

2 Revisão Bibliográfica

O esforço computacional inerente à simulação numérica da combustão impediu que grandes avanços nesse campo fossem alcançados até a década de 1980, devido à limitação da capacidade computacional disponível. Desde então, a evolução dos computadores permitiu que um grande número de trabalhos na área de combustão fosse desenvolvido. Com base nisso, foi feita uma seleção dos trabalhos recentemente publicados sobre técnicas de redução do custo computacional associado à cinética química da combustão. O objetivo desta procura foi encontrar técnicas de redução que não restrinjam seu uso a um determinado sistema termoquímico.

A combustão pode ocorrer com combustíveis sólidos (carvão, madeira), líquidos (petróleo, álcool) ou gasosos (gás natural, biogás). O combustível pode ser pré-misturados ou não com oxidantes antes da combustão. Classicamente, a chama presente no momento da combustão pode ser classificada como sendo de difusão, quando o combustível e o oxidante são injetados separadamente; ou pré-misturada, quando o combustível e o oxidante formam uma mistura homogênea. A frente de chama, local onde acontecem as reações químicas, pode estar situada em escoamento laminar ou turbulento. Essas são algumas das possíveis hipóteses a respeito da estrutura da chama.

As abordagens seguintes, aplicáveis geralmente à modelagem de combustão via técnica de Dinâmica dos Fluidos Computacional - CFD, seja simulação numérica direta, simulação de grandes escalas ou método de função de densidade de probabilidade transportada, são particularmente interessantes na diminuição do custo computacional imposto pelo uso direto da cinética química detalhada em cálculos de escoamento reativo:

- Mecanismos Esqueleto: obtidos pela eliminação de espécies e reações sem muita representatividade, mantendo uma boa acurácia;
- Redução de Dimensão: tem como objetivo reduzir o número de variáveis necessárias para descrever a química de forma acurada;

- Armazenamento/Recuperação: tem como objetivo reduzir o número dos cálculos químicos, que são extremamente caros (exemplo: ISAT);
- Química Adaptativa: substitui o mecanismo detalhado com um número de mecanismos esqueleto localmente acurados, consistindo de um número mínimo de espécies e reações.

Ao combinar tais abordagens, Pope & Ren (2009) dizem que pode haver uma redução do custo computacional inerente à simulação da combustão, em um fator de até 1.000, quando comparado com o uso do mecanismo detalhado.

Um panorama mais amplo sobre o histórico do desenvolvimento de técnicas de redução de cinética química da combustão pode ser encontrado em Cunha (2010).

Tendo o acima exposto como direção, este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica, dividida em três seções: a primeira versa sobre a técnica *In Situ Adaptive Tabulation* (ISAT); a seção seguinte, a respeito de outras técnicas que fazem alguma hipótese e respeito da estrutura da chama e a última, a respeito daquelas que não fazem este tipo de hipótese. Serão apresentadas as características mais importantes de cada uma das técnicas.

2.1. Evoluções da Técnica ISAT

Esta seção fará uma apresentação de alguns artigos que trazem a técnica conhecida como *In Situ Adaptive Tabulation* (ISAT).

2.1.1. Introdução

A tabulação adaptativa *in situ* (*In Situ Adaptive Tabulation* - ISAT) é uma técnica desenvolvida por Pope (1997) para tratar problemas de dimensionalidade alta. Dados os estados iniciais de uma função, os estados finais são aproximados por uma extrapolação linear a partir de uma solução vizinha usando, para isto, uma matriz de sensibilidade. Uma vantagem desta técnica é que o erro dessas aproximações pode ser controlado.

Esta técnica mostrou ser até 1000 vezes mais rápida do que a integração numérica direta das equações governantes (massa e energia) de todas as espécies químicas. O seu aspecto mais importante é que não há restrições sobre o sistema físico ao qual a técnica pode ser aplicada, logo, sua utilização independe de hipóteses sobre a estrutura da chama na combustão. Entretanto, por esta ser uma técnica de armazenamento e recuperação, uma importante limitação é associada ao grande custo de armazenamento.

