

4

Modelagem Matemática do Processo de Mistura

Como foi visto no Cap. 3, o termo difusivo da equação de transporte da PDF para um PaSR (Eq. 3-30) é um termo aberto. Para fechá-lo, é necessário dispor de modelos que representem de forma mais adequada o processo de mistura a nível molecular. Este capítulo começa pela simplificação da Eq. (3-30) para o caso de um escalar não reativo submetido a um campo de velocidade estatisticamente homogêneo e isotrópico. Esta situação simplificada permite a análise das diferentes propriedades dos modelos de mistura. Em seguida, são introduzidos três modelos de mistura *clássicos*: o modelo de mistura de Coalescência e Dispersão (CD), o modelo de Curl Modificado (MCM) e o modelo de Interação pela Troca com a Média (IEM). Finalmente, são apresentados os novos modelos de mistura formulados recentemente por Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) e que são o Modelos IEM estendido (EIEM), o modelo de Langevin (LM) e o modelo de Langevin Estendido (ELM).

4.1

Modelagem da Mistura Escalar Inerte

Os três termos do lado direito da equação de transporte da PDF para um PaSR (Eq. 3-30) descrevem, respectivamente, os processos de entrada-saída do escoamento (forçamento), a mistura molecular e o processo da reação química (Sabel'nikov e Figueira da Silva, 2002). No caso do presente estudo da influência da escolha do modelo de mistura molecular do escalar inerte quando submetido a um escoamento turbulento estatisticamente estacionário, os processos convectivos e de reação química não são levados em conta.

Assim, a equação que descreve a evolução da PDF de um escalar inerte submetido a um escoamento turbulento estacionário é,

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)] . \quad (4-1)$$

Cabe lembrar que o termo $\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle$ descreve a evolução no espaço amostral do escalar ϕ devido ao efeito da mistura molecular, razão pela qual é usualmente chamado de termo de micro-mistura (Chen, 1997). Este termo é aberto e, portanto, necessita ser modelado.

A intensidade das flutuações, k_ϕ , e a taxa de dissipação do escalar, ε_ϕ , são definidos como (Pope, 1985):

$$k_\phi = \phi'^2, \quad (4-2)$$

$$\varepsilon_\phi = \Gamma \left(\frac{\partial \phi'}{\partial x_j} \frac{\partial \phi'}{\partial x_j} \right), \quad (4-3)$$

onde, Γ é o coeficiente de difusão do escalar. Após algumas transformações, a Eq. (4-1) pode ser reescrita em função da taxa de dissipação do escalar condicionada $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$ (Dopazo, 1979; Pope, 2000):

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = - \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} [\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)]. \quad (4-4)$$

Das Eqs. (4-1) e (4-4) obtém-se uma relação entre o laplaciano escalar condicionado e a taxa de dissipação do escalar condicionada,

$$\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle = \frac{1}{P_\phi(\psi; t)} \frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)], \quad (4-5)$$

a qual é verificada apenas para altos número de Reynolds, nos casos em que o campo escalar pode ser considerado como estatisticamente homogêneo (Fox, 2003), isto é, que o gradiente do escalar médio é nulo.

Uma das principais dificuldades na elaboração de um modelo de mistura provém das interações complexas existentes entre os campos turbulentos de velocidade e escalar. Estas interações conduzem à existência de estruturas escalares distribuídas em um amplo espectro de escalas, as quais interagem umas com outras. A mistura molecular propriamente dita acontece no menor nível deste espectro, sua intensidade depende do valor local do gradiente de escalar. De modo geral, estas estruturas são distribuídas no espaço e no tempo de forma não uniforme, uma vez que o valor do gradiente escalar também flutua fortemente de uma estrutura para outra. Deste modo, o processo de mistura apresenta características intermitentes (Soulard, 2005).

4.2

Propriedades Desejáveis dos Modelos de Mistura

Antes de apresentar os modelos de mistura, serão estabelecidas algumas restrições que estes modelos devem atender. Algumas destas podem ser deduzidas das equações de conservação. As demais provêm de resultados da DNS e de observações experimentais (Pope 2000). O trabalho de Subramaniam e Pope (1998) apresenta em detalhe uma discussão das propriedades desejáveis dos modelos de mistura, resumidos a seguir.

4.2.1

Conservação da Média

Para um número de Reynolds elevado, o valor da média do escalar $\langle \phi \rangle$ não é diretamente afetado pelo processo de mistura. Para demonstrar esta restrição, considere-se a equação de transporte do escalar inerte ϕ em presença de um campo de velocidade turbulenta $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ no caso de densidade constante,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (4-6)$$

A evolução da composição média do escalar $\langle \phi \rangle$, é dada por

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \phi' \rangle}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2 \langle \phi \rangle}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (4-7)$$

onde o termo $\langle u_j \phi' \rangle$ é chamado fluxo turbulento do escalar. Este termo é o principal responsável da mistura rápida observada em escoamentos turbulentos. Note-se que, para elevados número de Reynolds, o lado direito da Eq. (4-7) é desprezível em relação aos demais termos desta equação. Por outro lado, a equação de transporte da PDF conjunta de Φ (Eq. 3-20), pode ser multiplicada pela variável ψ e integrada no espaço amostral $\Psi = [\mathbf{V}, \psi]$ para se obter,

$$\frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} + \langle U_j \rangle \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \phi' \rangle}{\partial x_j} = \langle \Theta \rangle, \quad (4-8)$$

onde $\langle \Theta \rangle$ representa os termo do transporte molecular. Note-se que foi utilizada a hipótese de um escalar simples e inerte. Levando em conta a similitude das equações (4-7) e (4-8), verifica-se que,

$$\langle \Theta \rangle = 0. \quad (4-9)$$

No caso em que o escalar passivo e inerte encontra-se submetido a um campo turbulento homogêneo de velocidade e escalar, isto é, na ausência de gradientes dos valores médios da velocidade $\langle \mathbf{U} \rangle$ e do escalar $\langle \phi \rangle$, e, considerando um sistema de coordenadas escolhido de tal forma que $\langle \mathbf{U} \rangle = 0$, tem-se

$$\frac{d \langle \phi \rangle}{dt} = 0, \quad (4-10)$$

ou seja, um modelo de mistura não deve afetar o valor da média do campo escalar.

4.2.2

Decaimento da Variância

Os modelos de mistura devem ser capazes de representar redução das heterogeneidades da distribuição do escalar ao longo do tempo. Para este fim,

será mostrado aqui que o modelo deve conter informações referentes à taxa de dissipação do escalar, ε_ϕ . A equação que representa a evolução da variância das flutuações no tempo pode ser obtida ao multiplicar a Eq. (4-6) por ϕ e aplicando-se em seguida o operador da média e a hipótese da homogeneidade de \mathbf{U} e de ϕ .

$$\frac{d\sigma^2}{dt} = \frac{d\langle\phi'^2\rangle}{dt} = -2\langle\varepsilon_\phi\rangle, \quad (4-11)$$

onde, ε_ϕ é dado pela Eq. (4-3). Note-se que, uma vez que o valor da taxa de dissipação escalar sempre é positivo, a variância do escalar, $\sigma^2 = \langle\phi'^2\rangle$, sempre diminuirá com o tempo (Dopazo, 1994).

4.2.3 Delimitação

Os campos escalares considerados nos escoamentos turbulentos reativos são, em geral, delimitados (Pope, 1985). Por exemplo, seja ϕ a variável da fração mássica de uma espécie química, cujos valores possíveis devem encontrar-se entre 0 e 1. Esta região restrita constitui o espaço amostral do campo escalar.

Um modelo de mistura que leve a campos escalares fora da região permissível pode violar fundamentos físico-químicos, como a estequiometria e o balanço de massa (Fox, 2003). Nos casos que envolvem um conjunto de escalares, os limites da região permissível podem ser complicados e dependentes do tempo. Os primeiros modelos de mistura baseados na equação de Langevin (Valiño e Dopazo, 1990) apresentam dificuldades com respeito a esta restrição. A fim de garantir a delimitação, o coeficiente de difusão do modelo deve ser zero nos limites permissíveis do escalar e, simultaneamente, seu coeficiente de deriva deve “apontar” para o interior da região permissível.

4.2.4 Linearidade e Independência

A equação de transporte de um conjunto de escalares em presença de um campo turbulento, Eq. (3-12), é linear com respeito a estes campos escalares somente se o coeficiente de difusão for idêntico para todos os campos escalares, $\Gamma_\alpha = \Gamma$. Isto traz como consequência que uma transformação linear aplicada aos escalares passivos não modifica a equação da evolução destes escalares transformados. Um modelo de mistura deve preservar a propriedade de linearidade.

Além disso, a média de K escalares passivos não deve ser afetada pela inclusão de um $(K+1)$ -ésimo escalar, pois um modelo de mistura deve preservar

o princípio de independência (Soulard, 2005). Cabe resaltar que estes critérios de linearidade e independência são válidos para escalares inertes que possuem coeficientes de difusão idênticos.

4.2.5

Relaxação para uma Gaussiana

O campo escalar ϕ é uma propriedade macroscópica do fluido cuja distribuição é controlada pelas grandes escalas do movimento, não sendo afetado pela intermitência das pequenas escalas. Como consequência deste fato, acredita-se que a PDF de um campo escalar inerte deve evoluir assintoticamente para uma forma Gaussiana, a qual é independente das condições iniciais. De fato, evidências experimentais (Warhaft e Lumley, 1978) e de Simulação Numérica Direta DNS (Eswaran e Pope, 1988) confirmam esta suposição.

Porém, experimentos realizados nos anos 90 mostraram que a PDF pode exibir um comportamento não Gaussiano. Os experimentos de Majda e Kramer (1999) e a Simulação Numérica Direta (DNS) de Jaber *et al.* (1996) demonstram a existência de um decréscimo da PDF mais lento que o Gaussiano para grandes valores das flutuações do escalar. Assim, a PDF apresenta extremidades mais alongadas do que a Gaussiana. Este comportamento foi atribuído à presença das grandes escalas, também conhecido como *intermitência das grandes escalas*.

