

$$P_{base}^1 = \frac{\overline{v_z \bar{c}}}{Ke(C_p - C_n)} = \frac{n(1-n)(1-\alpha_c)\sqrt{v^2}}{Ke \sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(1-2\beta)^2}}}$$

$$S = \frac{D}{Ke^2}$$

Então a primeira e segunda equação resultam em, respectivamente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z^*}(P_{base}^1) &= \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \\ &-n(1-n)(1-\alpha_c)^2 + P_{base}^1 \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\ &+ \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial}{\partial z^*}(P_{base}^1) \\ &= Sn(1-n)(1-\alpha_c) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right] \end{aligned}$$

Neste ponto é importante unir as duas equações em uma única de modo a representar o fenômeno. Desta forma, faz-se uso da regra da substituição para a resolução de sistemas.

A regra da substituição pode ser aplicada a qualquer termo presente em ambas as equações. Um problema surge com a escolha do termo, pois termos não elementares podem ter parcelas equivalentes que não estão claramente evidenciadas e que também necessitariam ser substituídas no procedimento.

A fim de evitar tal complicação futura, escolhe-se trabalhar com o isolamento do P_{base}^1 , já que o termo não se repete e ainda evidencia inúmeras variáveis do sistema que se repetem ao longo das equações. Portanto, ao substituir a derivada evidenciada da primeira na segunda equação:

$$\begin{aligned}
& -n(1-n)(1-\alpha_c)^2 + P_{base}^1 \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\
& \quad + \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \\
& = Sn(1-n)(1-\alpha_c) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right]
\end{aligned}$$

Isolando o termo de P_{base}^1 , tem-se:

$$\begin{aligned}
& P_{base}^1 \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \\
& = Sn(1-n)(1-\alpha_c) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right] \\
& \quad + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 - \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \\
\Rightarrow P_{base}^1 & = \frac{1}{\left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]} \left\{ Sn(1-n)(1-\alpha_c) \left[\frac{\partial^2(1-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{\partial^2(-n)(1-\alpha_c)}{\partial z^{*2}} \right] + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \right. \\
& \quad \left. - \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \right\} \\
\Rightarrow P_{base}^1 & = \frac{1}{\left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]} \left\{ Sn(1-n)(1-\alpha_c) \left[4 \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 2(1 \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - \alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \right. \\
& \quad \left. - \frac{(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow P_{base}^1 = & \frac{1}{\left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]} \left\{ 4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right. \\ & - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \\ & + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\ & \left. + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right\} \end{aligned}$$

Pode-se, então, substituir este termo na primeira equação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z'} \left(\frac{1}{\left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]} \left\{ 4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right. \right. \\ - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \\ + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\ \left. \left. + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right\} \right) = \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \frac{1}{\left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*}\right]^2} \left\{ \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} \right. \right. \\
&\quad - \left. \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \frac{\partial}{\partial z^*} \left(4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right. \\
&\quad - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \\
&\quad + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad \left. \left. - \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right) \right. \\
&\quad - \left[4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
&\quad \left. - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right] \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) \left. \right\} \\
&= \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left\{ \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)\partial\alpha_c}{2} \right] \frac{\partial}{\partial z^*} \left(4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right. \right. \\
&\quad - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \\
&\quad + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad \left. - \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right) \\
&\quad - \left[4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
&\quad \left. - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right] \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)\partial\alpha_c}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) \Big\} \\
&= \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)\partial\alpha_c}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left\{ \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)\partial\alpha_c}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} \right] \left[\frac{\partial}{\partial z^*} \left(4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) \right. \right. \\
&\quad - 2S \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right) \\
&\quad - S \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right) \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial z^*} (n(1-n)(1-\alpha_c)^2) - \frac{S}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} \left((1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right) \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} ((1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)) \right] \\
&\quad - \left[4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
&\quad - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad \left. + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right] \left[\frac{\partial}{\partial z^*} \left(\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{(1-2n)\partial\alpha_c}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \right] \Big\} \\
&= \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)\partial\alpha_c}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left\{ \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \left[8S \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) \right. \right. \\
&\quad - 4S \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right) \\
&\quad - 2S \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right) \\
&\quad + 2 \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \right) - S \frac{\partial}{\partial z^*} \left((1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right) \\
&\quad \left. + \frac{\partial}{\partial z^*} \left((1-n)(1-2n)(1-\alpha_c) \right) \right] \\
&\quad - \left[4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
&\quad - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad \left. + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right] \left[2 \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial}{\partial z^*} \left((1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) \right] \Big\} \\
&= 2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