O propósito da técnica ISAT é tabular, em uma árvore binária, a função $f(\varphi_0)$; no caso dos problemas de interesse, onde o objetivo é resolver as equações da combustão turbulenta, φ_0 consiste no estado termoquímico inicial e $f(\varphi_0)$ é o resultado da solução de equações ordinárias diferenciais (ODE), dado como a composição ao final do intervalo de tempo.

Considerando que n_F é o número de folhas em uma árvore binária, a busca completa por essa estrutura tem o número de operações da ordem de $O(\log_2(n_F))$ caso ela esteja equilibrada. A árvore binária de busca é composta de ramificações que retornam ponteiros para as folhas nas quais os registros são armazenados.

Assim, neste método, as entradas na tabela são referidas como folhas de uma árvore binária. A i -ésima folha inclui: estado inicial φ_0 , o valor da função $f(\varphi_0)$ (estado final); o elipsoide de acurácia; e a matriz gradiente A , também chamada de matriz de sensibilidade, cujos componentes são:

$$A_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial \varphi_j}. \quad (2.1)$$

Essa matriz é usada para construir a aproximação linear utilizada no ISAT. Dada uma consulta, φ^q , o ISAT retorna uma aproximação linear baseada nas soluções vizinhas, esta aproximação para $f^l(\varphi^q)$ com base na i -ésima folha é definida como:

$$f^l(\varphi^q) = f(\varphi_0) + A(\varphi^q - \varphi_0); \quad (2.2)$$

e o erro dessa aproximação é dado por:

$$\varepsilon(\varphi^q) = \|f^l(\varphi^q) - f(\varphi_0)\|. \quad (2.3)$$

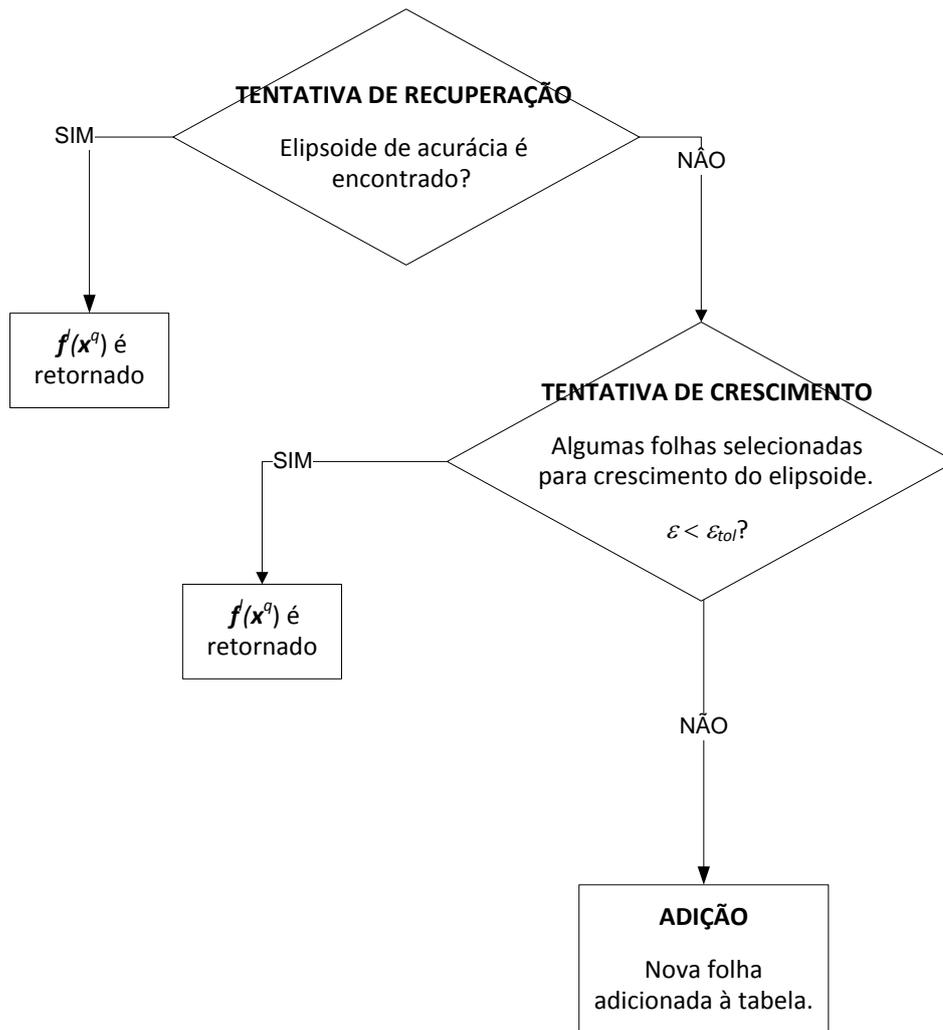
Dada uma tolerância, ε_{tol} , a aproximação é retornada com erros ε menores do que ε_{tol} . A região onde isso acontece é denominada região de acurácia, que é aproximada por um elipsoide chamado elipsoide de acurácia (EOA).