Assim, devido à intermitência das grandes escalas, a tendência da PDF para uma Gaussiana não aparenta ser uma característica intrínseca do processo da mistura (Soulard, 2005), e não deveria ser restrição imposta aos modelos de mistura. Este ponto controverso ainda não foi esclarecido.

4.2.6

Localidade

Uma partícula de fluido deve se misturar com partículas de fluido no espaço físico e no espaço de fase do escalar. Porém, diversos modelos de mistura existentes não são locais no espaço do escalar. O não respeito a esta restrição pode fazer com que, durante a mistura, partículas cruzem a zona de reação (Subramaniam e Pope, 1998). Como consequência, a taxa de reação não será corretamente prevista, por exemplo, no caso de chamadas de difusão.

4.2.7

Dependência das Escalas de Comprimento do Campo Escalar

O trabalho experimental de Warhaft e Lumley (1978), mostra que a queda da variância, para o caso de um escalar passivo inerte submetido a um

campo turbulento homogêneo e isotrópico, possui uma dependência das escalas de comprimento do campo escalar. Os resultados da Simulação Numérica Direta (DNS) de Eswaran e Pope (1988), também exibem esta dependência.

Uma conclusão importante destes trabalhos é que, enquanto a escala de comprimento inicial do campo escalar em análise for pequena, o fenômeno difusivo na mistura se desenvolve mais rápido, o que faz com que a variância do escalar decaia rapidamente. Este efeito só pode ser observado caso o modelo de mistura represente as escalas de comprimento associadas ao campo escalar (Subramaniam e Pope, 1998).

Uma vez que, a taxa de dissipação escalar controla o decaimento da variância do escalar, um modelo adequado da taxa da dissipação do escalar é crucial para a correta predição da forma da PDF de um campo escalar.

4.3

Caracterização e Evolução da PDF de um Campo Escalar Inerte

Para fins de comparação entre os diferentes modelos de mistura, será considerado um campo turbulento de velocidade estatisticamente homogêneo, $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$, que permanece inalterado com o tempo. Seja $\phi(\mathbf{x}, t)$ um campo simples de um escalar inerte submetido a este escoamento turbulento homogêneo e isotrópico, e seja $P_\phi(\psi; t)$ a PDF de ϕ . Neste caso, a PDF evolui no tempo devido ao efeito da mistura molecular, tal como descrito pela Eq. (4-1). Para avaliar o desempenho de diferentes modelos de mistura em ausência de reação química, serão utilizados momentos estatísticos.

A média de um campo escalar, $\langle \phi \rangle$, é definida como

$$\mu(t) = \langle \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi P_\phi(\psi; t) d\psi, \quad (4-12)$$

enquanto que a variância, σ^2 , é

$$\sigma^2(t) = \langle \phi'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \langle \phi \rangle)^2 P_\phi(\psi; t) d\psi. \quad (4-13)$$

De forma análoga, o m -ésimo momento centrado, $\mu_m(t)$, é dado por

$$\mu_m(t) = \langle \phi'^m \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \langle \phi \rangle)^m P_\phi(\psi; t) d\psi. \quad (4-14)$$

Um parâmetro importante na avaliação dos modelos de mistura é a *Curtose*, S_4 , o qual mede o grau de achatamento de uma distribuição. Este parâmetro pode ser definido como sendo a razão entre o quarto momento centrado e o quadrado da variância

$$S_4 = \frac{\mu_4}{(\sigma^2)^2} = \frac{\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^4 \rangle}{\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle^2}. \quad (4-15)$$

De modo análogo, define-se a *Hiper-curtose*, S_6 , como sendo a razão entre o sexto momento centrado e o cubo da variância.

$$S_6 = \frac{\mu_6}{(\sigma^2)^3} = \frac{\langle(\phi - \langle\phi\rangle)^6\rangle}{\langle(\phi - \langle\phi\rangle)^2\rangle^3}. \quad (4-16)$$

No caso de uma distribuição Gaussiana tem-se $S_4 = 3$ e $S_6 = 15$ (Pope, 1982). Assim, se os valores calculados de S_4 e S_6 por um modelo de mistura, no caso de um campo escalar inerte submetido a um campo turbulento isotrópico, não tendam assintoticamente a estes valores, tem-se uma indicação de inadequação do modelo (Pope, 1982).

Neste estudo, duas condições iniciais são consideradas para a PDF, as quais procuram representar uma mistura binária. A primeira condição inicial clássica, corresponde a campos escalares completamente segregados, isto é

$$P_\phi(\psi; 0) = p_0\delta(\psi) + p_1\delta(\psi - 1). \quad (4-17)$$

Nesta equação, p_0 e p_1 representam respectivamente as probabilidades de encontrar $\phi = 0$ e $\phi = 1$ no volume considerado. Devido à condição de normalização da PDF, tem-se que $p_0 + p_1 = 1$. Por simplicidade, e sem perda de generalidade, será utilizado que $p_0 = p_1 = \langle\phi(\mathbf{x}, 0)\rangle = 1/2$.

No presente caso de uma mistura binária homogênea, a média do escalar permanece constante, ou seja, $\langle\phi(\mathbf{x}, t)\rangle = \langle\phi(\mathbf{x}, 0)\rangle = p_1$. Além disto, a variância inicial do escalar é de $\sigma^2(0) = \langle\phi'^2(\mathbf{x}, 0)\rangle = p_1(1 - p_1)$. Note-se que, segundo a Eq. (4-11), a variância tende assintoticamente para zero, isto é $\sigma^2(t \rightarrow \infty) = \langle\phi'^2(\mathbf{x}, \infty)\rangle = 0$, o que tem por consequência

$$P_\phi(\psi; \infty) = \delta(\psi - p_1). \quad (4-18)$$

A outra PDF que será utilizada como condição inicial para simulação de uma mistura binária homogênea de um escalar inerte, é a distribuição do tipo Beta (Heinz, 2003),

$$P_\phi(\psi; 0) = \frac{1}{\mathbf{B}(\alpha, \beta)}\psi^{\alpha-1}(1 - \psi)^{\beta-1}, \quad (4-19)$$

onde $\mathbf{B}(\alpha, \beta)$, é chamada função *Beta*

$$\mathbf{B}(\alpha, \beta) = \int_0^1 s^{\alpha-1}(1 - s)^{\beta-1} ds. \quad (4-20)$$

Os parâmetros α e β estão relacionados com a média e a variância da PDF pelas seguintes expressões:

$$\alpha = \langle\phi\rangle \left[\frac{\langle\phi\rangle(1 - \langle\phi\rangle)}{\sigma^2} - 1 \right]. \quad (4-21)$$

$$\beta = (1 - \langle\phi\rangle) \left[\frac{\langle\phi\rangle(1 - \langle\phi\rangle)}{\sigma^2} - 1 \right]. \quad (4-22)$$

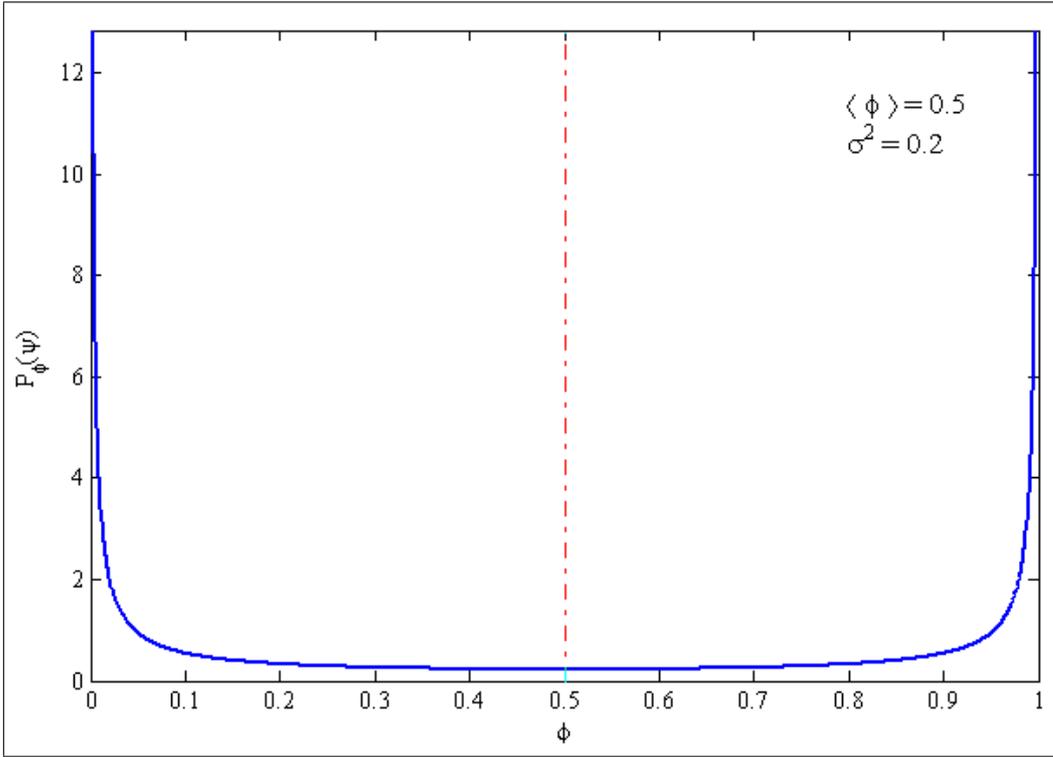


Figura 4.1: PDF inicial do campo escalar ϕ como uma distribuição Beta para $\langle \phi \rangle = 0,5$ e $\sigma^2 = 0,2$.

A figura 4.1 mostra uma PDF do tipo Beta para valores escolhidos de $\langle \phi \rangle$ e σ^2 . Partindo desta condição inicial, a evolução da PDF do escalar inerte devida à mistura será examinado no Cap. 6.