Ao trabalhar com as oito derivadas compostas em destaque acima de forma separada, tem-se que:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) \\
&= (1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \left[n(1-n) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (1-2n) \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \right] \\
&+ n(1-n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} - \left(\frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right)^2 \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right) \\ &= (1-\alpha_c)^2(1-2n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - 2(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + n(1 \\ & \quad - n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z^*} \left(n(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right) \\ &= (1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} [1-6n+6n^2] \\ & \quad + n(1-n)(1-2n) \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 \alpha_c}{\partial z^{*3}} - \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial z^*} (n(1-n)(1-\alpha_c)^2) = (1-2n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial n}{\partial z^*} - 2n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z^*} \left((1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right) \\ &= (1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} - 2(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 \\ & \quad - 2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial z^*} ((1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)) = (4n-3)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} - (1-n)(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*}$$

$$\frac{\partial}{\partial z^*} \left(\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} \right) = \alpha_c \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*}$$

$$\frac{\partial}{\partial z^*} \left((1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right) = (1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} - 2 \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial n}{\partial z^*}$$

Substituindo as derivadas compostas pelas suas equações equivalentes na equação do modelo, encontra-se:

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left\{ \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \left\{ 8S(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \left[n(1-n) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (1-2n) \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \right] \right. \right. \\
&\quad + 8Sn(1-n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} - \left(\frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right)^2 \right] \\
&\quad - 4S(1-\alpha_c)^2(1-2n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + 8S(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad - 4Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \\
&\quad - 2S(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} [1-6n+6n^2] \\
&\quad - 2Sn(1-n)(1-2n) \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 \alpha_c}{\partial z^{*3}} - \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
&\quad + 2(1-2n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial n}{\partial z^*} - 4n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \\
&\quad - S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} + 2S(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad + S(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (4n-3)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \\
&\quad \left. - (1-n)(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right\} \\
&\quad - \left[4Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad - Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
&\quad \left. - \frac{S(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + \frac{(1-n)(1-2n)(1-\alpha_c)}{2} \right] \left[2\alpha_c \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - (1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + 2 \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial n}{\partial z^*} \right] \\
&= 2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

Nota-se que todas as derivadas parciais estão derivando apenas uma função de z^* , portanto se pode indicar que esta equação já está pronta para ser discretizada.

No entanto, há como melhorar a sua apresentação, bem como reduzir o número de parcelas, desta forma:

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left\{ \left[2\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - (1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \left\{ 8S(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} [n(1-n) + 1] \right. \right. \\
&\quad + 8S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \\
&\quad + 2S(-1+10n-10n^2)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \\
&\quad - 8Sn(1-n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \left(\frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right)^2 - 4S(1-\alpha_c)^2(1-2n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad - S(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} [4n(1-n)(1-\alpha_c) + (1-2n)] \\
&\quad - 2Sn(1-n)(1-2n) \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 \alpha_c}{\partial z^{*3}} - \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
&\quad + 2(1-2n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial n}{\partial z^*} - 4n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \\
&\quad + 2S(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + S(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad \left. + (4n-3)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} - (1-n)(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right\} \\
&\quad - \left[8Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 4Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + 2n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
&\quad \left. - S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (1-n)(1-2n)(1-\alpha_c) \right] \left[2\alpha_c \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad \left. + 4 \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - (1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
&= 4 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

Esta é a expressão geral para o primeiro modelo.

APÊNDICE VIII: equações para primeira simulação.

A primeira simulação contará com um amplo conjunto de equações básicas, já que ao analisar cada função paramétrica, serão considerados constantes os demais de forma a gerar uma análise de sensibilidade de cada um.

A equação base utilizada, deduzida no Apêndice VII é:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow & \left\{ \left[2\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - (1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right] \left\{ 8S(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} [n(1-n) + 1] \right. \right. \\
& + 8S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \\
& + 2S(-1+10n-10n^2)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} - 8Sn(1-n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \left(\frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right)^2 \\
& - 4S(1-\alpha_c)^2(1-2n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& - S(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} [4n(1-n)(1-\alpha_c) + (1-2n)] \\
& - 2Sn(1-n)(1-2n) \left[(1-\alpha_c) \frac{\partial^3 \alpha_c}{\partial z^{*3}} - \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
& + 2(1-2n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial n}{\partial z^*} - 4n(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \\
& + 2S(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + S(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (4n-3)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \\
& \left. - (1-n)(1-2n) \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right\} \\
& - \left[8Sn(1-n)(1-\alpha_c) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - 4Sn(1-n)(1-\alpha_c)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
& - 2Sn(1-n)(1-\alpha_c)(1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} + 2n(1-n)(1-\alpha_c)^2 \\
& \left. - S(1-2n)(1-\alpha_c) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (1-n)(1-2n)(1-\alpha_c) \right] \left[2\alpha_c \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
& \left. + 4 \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} - (1-2n) \frac{\partial^2 \alpha_c}{\partial z^{*2}} \right] \\
& = 4 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1-n) \right] \left[\alpha_c \frac{\partial n}{\partial z^*} - \frac{(1-2n)}{2} \frac{\partial \alpha_c}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

