2

Revisão Bibliográfica

2.1

Perspectiva Histórica no Desenvolvimento de Modelos de Mistura para Combustão

Curl (1963), em seu trabalho pioneiro, derivou a função de densidade de probabilidade (*Probability Density Function, PDF*) que tentava descrever o processo de difusão de um escalar reativo, que foi reescrita posteriormente sob a forma de modelo estocástico equivalente por Spielman e Levenspiel (1965).

O modelo dinâmico para a função densidade de probabilidade (PDF) postulado por Curl (1963) tinha como objetivo descrever as interações entre partículas de fluido em um sistema líquido bifásico no interior de um reator químico. Este modelo assume que as partículas que descrevem as propriedades no sistema são de igual tamanho e possuem igual probabilidade de coalescer. Imediatamente após a coalescência de um par de partículas, duas novas partículas são formadas cujos valores das propriedades são a média das propriedades das partículas iniciais.

Este processo de coalescência e redispersão modela a mistura turbulenta no fluido. No caso da mistura entre dois fluidos com temperaturas distintas, este modelo prevê que a temperatura média será atingida imediatamente após a ocorrência de coalescência e redispersão. Porém, de acordo com o processo físico da transferência de calor por difusão, a temperatura média somente é atingida para tempos infinitamente grandes. Assim, é fácil constatar que o modelo de Curl fornece resultados que são fisicamente inaceitáveis (Dopazo, 1979).

Além disso, ao derivar o modelo estocástico equivalente ao modelo de Curl, demonstra-se facilmente que a PDF do escalar que se mistura é composta somente de funções delta de Dirac (Pope, 1982). O número de funções delta tende ao infinito, porém sem resultar em uma distribuição contínua (Pope, 1982). Além destas deficiências, o modelo de Curl apresenta outras que serão detalhadas nos capítulos a seguir. Entretanto, este modelo tem servido de base para o desenvolvimento de modelos de mistura mais sofisticados.

Os fundamentos da utilização do método da PDF no desenvolvimento de modelos de turbulência e de convecção turbulenta de campos escalares foram propostos por Lundgren (1967) e Monin (1967) os quais, independentemente, modelaram a equação de transporte da função de densidade de probabilidade para a velocidade do escoamento. Esta abordagem consiste na derivação, a partir das equações de continuidade e de conservação de quantidade movimento para um fluido newtoniano, de uma equação de transporte para a função de densidade de probabilidade em um único ponto (uni-ponto) do campo de velocidade. Esta equação de transporte da PDF possui termos difusivos e de gradiente de pressão abertos. Modelos foram propostos para representar estes termos.

Posteriormente, Hill (1969) derivou a equação de transporte da função de densidade de probabilidade da concentração de espécies para um escoamento turbulento submetido a uma reação química irreversível de segunda ordem. Neste caso, o único termo aberto é o transporte difusivo, o qual representa a mistura turbulenta do escalar considerado como, por exemplo, fração mássica, concentração, temperatura, entalpia, etc.

Dopazo e O'Brien (1974) propuseram um modelo simples para o termo difusivo da equação de transporte da função de densidade de probabilidade para um escalar. Este modelo é baseado na estimação linear da média quadrada, (*Linear Square Mean Estimation, LMSE*). Este modelo de mistura, possibilita a determinação da evolução das espécies químicas reativas submetidas a um campo turbulento homogêneo.

O Modelo *LSME*, também conhecido como Modelo de Interação pela Troca com a Média (*Interaction by Exchange with the Mean, IEM*, Correa, 1993), prediz que a forma da PDF de um escalar não reativo em escoamento turbulento homogêneo permanece inalterada no tempo durante o processo de mistura. Conseqüentemente, para uma escolha arbitrária de uma PDF inicial, sua forma não apresentará qualquer tipo de relaxação. Este comportamento incorreto é resultado do fato que o modelo *IEM* não contém nenhuma informação sobre a forma da distribuição, levando em conta apenas o valor médio do escalar (Pope, 1985).

Por outro lado, evidências experimentais (Warhaft e Lumley, 1978) e de Simulação Numérica Direta (*Direct Numerical Simulation, DNS*), (Eswaran e Pope, 1988), sugerem que a PDF de um campo escalar passivo em turbulência homogênea deveria tender assintoticamente a uma forma Gaussiana partindo-se de qualquer distribuição inicial. O advento da *DNS* permitiu estudos da evolução da PDF de um campo escalar inerte, os quais demonstraram que a PDF evolui através de uma série de formas “universais” que são

similares a uma PDF de tipo Beta. Além disto, mostrou-se que a taxa de dissipação escalar depende fortemente da distribuição estatística do escalar nas diversas escalas de comprimento das flutuações turbulentas. (Fox, 2003).