Os modelos de mistura considerados neste estudo requerem a especificação da frequência média do escalar $\langle \omega_\phi \rangle$, a qual é usualmente relacionada à taxa de dissipação escalar média $\langle \varepsilon_\phi \rangle$, como parâmetro importante na evolução temporal da PDF,

$$\langle \omega_\phi \rangle = \frac{1}{\tau_m} \equiv \frac{\langle \varepsilon_\phi \rangle}{\sigma^2} = \frac{\langle \varepsilon_\phi \rangle}{\langle \phi'^2 \rangle}, \quad (4-23)$$

onde τ_m é a escala do tempo característico do escalar, também chamada escala do tempo característico da mistura. Spalding (1971), propôs que as escalas de tempo turbulento de velocidade, τ_t , e de um escalar, τ_m , são proporcionais, isto é,

$$\tau_m = \frac{\tau_t}{C_\phi}, \quad (4-24)$$

no âmbito de modelo $k - \varepsilon$ para turbulência,

$$\langle \omega_\phi \rangle = C_\phi \langle \omega \rangle = C_\phi \frac{\langle \varepsilon \rangle}{k}, \quad (4-25)$$

onde $\langle \omega \rangle$ é a frequência turbulenta do campo de velocidade e C_ϕ é uma constante empírica, cujo valor habitual é 1. Note-se que os trabalhos de

Béguier *et al.* (1978), Warhaft e Lumley (1978) e Eswaran e Pope (1988) mostram claramente que C_ϕ não é uma constante universal.

Substituindo a Eq. (4-23) na Eq. (4-11), obtém-se nova equação para a taxa de decaimento da variância

$$\frac{d\langle\phi'^2\rangle}{dt} = -2\langle\phi'^2\rangle\langle\omega_\phi\rangle. \quad (4-26)$$

Dado um valor inicial $\langle\phi'^2(0)\rangle$, e no caso em que $\langle\omega_\phi\rangle$ é constante, a evolução da variância apresenta a solução exata

$$\langle\phi'^2(t)\rangle = \langle\phi'^2(0)\rangle \exp[-2\langle\omega_\phi\rangle t]. \quad (4-27)$$

Desta equação, percebe-se que a variância apresenta um decaimento do tipo exponencial, o qual leva a valores nulos apenas quando $t \rightarrow \infty$. Se a PDF $P_\phi(\psi, t)$ de um campo escalar ϕ for uma Gaussiana,

$$P_\phi(\psi; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle\phi'^2\rangle}} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{(\psi - \langle\phi\rangle)^2}{\langle\phi'^2\rangle}\right]. \quad (4-28)$$

Então, esta será integralmente determinada pela média $\langle\phi\rangle$, e pela variância $\langle\phi'^2\rangle$ em qualquer instante.

Os diferentes modelos estudados neste trabalho serão analisados de acordo com a forma da PDF obtida e seus momentos estatísticos. Acredita-se que um bom modelo de mistura deve levar a uma distribuição contínua que tende assintoticamente para uma Gaussiana quando o tempo tende a infinito.

4.4

Modelos de Mistura Clássicos

Desde que Hill (1969) derivou pela primeira vez a equação de transporte da PDF da concentração de espécies para um escoamento turbulento submetido a uma reação química irreversível, ficou clara a necessidade de fornecer modelos que representem o termo aberto do transporte difusivo (micro-mistura).

Os primeiros modelos propostos, como por exemplo, o de *interação entre partículas* Curl (1963); Dopazo (1979); Janicka, *et al.* (1979); Pope (1982); ou os modelos do tipo de *Relaxação entorno à média* Dopazo e O'Brien (1974); Valiño e Dopazo (1990); Valiño e Dopazo (1991); ainda são utilizados em diversas simulações de escoamentos turbulentos reativos. Estes modelos clássicos foram desenvolvidos a partir de duas abordagens teóricas equivalentes. Na primeira abordagem, modelos de mistura do tipo estocástico que descrevem a combustão em um escoamento turbulento estatisticamente homogêneo foram formulados por Flagan e Appleton (1974), Pratt (1979), Pope (1982), Valiño e Dopazo (1990) e Valiño e Dopazo (1991). Na segunda, as equações di-

ferenciais que descrevem a evolução da PDF das concentrações dos reagentes, foram estudados por Dopazo e O'Brien (1974), Dopazo (1979), Janicka, *et al.* (1979) e Pope (1981a).

Neste trabalho só serão discutidos os modelos de mistura clássicos mais simples, estes são o modelo de Curl (CM), o modelo de Curl Modificado (CMC) e o modelo de Interação pela troca com a média (IEM).

4.4.1

Modelo de Curl ou de Coalescência e Dispersão

O primeiro e o mais simples modelo de mistura é o modelo de Curl (CM), também chamado modelo de Coalescência e Dispersão. Neste modelo, a PDF $P_\phi(\psi; t)$, é representada por um conjunto de N_p partículas estocásticas. A média, $\langle Q(\phi) \rangle$, de qualquer função bem comportada do campo do escalar ϕ pode ser obtida mediante a seguinte equação,

$$\langle Q(\phi) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Q(\psi) P_\phi(\psi; t) d\psi, \quad (4-29)$$

a qual pode ser aproximada, quando se utiliza uma técnica Monte-Carlo, por

$$\langle Q(\phi) \rangle \approx \frac{1}{N_p} \sum_{n=1}^{N_p} Q(\phi^{(n)}). \quad (4-30)$$

A principal fraqueza da simulação estocástica pelo método de Monte-Carlo é que o erro estatístico envolvido nesta aproximação é proporcional a $N_p^{-1/2}$. Assim, um grande número de partículas é necessário para atingir pequenos valores deste erro (Peters, 2000).

No âmbito do modelo CM, o processo de mistura é representado por uma seqüência de passos de tempo Δt , ($\Delta t \langle \omega_\phi \rangle \ll 1$), onde pares de partículas são aleatoriamente escolhidos do conjunto de partículas que representa o domínio em análise. O número de pares de partículas escolhidos, é igual a $N_e = \beta \Delta t \langle \omega_\phi \rangle N_p$, onde $\beta = 2$ é uma constante que garante a condição de que $\langle \phi'^2 \rangle$ decai a taxa $\langle \omega_\phi \rangle$, (Pope, 1982). Dados um par de partículas n e m ,

$$\phi^{(n)}(t) = \phi_a, \quad \phi^{(m)}(t) = \phi_b. \quad (4-31)$$

No modelo CM, a mistura é realizada pela troca dos valores de ϕ

$$\phi^{(n)}(t + \Delta t) = \phi_a^*, \quad \phi^{(m)}(t + \Delta t) = \phi_b^*, \quad (4-32)$$

onde,

$$\phi_a^* = \phi_b^* = \frac{1}{2} (\phi_a + \phi_b). \quad (4-33)$$

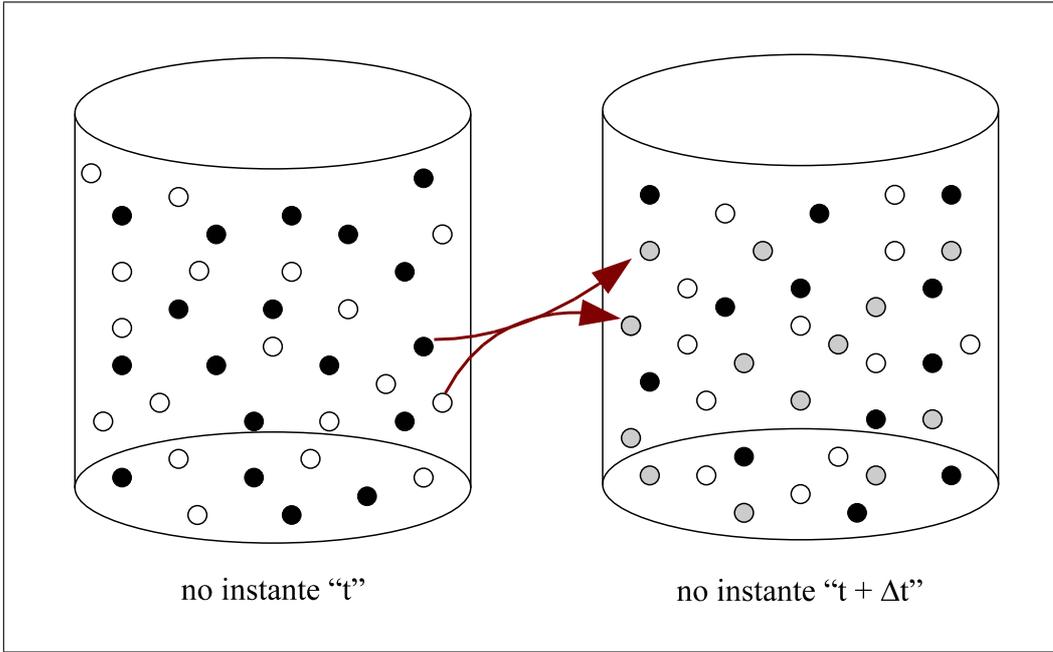


Figura 4.2: Ilustração do tempo de funcionamento do modelo de mistura de Coalescência e Redispersão (CD) ou modelo de Curl.

Este processo de mistura é realizado para cada par de partículas escolhidas. Para as partículas não escolhidas, os valores de ϕ permanecem inalterados.

Cabe notar que este modelo de mistura preserva o valor médio

$$\frac{1}{2}(\phi_a^* + \phi_b^*) = \frac{1}{2}(\phi_a + \phi_b), \quad (4-34)$$

enquanto que a variância diminui com o tempo

$$\phi_a^{*2} + \phi_b^{*2} = \phi_a^2 + \phi_b^2 - \frac{1}{2}(\phi_a - \phi_b)^2 \leq \phi_a^2 + \phi_b^2. \quad (4-35)$$

Uma deficiência importante deste modelo pode ser constatada no caso em que a PDF inicial é composta por funções delta. Neste caso o número de funções delta tende ao infinito com o tempo, e uma distribuição contínua nunca é atingida, o que é claramente inaceitável. Entretanto, este modelo serve de base para o desenvolvimento de modelos de mistura mais realistas.