- Função de redução α_c constante (α_c^p)

$$\begin{aligned}
& \left\{ \left[2\alpha_c^p \frac{\partial n}{\partial z^*} \right] \left\{ -4S(1 - \alpha_c^p)^2(1 - 2n) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \right. \\
& \quad - S(1 - \alpha_c^p) \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} [4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \\
& \quad + 2(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p)^2 \frac{\partial n}{\partial z^*} + 2S(1 - \alpha_c^p) \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& \quad \left. \left. + (4n - 3)(1 - \alpha_c^p) \frac{\partial n}{\partial z^*} \right\} \right. \\
& \quad - \left[-4Sn(1 - n)(1 - \alpha_c^p)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + 2n(1 - n)(1 - \alpha_c^p)^2 \right. \\
& \quad \left. - S(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (1 - n)(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) \right] \left[2\alpha_c^p \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right] \Big\} \\
& = 4 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right] \left[\alpha_c^p \frac{\partial n}{\partial z^*} \right]^2
\end{aligned}$$

Assim:

$$\begin{aligned}
& \left\{ -4S(1 - \alpha_c^p)^2(1 - 2n) \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
& \quad - S(1 - \alpha_c^p) [4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \\
& \quad + 2(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p)^2 \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 + 2S(1 - \alpha_c^p) \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
& \quad \left. \left. + (4n - 3)(1 - \alpha_c^p) \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \right\} \right. \\
& \quad - \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \left[-4Sn(1 - n)(1 - \alpha_c^p)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + 2n(1 - n)(1 - \alpha_c^p)^2 \right. \\
& \quad \left. - S(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} + (1 - n)(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) \right] \\
& = 2\alpha_c^p \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow \left\{ -S(1 - \alpha_c^p)[4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \right. \\
&\quad + (1 - \alpha_c^p)[2(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) + (4n - 3)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \\
&\quad + 2S(1 - \alpha_c^p)[1 - 2(1 - \alpha_c^p)(1 - 2n)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \left. \right\} \\
&\quad - \left[-4Sn(1 - n)(1 - \alpha_c^p)^2 \left(\frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right)^2 + 2n(1 - n)(1 - \alpha_c^p)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right. \\
&\quad \left. - S(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) \left(\frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right)^2 + (1 - n)(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right] \\
&\quad = 2\alpha_c^p \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right] \\
&\Rightarrow \left\{ -S(1 - \alpha_c^p)[4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \right. \\
&\quad + (1 - \alpha_c^p)[2(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) + (4n - 3)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \\
&\quad + 2S(1 - \alpha_c^p)[1 - 2(1 - \alpha_c^p)(1 - 2n)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \left. \right\} \\
&\quad - \left[-S(1 - \alpha_c^p)[(1 - 2n) + 4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p)] \left(\frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + (1 - n)(1 - \alpha_c^p)[2n(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \right] \\
&\quad = 2\alpha_c^p \left(\frac{\partial n}{\partial z^*} \right)^2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Rightarrow -S(1 - \alpha_c^p)[4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial n}{\partial z^*} \frac{\partial^3 n}{\partial z^{*3}} \\
&\quad + (1 - \alpha_c^p)[2(1 - 2n)(1 - \alpha_c^p) + (4n - 3)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*}\right)^2 \\
&\quad + 2S(1 - \alpha_c^p)[1 - 2(1 - \alpha_c^p)(1 - 2n)] \left(\frac{\partial n}{\partial z^*}\right)^2 \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&\quad + S(1 - \alpha_c^p)[(1 - 2n) + 4n(1 - n)(1 - \alpha_c^p)] \left(\frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}}\right)^2 \\
&\quad - (1 - n)(1 - \alpha_c^p)[2n(1 - \alpha_c^p) + (1 - 2n)] \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} \\
&= 2\alpha_c^p \left(\frac{\partial n}{\partial z^*}\right)^2 \left[S \frac{\partial^2 n}{\partial z^{*2}} - (1 - n) \right]
\end{aligned}$$

APÊNDICE IX: tabelas resumos para a aplicação do método de Runge-Kutta.

a) Dados de Entrada:

Condições Iniciais			
$n(0)$	$n'(0)$	$n''(0)$	h
1	-	-	0,001

Valores Fixos			
S ----->	S	$= 1/S$	--> kappa
A ----->	A	$= 1 - A$	-----> alfa

b) Tabelas Gerais:

Ite	z^*	n	n'		
		x_i	x_i	$x_i + 0,5h$	$x_i + h$
i	z_i^*	a	k_0	$k_1 = k'_0 + c \cdot h$	$k_2 = k_0 - k'_0 \cdot h + 2 \cdot k'_1 h$
$i + 1$	$z_i^* + h$	$= a + h \cdot \frac{k_0 + 4k_1 + k_2}{6}$	$= k_0 + h \cdot \frac{k'_0 + 4k'_1 + k'_2}{6}$	\vdots	\vdots

Ite	z^*	n''			n'''		
		x_i	$x_i + 0,5h$	$x_i + h$	x_i	$x_i + 0,5h$	$x_i + h$
i	z_i^*	k'_0	$k'_1 = k'_0 + k''_0 \cdot h$	$k'_2 = k'_0 - k''_0 \cdot h + 2 \cdot k''_1 h$	k''_0	k''_1	k''_2
$i + 1$	$z_i^* + h$	$= k'_0 + h \cdot \frac{k''_0 + 4k''_1 + k''_2}{6}$	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

Onde: k'_0 , k''_1 e k''_2 são as funções isoladas das derivadas terceiras de n em cada um dos pontos alternativos e no de análise. Onde, de uma maneira geral:

$$k''_p = \frac{A[2(1-2a)A + (4a-3)](k_p)^2 + 2SA[1-2A(1-2a)](k_p)^2 k'_p + SA[(1-2a) + 4a(1-a)A](k'_p)^2 - (1-a)A[2aA + (1-2a)]k'_p - 2(1-A)(k_p)^2 [Sk'_p - (1-a)]}{SA[4a(1-a)A + (1-2n)]k_p}$$

Para $0 \leq p \leq 2$.

REFERÊNCIAS

CHAPRA, S.C.; CANALE, R. P.. **Numerical Methods for Engineers**. McGraw-Hill Education. 5th Edition, Singapore, 2006.

FAIRES, J. D.; BURDEN, R. L.. **Numerical Methods**. Brooks Cole. 3rd Edition, 2002.

FOX, R. W.; PRITCHARD, P. J.; MCDONALD, A. T.. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. Grupo Editorial Nacional, Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda. – LTC. 7^a Edição, Rio de Janeiro, 2010.

JANZEN, J. G.. **Fluxo de Massa na Interface Ar-água em Tanques de Grades Oscilantes e Detalhes de Escoamentos Turbulentos Isotrópicos**. Universidade de São Paulo, Escola de Engenharia de São Carlos, Departamento de Hidráulica e Saneamento, 2006. Originalmente apresentada como tese para a obtenção do título de Doutor em Ciências com ênfase em Hidráulica e Saneamento. São Carlos, 2006.

MONTGOMERY, D.C.; RUNGER, G. C.. **Applied Statistics and Probability for Engineers**. John Wiley & Sons, 3rd Edition, New York, 2003.

POPE, S. B.. **Turbulent Flows**. Cambridge University Press, 1st Edition, Cambridge, 2000.

RAMOS, F.; TEMAM, R.; ROSA, R.. Estimativas Rigorosas para Escoamentos Turbulentos Baseados nas Equações de Navier-Stokes. In: FREIRE, A. P. S.; ILHA, A.; COLAÇO, L. J. (Ed.). **Turbulência**. Coleção Cadernos de Turbulência, Volume 5, Tomo 1. Rio de Janeiro, 2006.

SCHULZ, H. E.. **O Essencial em Fenômenos de Transporte**. Projeto Reenge, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.

SCHULZ, H. E.; JANZEN, J. G.. Concentration fields near air-water interfaces during interfacial mass transport: oxygen transport and random square wave analysis. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**. Volume 26, pp. 527-536, São Paulo 2009.

SCHULZ, H.E.; SIMÕES, A.L.A.; JANZEN, J.G. Statistical Approximations in Gas-liquid Mass Transfer. In: KOMORI, S.; MCGUILLIS, W.; KUROSE, R. (Ed.). **Gas Transfer at Water Surface 2010**. Kyoto University Press, Kyoto, 2011. (a)

SCHULZ, H.E.; LOPES JUNIOR, G. B.; SIMÕES, A. L. A.; LOBOSCO, R. J.. One Dimensional Turbulent Transfer Using Random Square Waves – scalar/velocity and velocity/velocity interactions. In: SCHULZ, H. E.; SIMÕES, A. L. A.; LOBOSCO, R. J.. **Hydrodynamics: Advanced topics**. InTech, Rijeka, 2011. (b)

SILVEIRA NETO, A.. **Turbulência nos Fluidos**. Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Mecânica, 2001.

TOWNSEND, A. A.. **The Structure of Turbulent Shear Flow**. Cambridge Monographs on Mechanics and Applied Mathematics. Cambridge University Press. Second Edition (First Paperback Edition), Cambridge, 1980.