Dopazo (1979) e Janicka, *et al.* (1979) propuseram, independentemente, uma modificação do modelo de Curl, a qual introduz uma ponderação arbitrária da evolução das composições das partículas durante o processo de mistura. Estes autores escolheram trabalhar com uma ponderação que corresponde a uma variável aleatória uniformemente distribuída. Este modelo de mistura foi chamado Modelo Modificado de Curl (MCM).

No caso de turbulência homogênea, o Modelo Modificado de Curl (Dopazo, 1979; Janicka, *et al.*, 1979) fornece uma relaxação de qualquer PDF inicial, arbitrariamente escolhida, para uma distribuição que, em termos qualitativos, aproxima-se à Gaussiana. Porém os momentos estatísticos da PDF de maior ordem que a variância calculados pelo Modelo Modificado de Curl não aproximam os momentos de uma distribuição Gaussiana, e tendem ao infinito (Pope, 1982).

Para superar a deficiência apresentada pelo Modelo Modificado de Curl, Pope (1982) desenvolveu um modelo estocástico melhorado que resulta em PDF's que são mais próximas de uma Gaussiana. O modelo proposto por Pope é similar ao Modelo Modificado de Curl, exceto pela escolha das partículas a serem misturadas. Esta escolha é realizada por intermédio de uma variável aleatória que descreve o tempo transcorrido entre a mistura de duas partículas. Para modelar tal processo, define-se uma função de distribuição desta "idade", a qual influencia a escolha das partículas a serem misturadas. Com esta técnica, é possível obter momentos de ordens superiores mais próximos aos de uma Gaussiana do que com os modelos precedentes. Porém, este modelo proposto por Pope (1982), da mesma forma que os demais modelos que envolvem interação entre partículas, como o caso dos modelos de Curl Simples e Curl Modificado, leva a alguns questionamentos relativos à representação discreta do processo difusivo, a qual é um fenômeno contínuo.

Na procura de modelos que melhor representem os processos difusivos, Harworth e Pope (1985) propuseram um modelo para representar a PDF da velocidade para o transporte turbulento como sendo um processo estocástico de Langevin. Este processo estocástico linear é de natureza Markoviana e descreve a velocidade de uma partícula de fluido submetida a um movimento Browniano (Gardiner, 1990). O modelo de Langevin fornece bons resultados para o campo de velocidade e tem sido utilizado na determinação do transporte difusivo da velocidade em escoamentos turbulentos homogêneos (Fox, 2003).

Simultaneamente, Pope (1985) propôs a utilização do Modelo de Lange-

vin para descrever campos escalares. Com este modelo é possível garantir que a relaxação de uma PDF, de forma inicial arbitrária, ocorra assintoticamente para uma forma Gaussiana. Porém este modelo, que é baseado no processo Wiener, o qual descreve o movimento Browniano, pode levar a valores do escalar situados fora da faixa de variação permitida pela física do processo de mistura.

Cabe resaltar que o Modelo de Langevin é constituído de dois termos, o primeiro, determinístico, descreve o decaimento da variância e, neste caso, é modelado pela relaxação linear em torno da média. O segundo é o termo difusivo aleatório, responsável pela relaxação da PDF para uma forma Gaussiana para tempos assintoticamente grandes. (Dopazo, 1994).

Diferentes modelos foram propostos adotando, como base de partida, o modelo de Langevin. Valiño e Dopazo (1990) propuseram um modelo de mistura chamado Modelo Binomial de Amostragem (*Binomial Sampling Model*). Em seguida, Valiño e Dopazo (1991) propuseram o Modelo Binomial de Langevin (*Binomial Langevin Model*). Enquanto o primeiro destes é uma combinação do Modelo *IEM* e de um processo estocástico de tipo degrau (*Jump*) resultando assim em uma evolução descontínua; o segundo envolve uma mudança determinística do *IEM* e um processo de difusão baseado em uma evolução contínua não diferenciável. Ambos os modelos de mistura fornecem a evolução da PDF de um campo escalar passivo inerte qualitativamente e quantitativamente corretos.