4.4.2 Modelo de Curl Modificado

Dopazo (1979) e Janicka, *et al.* (1979), independentemente, sugeriram uma modificação para o modelo de Curl que resulta em uma PDF contínua, que consiste em substituir a Eq. (4-33) por

$$\phi_a^* = (1 - \alpha)\phi_a + \frac{1}{2}\alpha(\phi_a + \phi_b), \quad (4-36)$$

$$\phi_b^* = (1 - \alpha)\phi_b + \frac{1}{2}\alpha(\phi_a + \phi_b), \quad (4-37)$$

onde o papel do parâmetro α controla o grau de mistura. Note-se que para $\alpha = 0$ a mistura não acontece e que com $\alpha = 1$ o modelo de Curl é obtido. Qualquer que seja o valor fixo de α ($0 < \alpha < 1$) subsiste o problema da discontinuidade que apresenta o modelo simples de Curl (CM) quanto a PDF inicial é uma função composta de deltas de Dirac. Porém, se α for prescrito sob a forma de uma variável aleatória com uma PDF contínua, $A(\alpha)$, então o modelo de Curl modificado resulta em PDF's contínuas (Pope, 1982).

A escolha mais simples da PDF $A(\alpha)$ sugerida por Dopazo (1979) e Janicka, *et al.* (1979), é

$$A(\alpha) = 1. \quad (4-38)$$

Note-se que o modelo de Curl corresponde a $A(\alpha) = \delta(1 - \alpha)$. Pope (1982) propôs relações funcionais para $A(\alpha)$ baseadas na descrição da evolução da idade (*age-biased*) das partículas. Estas variantes não serão abordadas neste trabalho.

4.4.3

Modelo IEM/LMSE

O modelo IEM foi proposto independentemente em diferentes contextos por diversos autores (Soulard, 2005). De um lado, Villermaux e Devillon, (1972) utilizaram o modelo IEM para a modelização de reatores homogêneos. Por outro lado, Dopazo e O'Brien (1974) propuseram este modelo para a substituição do termo difusivo presente na equação de transporte de uma PDF conjunta do escalar.

O modelo IEM assume uma relaxação linear do escalar para seu valor médio

$$\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle = -\langle \omega_\phi \rangle (\psi - \langle \phi \rangle), \quad (4-39)$$

que, quando substituída na Eq. (4-1), resulta na equação de transporte da PDF correspondente ao modelo IEM:

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \omega_\phi \rangle (\psi - \langle \phi \rangle) P_\phi(\psi; t)]. \quad (4-40)$$

O comportamento deste modelo pode ser melhor apreciado no contexto Lagrangeano, isto é, seguindo a trajetória de uma partícula de fluido. O valor do escalar, ϕ , evolui de acordo com a lei da relaxação determinística (Gardiner, 1990):

$$d\phi = -\langle \omega_\phi \rangle (\phi - \langle \phi \rangle) dt. \quad (4-41)$$

No espaço amostral do escalar ψ , as partículas se deslocam em direção à média $\langle\phi\rangle$ com uma velocidade proporcional à sua distância de $\langle\phi\rangle$ neste espaço amostral. Portanto, as partículas convergem para a posição $\psi = \langle\phi\rangle$ quando $t \rightarrow \infty$.

Este modelo é muito utilizado em simulações que envolvem combustão em escoamento turbulento, devido à sua simplicidade e ao baixo custo computacional. Porém, este modelo não inclui nenhuma informação correspondente aos gradientes escalares, o que traz como consequência que a PDF sempre mantém sua forma original (Pope, 1985).

4.5

Modelos de Mistura Recentes

A necessidade de modelar a taxa de dissipação do escalar, ε_ϕ , e a interação complexa existente entre os campos turbulentos de velocidade e de escalar dificultam a descrição do processo de micro-mistura. Esta interação leva à existência de estruturas escalares distribuídas em um amplo espectro de escalas, as quais interagem umas com as outras.

Com o intento de melhorar a descrição física do fenômeno difusivo-dissipativo da mistura, Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) formularam três novos modelos de micro-mistura, estes são o modelo de Langevin (LM), o modelo IEM Estendido (EIEM) e o modelo de Langevin Estendido (ELM).

4.5.1

Modelo de Langevin

O modelo de Langevin é baseado na soma de dois termos, um termo determinístico o qual é equivalente ao modelo IEM, e um termo estocástico associado a um processo Wiener. Pope (1985), propôs pela primeira vez um modelo de mistura do tipo Langevin aplicado a campos escalares, o qual atende à maioria das propriedades desejáveis que um modelo de mistura deve possuir, em particular no que diz respeito à obtenção de PDFs que tendem assintoticamente para uma Gaussian:

$$d\phi = G\langle\omega_\phi\rangle(\phi - \langle\phi\rangle)dt + \sqrt{B\langle\omega_\phi\rangle\langle\phi'^2\rangle}dW. \quad (4-42)$$

Porém, o modelo proposto por Pope (1985) viola o princípio da delimitação. Nesta equação G e B são as constantes do modelo e dW representa o processo Wiener. O segundo termo do lado direito desta equação acarreta uma mudança aleatória de ϕ com média zero e variância $B\langle\omega_\phi\rangle\langle\phi'^2\rangle dt$.

Este modelo procura representar a transferência da variância do escalar devida às grandes escalas através do termo determinístico, e a dissipação

escalar nas pequenas escalas através do termo estocástico.

O modelo do tipo Langevin proposto por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) pode ser representado por uma combinação das Eqs. (4-1) e (4-4):

$$\frac{\partial P_\phi(\psi; t)}{\partial t} = - [1 + r_0(t)] \frac{\partial}{\partial \psi} [\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)] + r_0(t) \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} [\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle P_\phi(\psi; t)], \quad (4-43)$$

que respeita a propriedade da delimitação. Na Eq. (4-43), $r_0(t)$ é um parâmetro positivo arbitrário. Esta equação possui um termo difusivo no qual intervém a taxa de dissipação condicionada do escalar $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$, e um termo de deriva no qual aparece o laplaciano condicionado do escalar $\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle$. A equação diferencial estocástica equivalente é (Gardiner, 1990):

$$d\phi = (1 + r_0(t)) \langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle dt + \sqrt{2r_0(t) \langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle} dW. \quad (4-44)$$

Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) utilizaram o modelo IEM para $\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle$ e um modelo algébrico para $\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle$

$$\langle \Gamma \nabla^2 \phi | \psi \rangle = -\langle \omega_\phi \rangle (\psi - \langle \phi \rangle), \quad (4-45)$$

$$\langle \varepsilon_\phi | \psi \rangle = \langle \omega_\phi \rangle \frac{\sigma^2}{\sigma_M^2 - \sigma^2} \psi (1 - \psi), \quad (4-46)$$

onde σ_M^2 é a variância máxima do campo escalar ϕ . A propriedade de delimitação é garantida devido à função limitante $\psi(1 - \psi)$. Esta função limitante, facilmente justificada no caso de um escalar simples (Soulard *et al.*, 2004), ainda não foi estendida para casos multi-escalares. Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) definem

$$r_0(t) = d_0 \frac{\sigma_M^2 - \sigma^2}{\sigma_M^2}, \quad (4-47)$$

o que resulta em

$$d\phi = - \left(1 + d_0 \frac{\sigma_M^2 - \sigma^2}{\sigma_M^2} \right) \langle \omega_\phi \rangle (\phi - \langle \phi \rangle) dt + \sqrt{2d_0 \frac{\sigma^2}{\sigma_M^2} \langle \omega_\phi \rangle \phi (1 - \phi)} dW, \quad (4-48)$$

ou de, forma compacta,

$$d\phi = -a \langle \omega_\phi \rangle (\phi - \langle \phi \rangle) dt + \sqrt{2b \langle \omega_\phi \rangle \phi (1 - \phi)} dW. \quad (4-49)$$

onde

$$a = 1 + d_0 \left(\frac{\sigma_M^2 - \sigma^2}{\sigma_M^2} \right). \quad (4-50)$$

$$b = d_0 \frac{\sigma^2}{\sigma_M^2}. \quad (4-51)$$

Note-se que o valor de d_0 controla a relaxação da PDF, para $d_0 = 0$ o modelo IEM é recuperado.

A equação da evolução da variância, que pode ser derivada da Eq. (4-49), demonstra que esta é função monótona decrescente do tempo que não depende da escolha de d_0 . Uma vez que $r_0(t = 0) = 0$ e $r_0(t \rightarrow \infty) = d_0$, o modelo de Langevin (LM) proposto por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001) tende para o modelo IEM para tempos infinitamente longos, garantindo assim a invariância da forma assintótica da PDF.

4.5.2 Modelos IEM Estendido e de Langevin Estendido

Os modelos IEM estendido (EIEM) e Langevin estendido (ELM) também foram propostos por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001). Estes modelos tem como base os modelos IEM e Langevin. Uma distribuição de frequência de mistura é introduzida de modo a representar o espectro de frequências próprias de um escoamento turbulento (Soulard, 2005). Para este fim, considera-se um processo estocástico intermitente, ω_ϕ , de modo que cada partícula de fluido possui sua própria frequência e comporta-se como se pertencesse a diferentes estruturas.

Nos modelos estendidos formulados por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001), o valor do escalar não relaxa para o valor médio global do escalar, mas sim para um escalar característico da estrutura turbulenta.

A evolução da concentração de uma partícula de fluido descrita pelo modelo EIEM é dada por

$$d\phi = -\omega_\phi (\phi - \langle \phi | \omega_\phi \rangle) dt. \quad (4-52)$$

Este modelo possui duas diferenças com respeito ao modelo IEM

- A frequência de mistura média, $\langle \omega_\phi \rangle$, substituída por um processo estocástico, ω_ϕ , de modo que uma faixa de escalas do tempo é levada em consideração durante o processo de mistura.
- O escalar médio $\langle \phi \rangle$, é substituído por sua média condicionada $\langle \phi | \omega_\phi \rangle$ o que garante a conservação das média, $\langle \phi \rangle$.

Aplicando-se o operador média na Eq. (4-52), tem-se

$$d\langle \phi \rangle = -\langle \omega_\phi \phi \rangle dt + \langle \omega_\phi \langle \phi | \omega_\phi \rangle \rangle dt = 0, \quad (4-53)$$

pois, de acordo com a fórmula de Bayes, $\langle \omega_\phi \phi \rangle = \langle \omega_\phi \langle \phi | \omega_\phi \rangle \rangle$, o que justifica a substituição de $\langle \phi | \omega_\phi \rangle$ por $\langle \phi \rangle$.

O modelo de Langevin estendido (ELM), também resulta da substituição, na Eq. (4-49), da frequência média pelo seu valor instantâneo, o que leva a

$$d\phi = -a\omega_\phi (\phi - \langle \phi | \omega_\phi \rangle) dt + \sqrt{2b\omega_\phi \phi (1 - \phi)} dW. \quad (4-54)$$

$$a = 1 + d_0 \left(\frac{\sigma_{M^*}^2 - \sigma_{\omega_\phi}^2}{\sigma_{M^*}^2} \right). \quad (4-55)$$

$$b = d_0 \frac{\sigma_{\omega_\phi}^2}{\sigma_{M^*}^2}. \quad (4-56)$$

Pode ser demonstrado que a variância, $\sigma_{\omega_\phi}^2$, é representada por

$$\sigma_{\omega_\phi}^2 = \langle \phi^2 | \omega_\phi \rangle - \langle \phi | \omega_\phi \rangle^2, \quad (4-57)$$

onde, a variância máxima, $\sigma_{M^*}^2$, é definida como

$$\sigma_{M^*}^2 = \langle \phi | \omega_\phi \rangle (1 - \langle \phi | \omega_\phi \rangle). \quad (4-58)$$

A frequência de mistura estocástica, ω_ϕ , é característica de uma estrutura escalar. Um modelo que descreve a frequência da dissipação escalar instantânea é (Soulard *et al.*, 2004)

$$\omega_\phi = \frac{\varepsilon_\phi}{\sigma^2}, \quad (4-59)$$

onde σ^2 representa a variância instantânea não condicionada que mede as flutuações do campo escalar. Sabel'nikov e Gorokhovski (2001) propuseram utilizar um modelo no qual a frequência de mistura do escalar é proporcional à frequência turbulenta, $\omega = \varepsilon/k$:

$$\omega_\phi = \Omega\omega, \quad (4-60)$$

onde $\Omega(t)$ é uma função que deve respeitar o decaimento da variância, σ^2 , que ocorre em presença de turbulência homogênea. A função $\Omega(t)$ é determinada ao comparar a Eq. (4-11), equação exata da queda da variância, com aquela obtida substituindo-se a Eq. (4-60) na Eq. (4-52), multiplicando o resultado por $2(\phi - \langle \phi \rangle)$ e, finalmente, aplicando a média

$$\frac{d\langle \phi'^2 \rangle}{dt} = -2\Omega [\langle \omega \phi^2 \rangle - \langle \omega \phi \langle \phi | \omega \rangle \rangle] = -2\Omega \langle \omega (\langle \phi^2 | \omega \rangle - \langle \phi | \omega \rangle^2) \rangle. \quad (4-61)$$

Neste caso, a regra de Bayes permite escrever que $\langle \omega \phi^2 \rangle = \langle \omega \langle \phi | \omega \rangle^2 \rangle$. A comparação das equações (4-11) e (4-61) fornece

$$\Omega = \frac{\langle \varepsilon_\phi \rangle}{\langle \omega (\langle \phi^2 | \omega \rangle - \langle \phi | \omega \rangle^2) \rangle}. \quad (4-62)$$

O modelo de Langevin estendido (ELM) também utiliza esta definição de $\Omega(t)$ (Soulard, 2005).

Finalmente, a frequência instantânea do campo de velocidade turbulento, ω , também precisa ser modelada. Pope e Chen (1990), ao levar em consideração o comportamento intermitente da taxa de dissipação viscosa instantânea do campo de velocidade, aproximam ω por uma distribuição Log-normal. Para este fim, define-se a variável aleatória χ como

$$\chi(t) \equiv \ln[\varepsilon(t)/\langle\varepsilon\rangle] = \ln[\omega(t)/\langle\omega\rangle]. \quad (4-63)$$

Se ω ou ε possuem distribuição Log-normal, então χ é descrita por uma distribuição Normal. Desta forma, um modelo log-normal de ω é obtido adotando-se um processo markoviano clássico do tipo Orstein-Uhlenbeck (Gardiner, 19990), para descrever χ :

$$\omega = \langle\omega\rangle e^{\chi}, \quad (4-64)$$

$$d\chi = -\frac{\chi - m_1}{T_\chi} dt + \sqrt{\frac{2m_2}{T_\chi}} dW, \quad (4-65)$$

que é a formulação proposta por Pope e Chen (1990), onde W é um processo Wiener, m_1 e m_2 são, respectivamente, a média e a variância de χ :

$$m_1 = \langle\chi\rangle, \quad (4-66)$$

$$m_2 = \langle(\chi - \langle\chi\rangle)^2\rangle, \quad (4-67)$$

e T_χ é a escala de tempo integral de χ

$$T_\chi^{-1} = C_\chi \langle\omega\rangle, \quad (4-68)$$

e C_χ é uma constante igual a 1.6 (Pope e Chen, 1990). Os cálculos de DNS realizados por Yeung e Pope (1989) em turbulência homogênea isotrópica sugerem que, para números de Reynolds moderados $38 \leq Re_\lambda \leq 96$, existe uma dependência de m_2 com relação a Re_λ

$$m_2 = 0,29 \ln Re_\lambda - 0,36, \quad (4-69)$$

onde Re_λ é o número de Reynolds baseado na escala de Taylor. Uma vez que χ é uma variável aleatória distribuída normalmente, tem-se que

$$m_1 = -\frac{1}{2} m_2. \quad (4-70)$$

Desta forma, completa-se a formulação geral dos modelos de mistura IEM Estendido (EIEM) e Langevin Estendido (ELM) seguindo a abordagem

Lagrangeana. Uma forma simplificada para o modelo EIEM é obtida ao substituir a equação (4-60) na equação (4-52):

$$d\phi = -\Omega\omega(\phi - \langle\phi|\omega\rangle) dt. \quad (4-71)$$

De modo análogo, ao substituir a Eq. (4-60) na Eq. (4-54), obtém-se uma forma simplificada do modelo Langevin estendido (Sabel`nikov e Gorokhovski, 2001)

$$d\phi = -a\Omega\omega(\phi - \langle\phi|\omega\rangle) dt + \sqrt{2b\Omega\omega\phi(1-\phi)}dW, \quad (4-72)$$

onde a e b são

$$a = 1 + d_0 \frac{\langle\phi(1-\phi)|\omega\rangle}{\sigma_M^2}, \quad (4-73)$$

$$b = d_0 \frac{\langle\phi^2|\omega\rangle - \langle\phi|\omega\rangle^2}{\sigma_M^2}. \quad (4-74)$$

Note-se, da Eq.(4-72), que no caso em que $d_0 = 0$, o modelo IEM Estendido [Eq. (4-71)] é obtido. Utilizando técnicas estocásticas, é possível obter a equação da evolução da PDF conjunta $P_{\phi,\chi}(\psi, \varphi; t)$ de ϕ e χ para os modelos estendidos EIEM e ELM. Porém, neste trabalho, a transformação para o referencial Euleriano será efetuada para o caso, mais geral, aquele que descreve o funcionamento de um PaSR.

Note-se que os três modelos de mistura propostos por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001), isto é, os modelos EIEM, LM e ELM, respeitam a propriedade da delimitação, propriedade crítica, em particular no caso de modelos do tipo de Langevin (LM e ELM) aplicados a campos escalares. Em consequência, uma descrição adequada é obtida do processo difusivo-dissipativo de micro-mistura, mais realista do que aquela obtida com o modelo IEM.

4.6

O Reator Parcialmente Agitado

Nas seções precedentes, foi abordado o transporte turbulento de um escalar passivo, o qual é modificado pela presença de reações químicas. Nesta seção, serão descritos os principais aspectos do transporte de um escalar reativo no âmbito de um modelo de Reator Parcialmente Agitado (PaSR) no qual ocorre a combustão de uma mistura. Cabe lembrar que, no limite de uma mistura muito rápida o PaSR tende para um Reator Perfeitamente Agitado (*Partially Stirred Reactor, PSR*) e no limite de uma mistura muito lenta o PaSR tende para um processo reativo descrito por um Reator com escoamento tipo Pistão (*Plug Flow Reactor, PFR*) (Sabel`nikov e Figueira da Silva, 2002).

A formulação do PaSR será desenvolvida considerando como campo escalar, ϕ , uma variável reativa denominada variável de progresso de reação, c , definida mais adiante.

4.6.1 Equações Fundamentais da Cinética Química

Nesta seção será apresentada a formulação que descreve a cinética das reações químicas, e as hipóteses simplificadoras adotadas que permitem chegar à formulação do termo da produção química para uma reação única global, termo necessário na descrição do PaSR para um escalar reativo.