Chen *et al.* (1989) propuseram um modelo de mistura para o fechamento de um campo escalar denominado Modelo de Modo de Fechamento por Mapeamento (*Mapping Closure Mode Model, MCMM*). Pope (1991) interpretou este modelo em termos de partículas e realizou a sua implementação estocástica utilizando o Método de Monte Carlo para um campo escalar passivo. Valiño (1991b) e Valiño e Gao (1992) estenderam a implementação deste modelo para um campo escalar reativo. O modelo *MCMM* realiza o mapeamento de um campo escalar sobre um campo de referência Gaussiano. Este campo de referência é estacionário e a função de mapeamento desenvolve-se no tempo.

O modelo *MCMM*, quando aplicado ao caso de um escalar inerte submetido a um campo turbulento estatisticamente homogêneo e isotrópico, leva a resultados que são próximos daqueles obtidos por Eswaran e Pope (1988) por Simulação Numérica Direta (DNS). O modelo *MCMM* possui como principal vantagem ser um modelo de mistura que é local no espaço da composição, além de satisfazer os critérios da conservação da média, da queda da variância, o princípio da delimitação, da faixa de variação do escalar, e relaxação em direção a uma Gaussiana. Porém, este modelo apresenta dificuldades quanto a sua ge-

neralização para campos escalares múltiplo ou reativos, devido à ausência de unicidade dos mapeamentos. Além disto, o seu custo computacional é muito maior do que os demais modelos aqui apresentados.

Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) e Soulard *et al.* (2004) formularam o Modelo Estendido da Interação mediante a Transferência com a Média (*Extended Interaction by Exchange with the Mean, EIEM*) e o Modelo Estendido de Langevin (*Extended Langevin Model, ELM*). No caso do modelo *EIEM*, a modificação que se faz com respeito ao modelo clássico *IEM* é a substituição da frequência de mistura média por um processo estocástico intermitente. Como resultado deste procedimento, as partículas de fluido possuem sua própria frequência e comportam-se como se pertencessem a diferentes estruturas turbulentas.

Da mesma forma que o modelo *EIEM*, no modelo de mistura *ELM* a frequência de mistura média é modificada e o processo estocástico intermitente que descreve sua distribuição obedece a uma PDF do tipo log-normal. Esta distribuição é conhecida por representar a transferência estatística estacionária entre as escalas de um espectro turbulento desenvolvido, o qual é usualmente utilizado para modelar a frequência do movimento turbulento. (Pope e Chen, 1990).

Na aplicação do modelo Estendido da Interação mediante a Transferência com a Média (*EIEM*), Sabel`nikov *et al.* (2005) implementaram este modelo para a simulação numérica da auto-ignição e a formação de fuligem em um processo de combustão pulverizada de óleo Diesel. Os resultados obtidos foram qualitativamente melhores do que o modelo *IEM* no que diz respeito à distribuição da temperatura média durante a autoignição e à evolução das concentrações máximas de fuligem. Também foi demonstrado que a predição do atraso de ignição, da variância do escalar e das concentrações de fuligem podem ser melhorados utilizando-se o modelo *EIEM*. Porém, ainda não foi realizada uma implementação estocástica do modelo Estendido de Langevin *ELM* aplicado à combustão em escoamento turbulento.

2.2

Métodos Numéricos para a Resolução de Equações Diferenciais Estocásticas

Os modelos de mistura que envolvem processos difusivos tais como o modelo de Langevin, o modelo *IEM* Estendido (*EIEM*) e o Modelo de Langevin Estendido (*ELM*) (Sabel`nikov e Gorokhovski, 2001) podem ser interpretados mediante a utilização da equação de *Fokker-Planck (FP)* a qual descreve a evolução temporal da PDF $P_\phi(\psi, t)$ de uma variável aleatória de natureza

Markoviana ϕ (Soulard *et al.*, 2004) e que corresponde à abordagem Euleriana da variável aleatória (Heinz, 2003). A formulação geral da equação de *Fokker-Planck* é (Gardiner, 1990):

$$\frac{\partial P_\phi(\psi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \psi} \{A[\phi(t), t] P_\phi(\psi, t)\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \{B[\phi(t), t] P_\phi(\psi, t)\}. \quad (2-1)$$

Nesta equação ψ representa o espaço amostral da variável aleatória ϕ , as funções $A[\phi(t), t]$ e $B[\phi(t), t]$ são chamados coeficientes de deriva (*drift*) e de difusão (*diffusive*), respectivamente. Se A é uniforme, este coeficiente resulta em um deslocamento da PDF no espaço da variável ϕ com uma velocidade A . O coeficiente B está relacionado ao espalhamento da PDF no espaço amostral ψ .