Considere-se um sistema químico composto de K espécies químicas reagindo através de M reações elementares

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{km} \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^K \nu''_{km} \mathcal{M}_k, \quad m = 1, \dots, M, \quad (4-75)$$

onde \mathcal{M}_k é o símbolo químico da espécie k , ν'_{km} e ν''_{km} são os coeficientes estequiométricos da k -ésima espécie na m -ésima reação. A equação da conservação da massa é

$$\sum_{k=1}^K \nu'_{km} W_k = \sum_{k=1}^K \nu''_{km} W_k, \quad m = 1, \dots, M, \quad (4-76)$$

onde, W_k é a massa molar da k -ésima espécie. A equação anterior, também se pode escrever de maneira seguinte

$$\sum_{k=1}^K \nu_{km} W_k = 0 \quad m = 1, \dots, M. \quad (4-77)$$

onde

$$\nu_{km} = \nu'_{km} - \nu''_{km}. \quad (4-78)$$

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

$$S_k = \sum_{m=1}^M S_{km} = W_k \sum_{m=1}^M \nu_{km} q_m, \quad k = 1, \dots, K, \quad (4-79)$$

onde q_m é a taxa da m -ésima reação. Somando todas a taxas de produção das K espécies, mostra-se que

$$\sum_{k=1}^K S_k = \sum_{k=1}^K \left[W_k \sum_{m=1}^M \nu_{km} q_m \right] = \sum_{m=1}^M \left[q_m \sum_{k=1}^K \nu_{km} W_k \right] = 0. \quad (4-80)$$

A taxa da m -ésima reação, q_m , é dada por

$$q_m = k_m^f \prod_{k=1}^K [X_k]^{\nu'_{km}} - k_m^r \prod_{k=1}^K [X_k]^{\nu''_{km}}. \quad (4-81)$$

Nesta equação $[X_k]$ é a concentração da k -ésima espécie, enquanto que k_m^f e k_m^r são as constantes de reação direta e reversa da m -ésima reação respectivamente. As concentrações molares podem ser escritas como

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k} = \frac{\rho_k}{W_k} = \frac{\rho}{\bar{W}} X_k, \quad (4-82)$$

onde, Y_k , X_k , e ρ_k representam, respectivamente, a fração mássica, a fração molar e a densidade parcial da k -ésima espécie, e \bar{W} é a massa molecular média. As quantidades k_m^f e k_m^r constituem um fator importante na modelagem dos processos químicos. e serão descritas mediante a utilização da lei empírica de Arrhenius:

$$k_m^f = A_m T^{\beta_m} \exp\left(-\frac{E_m}{RT}\right), \quad (4-83)$$

onde A_m , β_m e E_m são conhecidos como a constante pré-exponencial, o expoente da temperatura e a energia de ativação da m -ésima reação. A constante k_m^r pode ser calculada a partir de k_m^f e da constante de equilíbrio de k -ésima reação elementar $K_{p,m}$ (Poinot e Veynante, 2005).

4.6.2 A taxa de produção química

Nesta sub-seção, será determinada a taxa de produção química adimensional para uma única reação global irreversível. Para isto, serão consideradas as seguintes hipóteses:

1. Reação de passo único ($m = 1$) e irreversível ($k_m^r = 0$), isto é,



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

2. O combustível C é o reagente minoritário, ou seja, $[X_C] \ll [X_O]$, o que implica em

$$Y_O = \frac{\dot{m}_O}{\dot{m}_O + \dot{m}_C} \approx 1 = cte. \quad (4-85)$$

3. A difusividade do combustível é igual à difusividade térmica da mistura, isto é,

$$Le = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = 1.$$

4. O número de Mach é extremamente pequeno $M_a \ll 1$.

5. O expoente de temperatura presente na lei de Arrhenius é nulo

$$\beta = 0. \quad (4-86)$$

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

$$q = [X_C] [X_O] A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (4-87)$$

Utilizando as igualdades da Eq. (4-82) na Eq. (4-87), tem-se

$$q = \left(\frac{\rho}{W}\right)^2 X_C X_O A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (4-88)$$

O tempo característico da reação química é definido como

$$\tau_c = \left[\frac{\rho}{W} X_C|_o X_O|_o A \exp\left(-\frac{E}{RT_o}\right) \right]^{-1}. \quad (4-89)$$

Onde $X_C|_o$, $X_O|_o$ e T_o , são os valores iniciais, respectivamente, das frações molares de combustível e de oxidante e da temperatura. Combinando as Eqs. (4-88) e (4-89), tem-se

$$q = \frac{1}{\tau_c} \frac{X_C}{X_C|_o} \frac{X_O}{X_O|_o} \exp\left(-\frac{E}{RT} + \frac{E}{RT_o}\right). \quad (4-90)$$

Classicamente, define-se a variável de progresso da reação química como

$$c = 1 - \frac{X_C}{X_C|_o} = \frac{T - T_0}{T_{ad} - T_0}, \quad (4-91)$$

onde T é a temperatura, T_{ad} é a temperatura de combustão adiabática e T_0 é a temperatura de entrada do reator. Note-se que $c = 0$ corresponde aos gases não queimados e $c = 1$ aos gases queimados.

Definindo o calor de reação reduzido, α , e a energia de ativação reduzida, β , como

$$\alpha = \frac{T_{ad} - T_0}{T_0}, \quad (4-92)$$

$$\beta = \frac{E}{RT_0}, \quad (4-93)$$

e substituindo as Eqs. (4-85), (4-91), (4-92) e (4-93) na expressão (4-90), chega-se à seguinte expressão simplificada da taxa de progresso de uma reação única global

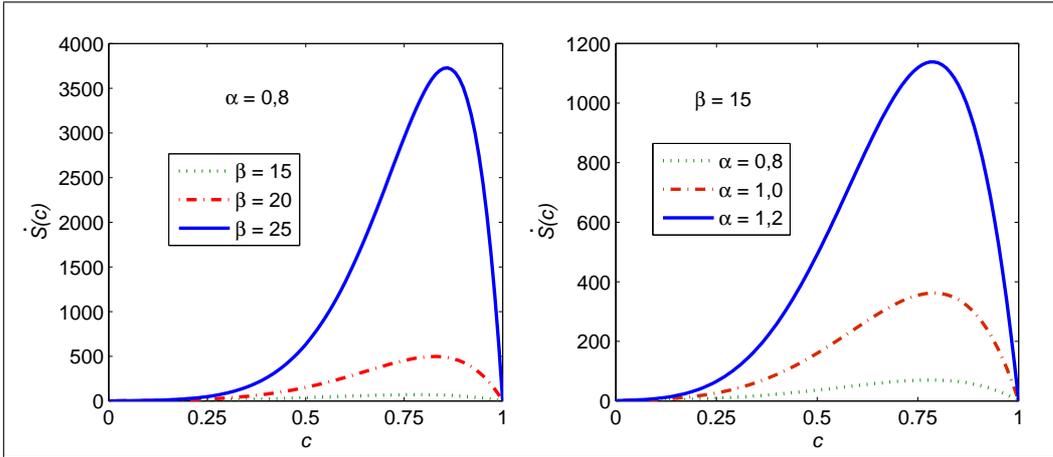


Figura 4.3: Taxa de produção adimensional $\dot{S}(c)$ em função da variável de progresso da reação, c , para diferentes valores de energia de ativação reduzida, β , e calor de reação reduzido, α .

$$q = \frac{1}{\tau_c} \frac{\rho}{\bar{W}} (1 - c) \exp\left(\beta \frac{c}{c + 1/\alpha}\right). \quad (4-94)$$

A taxa de produção química, S , relaciona-se com a taxa de reação única global, q , e a taxa de produção química adimensional \dot{S} pela seguinte relação

$$S(c) = \bar{W}q(c) = \frac{\rho}{\tau_c} \dot{S}(c), \quad (4-95)$$

onde,

$$\dot{S}(c) = (1 - c) \exp\left(\beta \frac{c}{c + 1/\alpha}\right). \quad (4-96)$$

Este termo químico adimensional, $\dot{S}(c)$, apresenta uma dependência fortemente não linear dos valores da energia de ativação reduzida, β , e do calor de reação reduzido, α , tal como mostrado na figura 4.3.

4.6.3 Formulação Matemática do PaSR

Partindo da Eq. (3-30), considera-se como variável ϕ , o escalar reativo, c , que define a variável de progresso de uma reação, para consecutivamente, substituir a Eq. (4-95) na Eq. (3-30), obtendo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c(\theta; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_r} [\delta(\theta) - P_c(\theta; t)] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \theta} [\langle \Gamma \nabla^2 c | \theta \rangle P_c(\theta; t)] - \frac{1}{\tau_c} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_c(\theta; t)], \end{aligned} \quad (4-97)$$

onde, θ é a variável amostral que corresponde à variável aleatória do escalar reativo c . O segundo termo do lado direito corresponde à micro-mistura e necessita ser modelado.

Sabel`nikov e Figueira da Silva (2002) desenvolveram uma solução semi-analítica do comportamento permanente da Eq. (4-97) ao levar em conta o modelo de interação pela troca com a média (IEM) na substituição do termo difusivo da Eq. (4-97),

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c(\theta; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_r} [\delta(\theta) - P_c(\theta; t)] \\ &+ \frac{1}{\tau_m} \frac{\partial}{\partial \theta} [(\theta - \langle c \rangle) P_c(\theta; t)] - \frac{1}{\tau_c} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_c(\theta; t)]. \end{aligned} \quad (4-98)$$

Introduzindo os parâmetros adimensionais \mathcal{X} e \mathcal{Y} como sendo a razão entre o tempo de residência e o tempo de mistura e o tempo da reação química, respectivamente, a Eq. (4-98) pode ser re-escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_c(\theta; t)}{\partial t^*} &= [\delta(\theta) - P_c(\theta; t)] \\ &+ \mathcal{X} \frac{\partial}{\partial \theta} [(\theta - \langle c \rangle) P_c(\theta; t)] - \mathcal{Y} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_c(\theta; t)]. \end{aligned} \quad (4-99)$$

Onde $t^* = t/\tau_r$, $\mathcal{X} = \tau_r/\tau_m$ e $\mathcal{Y} = \tau_r/\tau_c$. O parâmetro \mathcal{X} exprime a relação entre os processos de macro e micro-mistura, isto é, para um valor de $\mathcal{X} \rightarrow \infty$, ou seja, quando $\tau_m \ll \tau_r$, o modelo de um Reator Perfeitamente Agitado é atingido. Para o caso em que $\mathcal{X} = 0$, a solução estacionária do PaSR é reduzida àquela de um Reator com escoamento do tipo Pistão (PFR).

O parâmetro \mathcal{Y} representa o número de Damkhöler baseado no tempo de residência. Note-se que, a definição usual do número de Damkhöler é $Da = \tau_m/\tau_c = \mathcal{Y}/\mathcal{X}$. A figura 4.4 ilustra o comportamento do PaSR como função dos parâmetros \mathcal{X} e \mathcal{Y} .

Nesta figura observa-se que, quando $\mathcal{X} \rightarrow \infty$, a solução PaSR aproxima-se da curva em “S” clássica do PSR. Esta figura também mostra que existe

1. Um domínio $0 < \mathcal{Y} < \mathcal{Y}'_1$ na qual apenas uma solução é obtida.
2. Uma faixa $\mathcal{Y}'_1 < \mathcal{Y} < \mathcal{Y}'_2$, na qual, três soluções são possíveis no PaSR.
3. Um domínio $\mathcal{Y}'_2 < \mathcal{Y} < \infty$, na qual apenas uma solução é possível.

Esta figura mostra claramente que, entre os limites do PaSR e do processo de mistura, uma família de soluções existe que corresponde aos diversos graus de mistura possíveis.

Para estudar as soluções possíveis da equação de transporte da PDF no caso reativo, o termo difusivo da Eq. (4-97) será modelado pelos modelos introduzidos na seção 4.5. Motivo pela qual, o modelo de Langevin estendido (ELM),

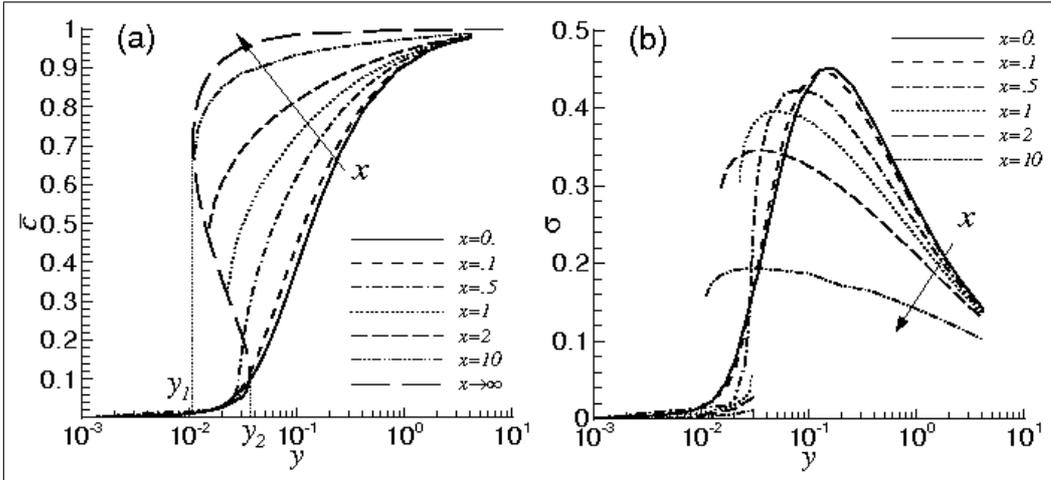


Figura 4.4: Média (a) e Desvio padrão (b) da variável de progresso de uma reação c como função de Y e para diferentes valores de X , resultados obtidos mediante a solução semi-analítica e estacionária de PaSR utilizando o modelo de mistura IEM para valores de $\alpha = 0.8$ e $\beta = 15$ (Sabel'nikov e Figueira da Silva, 2002).

que engloba os demais modelos desenvolvidos por Sabel'nikov e Gorokhovski, (2001), será utilizado.

A equação de transporte da PDF conjunta que modela o PaSR, proposta neste trabalho, é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)}{\partial t} &= \frac{1}{\tau_r} [\delta(\theta) - P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial}{\partial \theta} [a\Omega e^\varphi (\theta - \langle c|\varphi \rangle) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \\ &+ \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} [b\Omega e^\varphi \theta (1 - \theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial}{\partial \varphi} [C_\chi (\varphi - m_1) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \quad (4-100) \\ &+ \frac{1}{\tau_t} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [C_\chi m_2 P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] - \frac{1}{\tau_c} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{S}(\theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)]. \end{aligned}$$

Nesta equação, o termo do lado esquerdo representa a evolução transiente da PDF conjunta de c e χ , enquanto que os processos de entrada-saída dos gases do reator são representados pelo primeiro termo do lado direito. Os demais termos descrevem, na ordem, os processos difusivos-dissipativos de c e χ e o termo de produção química.

A Eq. (4-100) é uma equação diferencial parcial de segunda ordem na qual φ é o espaço amostral da variável aleatória χ , a qual modela a frequência turbulenta como sendo um processo estocástico do tipo Orstein-Uhlenbeck (Gardiner, 1990). O tempo característico da turbulência τ_t é o inverso da frequência turbulenta média, isto é, $\tau_t = \langle \omega \rangle^{-1}$.

Definido \mathcal{Z} como sendo a razão entre o tempo de residência e o tempo turbulento, isto é, $\mathcal{Z} = \tau_r / \tau_t = \tau_r \langle \omega \rangle$, a forma adimensional da Eq. (4-100) é

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)}{\partial t^*} &= [\delta(\theta) - P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \mathcal{Z} \frac{\partial}{\partial \theta} [a\Omega e^\varphi (\theta - \langle c|\varphi \rangle) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \\
&+ \mathcal{Z} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} [b\Omega e^\varphi \theta (1 - \theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] + \mathcal{Z} \frac{\partial}{\partial \varphi} [C_\chi (\varphi - m_1) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] \quad (4-101) \\
&+ \mathcal{Z} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [C_\chi m_2 P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)] - \mathcal{Y} \frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{\mathcal{S}}(\theta) P_{c,\chi}(\theta, \varphi; t)].
\end{aligned}$$

Neste caso, os valores de a , b e Ω , presentes nas Eqs (4-100) e (4-101) são

$$a = 1 + d_0 \frac{\langle c(1-c)|z \rangle}{\sigma_M^2}, \quad (4-102)$$

$$b = d_0 \frac{\langle c^2|z \rangle - \langle c|z \rangle^2}{\sigma_M^2}, \quad (4-103)$$

$$\Omega = \frac{\sigma \mathcal{X}}{\langle z(\langle c^2|z \rangle - \langle c|z \rangle^2) \rangle}. \quad (4-104)$$

Nas Eqs. (4-102), (4-103) e (4-104), z representa o modelo estocástico da frequência turbulenta do campo de velocidade em forma adimensional:

$$z = \tau_r \langle \omega \rangle e^\chi = \mathcal{Z} e^\chi. \quad (4-105)$$

As Eqs. (4-101)–(4-104), descrevem o modelo de um PaSR para o caso simplificado de uma reação única global governada pela lei de Arrhenius e no qual a micro-mistura obedece ao modelo de Langevin estendido (ELM). Este conjunto de equações representa o caso generalizado na formulação dos modelos de mistura a serem abordados neste trabalho. Isto é, partindo das Eqs. (4-101)–(4-104) e adotando um valor de $d_0 = 0$, o terceiro termo da Eq. (4-101) é eliminado, o que resulta no modelo IEM estendido (EIEM).

Da mesma forma, partindo das Eqs. (4-101)–(4-104) e considerando a variável estocástica z uma constante, tem-se, $\chi = 0$, $\mathcal{Z} = \mathcal{X}$ e $\Omega = C_\phi = 1$. Além disto as médias condicionais presentes nas Eqs. (4-102) e (4-103) são reduzida a médias incondicionais e, finalmente, o quarto e quinto termos da Eq. (4-101) são eliminados. Desta forma, consegue-se a formulação de um PaSR obedecendo ao modelo de Langevin.

Por último, se $d_0 = 0$ e $z = cte$ simultaneamente, consegue-se a formulação de um PaSR obedecendo ao modelo IEM clássico, descrita pela Eq. (4-99).

A Eq. (4-101) não possui solução analítica conhecida devido à sua complexidade. A abordagem numérica mais factível para resolver equações de transporte da PDF, tais como aquele descrito nas Eqs. (4-99) e (4-101), é mediante a simulação estocástica pela técnica de Monte-Carlo.

4.7

Solução Numérica do PaSR: a Técnica de Monte-Carlo

Um das principais dificuldades associadas à resolução da equação de transporte da PDF [Eq. (A-40)] mediante a utilização de métodos clássicos de discretização é o alto custo computacional associado ao grande número de variáveis independentes necessárias para se representar os processos estocásticos no espaço euclidiano de velocidade, de composição, etc. Considerando-se a forma mais simplificada da equação de transporte da PDF para o PaSR [Eq. (4-99)], uma dificuldade suplementar aparece pois esta equação apresenta uma singularidade no espaço amostral da variável de progresso da reação θ . Esta singularidade, exprime a existência de valores de composição proibidos na vizinhança de $c = 1$ sempre que o tempo de residência é finito (Sabel`nikov e Figueira da Silva 2002).

A resolução das Eqs. (4-99) ou (4-101) podem ser efetuadas mediante a simulação estocástica de um sistema estatisticamente equivalente (Gardiner, 1990) pela técnica de Monte-Carlo. Esta técnica emprega amostras representativas chamadas “partículas”, que representam os processos físicos e químicos do sistema.

A principal vantagem da técnica de Monte-Carlo é que o custo computacional, cresce linearmente com o número de variáveis independentes. Este fator é decisivo no estudo dos casos reativos quando o custo computacional é dominado pela dependência exponencial do termo de produção química.

Dos quatros modelos de micro-mistura considerados no estudo do PaSR, somente o modelo IEM foi abordado em detalhe no caso reativo por Correa (1995), Chen (1997) e Sabel`nikov e Figueira da Silva (2002). Os demais, formulados por Sabel`nikov e Gorokhovski (2001), foram avaliados no caso de mistura binária e quimicamente inerte (Soulard, 2005), mas seu comportamento ainda não foi estudado em presença de reação química, o que será feito neste trabalho mediante a utilização de uma técnica Monte-Carlo.