Porém, quando aplicadas a escoamentos turbulentos reativos, a equação de *Fokker-Planck* descreve a evolução da PDF conjunta de um grande número de variáveis aleatórias, neste caso, a variável uni-dimensional, ϕ , torna-se multi-dimensional, Φ , a qual faz com que a equação de *Fokker-Planck* torne-se extremamente complicada, até impossível de resolver (Heinz, 2003). Como consequência, sua solução numérica só é viável nos casos em que o número de variáveis aleatórias é pequeno.

Outra forma de escrever os modelos de mistura de Langevin, *EIEM* e *ELM* é mediante o uso das *Equações Diferenciais Estocásticas (SDE)*, que são equações diferenciais que contêm termos determinísticos e aleatórios. Esta formulação, equivalente à equação de *Fokker-Planck* (Eq. 2-1), pode ser escrita sob a forma de uma equação diferencial estocástica, de acordo com a interpretação de Itô (Gardiner, 1990):

$$d\phi(t) = A[\phi(t), t] dt + \{B[\phi(t), t]\}^{1/2} dW(t). \quad (2-2)$$

Nesta equação, $W(t)$ é uma variável aleatória que depende continuamente de t , e descreve o *Movimento Browniano Padrão* ou o *Processo Wiener Padrão*, a qual deve de satisfazer principalmente três condições (Higham, 2001):

1. $W(0) = 0$ com probabilidade 1.
2. Para $0 \leq s \leq t \leq T$ a variável aleatória dada pelo incremento de $W(t) - W(s)$ é normalmente distribuída com média zero e variância $t - s$; isto é, $W(t) - W(s) \sim \sqrt{t - s} N(0, 1)$, onde $N(0, 1)$ representa a variável aleatória normalmente distribuída com média igual a zero e variância unitária.
3. Para $0 \leq s \leq t \leq u \leq v \leq T$, os incrementos $W(t) - W(s)$ e $W(v) - W(u)$ são independentes.

A Eq. (2-2) pode ser utilizada para descrever qualquer tipo de processo difusivo. Foi Itô (1942) quem a formulou pela primeira vez como uma tentativa de representar processos difusivos, desenvolvendo assim um método probabilístico como alternativa ao método analítico empregado na época. Posteriormente, Itô demonstrou que as soluções destas SDEs descrevem os processos do tipo Markovianos com trajetórias contínuas e desenvolveu o cálculo estocástico para poder estudar estas soluções. Na atualidade, o cálculo de Itô fornece ferramentas que permitem construir processos de difusão como soluções de equações diferenciais estocásticas (Guerra, 2005).

No entanto, no caso geral, as equações diferenciais estocásticas são impossíveis de serem resolvidos pelas técnicas analíticas. Somente se conseguem soluções para os casos mais simples e restritos. Assim, a alternativa para se obter soluções para SDEs é a utilização das ferramentas numéricas de discretização, cujo desenvolvimento é objeto de pesquisas recentes.

A principal dificuldade na obtenção de soluções numéricas das SDEs é o controle dos erros de discretização pois, devido à sua natureza, o termo difusivo aleatório propaga este tipo de erro. Nos casos de equações diferenciais estocásticas não lineares, como por exemplo, os que descrevem os modelos de mistura de Langevin e Langevin Modificado em presença de combustão, esta propagação pode comprometer a solução numérica.

A avaliação qualitativa e quantitativa do método numérico para resolver SDEs é baseada nos critérios de convergência e de estabilidade. A convergência, em geral, está associada à eficiência do método numérico em obter soluções aproximadas com o menor custo computacional. A estabilidade está relacionada com a capacidade de representação das soluções discretizadas com respeito às exatas.

Um método numérico possui *convergência de ordem forte* igual a γ_s se existe uma constante K_s tal que (Higham, 2001):

$$E |\phi_N - \phi(t_N)| \leq K_s \Delta t^{\gamma_s}. \quad (2-3)$$

Onde o termo E representa o valor médio, ϕ_N é a aproximação de $\phi(t_N)$ no tempo T depois de N passos de tempo uniformes de valor Δt . A *convergência de ordem forte* mede a taxa com a qual a “média do erro” do método numérico decai quando o número de passos do tempo N tende para o infinito, isto é quando $\Delta t \rightarrow 0$.

Uma alternativa também utilizada que testa a queda da “média dos erros” é a *convergência de ordem fraca*. Se diz que um método numérico apresenta *convergência de ordem fraca* igual a γ_w se existe uma constante K_w tal que, para toda função, f ,

$$|Ef(\phi_N) - Ef[\phi(t_N)]| \leq K_w \Delta t^{\gamma_w}, \quad (2-4)$$

onde a função f na Eq. (2-4) deve de ser do tipo *suave e polinomial*. Usualmente, esta função f é escolhida da forma mais simples, isto é, como por exemplo, uma função identidade $f(\phi) = \phi$.