A solução da equação de transporte da PDF para o PaSR [Eq. (4-101)] utilizando a técnica Monte-Carlo, compreende as seguintes etapas (Chen, 1997):

- Inicialmente o reator contém N_p partículas, cada uma delas é caracterizada por um valor de concentração $c^{(n)}$, onde $n = 1, \dots, N_p$.
- Para cada passo de tempo, N_{sub} partículas são aleatoriamente escolhidas no reator e substituídas por partículas compostas de gases não queimados ($c = 0$). Desta forma, o tempo de residência é $\tau_r = N_p \Delta t / N_{sub}$, e Δt^* é o passo de tempo adimensional, definido como $\Delta t^* = \Delta t / \tau_r$.

- Cada partícula, evolui no tempo devido aos processos de micro-mistura e de reação química segundo

$$dc^{(n)} = \left[-Za\Omega e^{\chi} (c^{(n)} - \langle c|\chi \rangle) + \mathcal{Y}\dot{\mathcal{S}}(c^{(n)}) \right] dt^* + \sqrt{2Zb\Omega c^{(n)}(1 - c^{(n)})} dW_c, \quad (4-106)$$

$$d\chi^{(n)} = -ZC_{\chi}(\chi^{(n)} - m_1)dt^* + \sqrt{2ZC_{\chi}m_2}dW_{\chi}, \quad (4-107)$$

onde dW_c e dW_{χ} são as variações independentes de c e χ que obedecem a um processo de Wiener padrão com média nula e variância dt . Estas equações correspondem a um sistema de equações diferenciais estocásticas em acordo com a representação de Itô (Gardiner, 1990).

No presente estudo, no instante inicial todas as partículas aleatórias contêm somente gases não queimados, isto é, $c^{(n)}(t^* = 0) = 0$.

As Eq. (4-106) e (4-107) são um sistema fortemente não linear de Equações Diferenciais Estocásticas (SDEs) de primeira ordem, que representa no referencial Lagrangeano, a evolução das propriedades c e χ de uma partícula de fluido. Esta não linearidade provém do termo de produção química e sua solução numérica requer a utilização de métodos numéricos mais sofisticados do que usualmente empregados para resolver SDEs lineares.

4.8 Métodos Numéricos que Resolvem as Equações Diferenciais Estocásticas

Nesta seção é apresentada uma breve descrição dos métodos numéricos que resolvem SDEs. Em particular, o esquema de Milstein Taylor Implícito de convergência de ordem forte igual a 1,0 (Tian e Burrage, 2001), é escolhido para a discretização das Eqs. (4-106) e (4-107).

A forma geral da equação diferencial estocástica (SDE) que se pretende resolver é, de acordo com a interpretação de Itô (Gardiner, 1990; Tian e Burrage, 2001), dada por:

$$d\phi(t) = A[\phi(t), t] dt + \sum_{j=1}^{N_p} B_j[\phi(t), t] dW_j(t), \quad \phi(t_0) = \phi_0, \quad t \in [t_0, T]. \quad (4-108)$$

Nesta equação $A[\phi(t), t]$ representa o termo determinístico, chamado de coeficiente de deriva, $B_j[\phi(t), t]$ representa o coeficiente difusivo, e $dW_j(t)$, onde $j = 1, \dots, N_p$ correspondem ao processo Wiener, independentes entre si, cujos incrementos $\Delta W_j(t + \Delta t) = W_j(t + \Delta t) - W_j(t)$ são variáveis aleatórias

do tipo Normal $N(0, \Delta t)$. A solução desta equação diferencial estocástica é usualmente apresentada na seguinte forma integral

$$\phi(t) = \phi(t_0) + \int_{t_0}^t A[\phi(s), s] ds + \sum_{j=1}^{N_p} \int_{t_0}^t \{B_j[\phi(s), s]\} dW_j(s). \quad (4-109)$$

A abordagem mais empregada na resolução da Eq. (4-109) é a simulação de caminhos amostrais (*sample paths*) que consiste em uma aproximação pelo uso de tempos discretos. Isto é, é necessária a discretização do intervalo de tempo $[t_0, T]$, o que gera estes caminhos amostrais. Estes caminhos podem ser analisados mediante o uso de ferramentas estatísticas para determinar, por exemplo, a acurácia da aproximação numérica.

Neste trabalho, a discretização do intervalo de tempo $[t_0, T]$ é uniforme com o passo do tempo

$$h = \frac{T - t_0}{N}, \quad (4-110)$$

onde N é o número de intervalos que dividem $[t_0, T]$. O tempo discretizado pode ser expresso por

$$t_n = t_0 + nh, \quad n = 1, \dots, N. \quad (4-111)$$

O desenvolvimento de esquemas numéricos que resolvem as SDEs é objeto de trabalhos recentes (Burrage e Tian, 2000). Os esquemas desenvolvidos podem ser divididos em três categorias:

1. Esquemas numéricos de tipo explícito, nos quais, os coeficientes de deriva e de difusão são integrados de forma explícita.
2. Esquemas numéricos de tipo semi-implícito, em que o coeficiente de deriva é integrado implicitamente, porém, o coeficiente de difusão é explícito.
3. Esquemas numéricos de tipo implícito onde ambos coeficientes de deriva e de difusão são implícitos.

Como exposto no Cap. 2, a discretização numérica mais simples para resolver uma equação diferencial estocástica é o esquema numérico de *Euler-Maruyama*, que é uma generalização estocástica do método de Euler clássico. Para descrever o método de Euler escreve-se a SDE como:

$$d\phi(t) = A[\phi(t), t] dt + B[\phi(t), t] dW(t), \quad \phi(t_0) = \phi_0, \quad t \in [t_0, T], \quad (4-112)$$

Há três métodos de discretização de Euler:

1. O método de *Euler Explícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_n, t_n] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n, \quad (4-113)$$

2. O método de *Euler Semi-implícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n, \quad (4-114)$$

3. O método de *Euler Implícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B[\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n, \quad (4-115)$$

A variável aleatória ΔW_n é normalmente distribuída $N(0, \sqrt{h})$ com média e variância

$$E(\Delta W_n) = 0, \quad (4-116)$$

$$E[(\Delta W_n)^2] = h, \quad (4-117)$$

Cabe resaltar que todos os esquemas numéricos do tipo Euler que resolvem as SDEs possuem uma convergência de ordem forte igual a 0,5, (Burrage e Tian, 2000). O método de Euler é o resultado do truncamento de primeira ordem da expansão estocástica de Taylor (Gardiner, 1990). Expansões estocásticas de Taylor são obtidas generalizando as expansões determinísticas de Taylor e a fórmula de Itô (Tian e Burrage, 2001). Da mesma forma que acontece com as expansões determinísticas de Taylor na análise das equações diferenciais ordinarias (ODEs), as expansões estocásticas de Taylor possuem um papel fundamental na análise numérica das equações diferenciais estocásticas (SDEs).

As expansões estocásticas de Taylor são diretamente empregadas no desenvolvimento de esquemas numéricos para resolver SDEs. Um método derivado do truncamento das expansões de Taylor é o *método de Milstein* que para os casos explícito e semi-implícito torna-se, respectivamente, (Kloeden e Platen, 1992).

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_n, t_n] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n + \frac{1}{2}(BB')[\phi_n, t_n] [(\Delta W_n)^2 - h], \quad (4-118)$$

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A[\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B[\phi_n, t_n] \Delta W_n + \frac{1}{2}(BB')[\phi_n, t_n] [(\Delta W_n)^2 - h], \quad (4-119)$$

onde $B' = dB/d\phi$. Este método é caracterizado por uma convergência de ordem forte igual a 1 (Kloeden e Platen, 1992). Tian e Burrage (2001) partem dos métodos de *Taylor* do tipo implícito que resolvem SDEs de acordo à representação de Itô [Eq. 4-112], e propõem,

$$\phi_{n+1} = \phi_n + (A - BB') [\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B [\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n. \quad (4-120)$$

O termo de deriva da Eq (4-120) apresenta uma modificação com respeito ao método de *Euler Implícito*, [Eq. (4-115)]. Este método implícito modificado, quando aplicado a uma SDE linear com ruído multiplicativo, pode levar a soluções numéricas divergentes, o que caracteriza uma instabilidade numérica e acarreta a propagação de erros. Esta indesejável solução numérica da Eq. (4-120) em uma SDE linear resulta do termo aleatório.

Para evitar estas instabilidades, Tian e Burrage (2001), modificaram a contribuição no termo de deriva do termo estocástico. Obtém-se assim o método de *Euler-Taylor Implícito*,

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A [\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B [\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n - (BB') [\phi_{n+1}, t_{n+1}] (\Delta W_n)^2. \quad (4-121)$$

o qual é caracterizado por uma convergência de ordem forte igual a 0,5. De forma similar foi derivado o método de *Milstein-Taylor Implícito*

$$\phi_{n+1} = \phi_n + A [\phi_{n+1}, t_{n+1}] h + B [\phi_{n+1}, t_{n+1}] \Delta W_n - \frac{1}{2}(BB') [\phi_{n+1}, t_{n+1}] [(\Delta W_n)^2 + h], \quad (4-122)$$

que possui uma convergência de ordem forte igual a 1. A estabilidade dos métodos numéricos que resolvem SDEs foi avaliada utilizando uma SDE linear e com ruído multiplicativo. Os métodos de *Euler-Taylor Implícito* e *Milstein-Taylor Implícito* possuem, quando comparados aos demais métodos apresentados nesta seção, as melhores propriedades de estabilidade do tipo média quadrada.

A complexidade computacional do método de *Milstein-Taylor Implícito* é quase a mesma que o método de *Euler-Taylor Implícito*. Porém a convergência de ordem forte igual a 1 do método de *Milstein-Taylor Implícito* é maior do que a do método de *Euler-Taylor Implícito*, 0,5. Pelas suas vantagens, o método de *Milstein-Taylor Implícito* foi escolhido para solução numérica do sistema de equações diferenciais estocásticas representadas [Eqs. (4-106) e (4-107)]. Acredita-se que esta seja a primeira utilização deste método para a resolução de problemas de combustão.