O método numérico mais simples para a resolução de SDEs é o método de *Euler Estocástico Explícito* ou *Euler-Maruyama*, que consiste em uma generalização do esquema do tipo *Euler Explícito* (Higham e Kloeden, 2001). Este método numérico possui uma convergência forte de ordem $\gamma_s = 0,5$ e convergência fraca de ordem $\gamma_w = 1$, o que revela a fraqueza do método numérico com respeito ao demais modelos que serão descritos posteriormente.

Além da convergência lenta, o método numérico de Euler-Maruyama apresenta uma região de estabilidade extremamente limitada. De fato, só é possível obter soluções aceitáveis para casos nos quais as equações diferenciais estocásticas são quase lineares, isto é, quando os coeficientes de deriva $A[\phi(t), t]$ e difusão $B[\phi(t), t]$ são quase constantes. Na maior parte de situações práticas, este método não é particularmente satisfatório e o uso de métodos numéricos que apresentem ordem de convergência mais elevada é recomendado (Kloeden, *et al.*, 2003).

O método de *Euler Implícito* de resolução das SDEs, contrariamente ao do método de Euler Implícito para EDOs, apresenta fortes instabilidades para valores do passo de tempo relativamente grandes (Milstein *et. al.*, 1998). Isto acontece devido à natureza do processo Wiener, que pode adotar valores em toda faixa dos números reais $(-\infty, +\infty)$ no caso de equações diferenciais estocásticas nas quais ambos os termos, o determinístico e o estocástico, são não lineares (Kloeden e Platen, 1992).

Para superar a dificuldade da instabilidade apresentada pelo método de Euler Implícito em resolver SDEs, Milstein *et. al.* (1998) propuseram um método numérico denominado “Método Implícito Balanceado”. Este método numérico parte do método numérico de Euler-Maruyama ao qual se adiciona uma *implicitude parcial*, conseguindo-se desta forma que a propagação de erros oriunda do termo estocástico seja controlável, quando comparado aos métodos de Euler Explícito e Implícito.

Porém, este método não trata de forma implícita o termo determinístico. No caso dos modelos de mistura de Langevin, EIEM e ELM acoplados à uma descrição da combustão pela lei de Arrhenius, é indispensável tratar a SDE por método implícito de modo a evitar o aparecimento de instabilidades numéricas.

Burrage e Tian (2001) propuseram um método numérico para resolver SDEs que são “rígidas” (*Stiff Stochastic Differential Equations*), o qual foi de-

nominado método de Euler Composto. Este método resulta de uma combinação do método de Euler Semi-implícito e do método de Euler Implícito. O método de Euler Composto consiste em definir um critério de estabilidade a cada passo de tempo que determina a escolha do método numérico a ser utilizado, isto é, Euler Semi-implícito ou Euler Implícito, garantido desta forma uma região de estabilidade muito maior que a dos métodos anteriormente descritos.

Recentemente, Tian e Burrage (2001) desenvolveram e avaliaram diferentes métodos numéricos do tipo Explícito, Semi-implícito e Implícito para as Equações Diferenciais Estocásticas baseados na sua discretização de acordo com a sua expansão em série de Taylor. A equação modelo utilizada para testar os diferentes métodos numéricos e esquemas de discretização foi uma equação diferencial estocástica do tipo linear na componente de deriva adicionado de um ruído branco multiplicativo na componente difusiva. Em concordância com a definição proposta por Tian e Burrage (2001), o *método de Euler-Taylor Implícito* é definido a partir de expansão em série de Taylor de primeira ordem e apresenta uma ordem de convergência forte igual a 0,5. O *método de Milstein-Taylor Implícito* é obtido a partir da expansão de Taylor truncada na segunda ordem e apresenta, assim uma ordem de convergência do tipo forte igual a 1.

Os métodos numéricos de Euler-Taylor, Milstein-Taylor, e Taylor foram assim desenvolvidos para esquemas do tipo implícito. Em seguida, foram avaliadas suas respectivas restrições e propriedades de estabilidade. Os resultados numéricos reportados por Tian e Burrage (2001) demonstram que os métodos numéricos de Milstein-Taylor e Euler-Taylor do tipo implícito são métodos numéricos promissores para resolução de equações diferenciais estocásticas não lineares, como é o caso das formulações estocásticas que envolvem o fenômeno da combustão.