2.1.2. ISAT-5

A mais recente melhoria proposta ao algoritmo ISAT, chamada de ISAT-5 (Lu e Pope, 2009), também é baseada em tabulação cuja construção ocorre simultaneamente à simulação. De modo análogo à técnica original, apenas a região do espaço de composição acessada durante a simulação é tabulada. No caso dos sistemas termoquímicos de interesse, espera-se que esta seja uma pequena fração do espaço total, tornando a tabulação economicamente viável, o que faz desta uma técnica computacionalmente mais barata do que a integração numérica direta.

A

Figura 2-1 mostra através de um diagrama simplificado do método ISAT-5, que a técnica consiste, basicamente, de três etapas que serão posteriormente detalhadas: tentativa de busca, tentativa de crescimento e adição.



PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0922115/CA

Figura 2-1. Esquema simplificado da técnica ISAT-5.

Sabendo que as folhas são as entradas da tabela, O ISAT-5 traz algumas contribuições a essas três etapas fundamentais da técnica ISAT, as quais podem ser resumidas como:

(1) Tentativa de recuperação:

Uma contribuição do ISAT-5 é o fato de a tentativa de recuperação, a busca na árvore binária poder ser feita de diferentes maneiras Dada uma composição

para consulta, φ^q , o objetivo dessa tentativa é identificar algum elipsoide de acurácia (EOA) que cobre tal ponto. Um elipsoide E pode ser representado pelo seu centro φ_0 (vetor de dimensão n_φ) e por uma matriz $n_\varphi \times n_\varphi$ triangular inferior de Cholesky L (matriz transposta - L^T), é definido como:

$$E \equiv \{\varphi^q \mid \|L^T(\varphi^q - \varphi_0)\| \leq 1\}. \quad (2.4)$$

No ISAT-5 os custos referentes à busca e ao teste que verifica se um ponto é coberto pelo EOA são reduzidos pela introdução de um espaço afim de dimensão $n_a < n_\varphi$, que contém as projeções ortogonais de φ^q e de E , cuja geometria é recalculada toda vez que o espaço afim for redefinido.

Nesta primeira etapa, podem-se usar, sucessivamente, quatro tipos de busca na tentativa de identificação do EOA que cobre o ponto φ^q . Se o elipsoide for encontrado, uma aproximação linear, $f^l(\varphi^q)$, é retornada.

O primeiro tipo de busca utiliza uma árvore binária (BT- *binary tree*), cujos nós consistem em planos de corte no espaço de dimensão n_φ . Dada uma consulta, φ^q , a árvore é percorrida até que uma folha seja alcançada, a folha primária, então o EOA da folha primária é testado para determinar se ele abrange o ponto de consulta. Se isso acontecer, a busca termina com sucesso, caso contrário, a busca na BT é mal sucedida. A partir daí, a projeção de φ^q no espaço afim é avaliada para posterior utilização nos três outros tipos de busca, abaixo discriminados.

Em outro método de busca, há duas listas separadas: Na lista MRU (*most recently used*), as folhas da árvore binária estão na ordem em que foram mais recentemente usadas para recuperação de $f^l(\varphi^q)$ na tabela ISAT; na lista MFU (*most frequently used*), as folhas estão na ordem em que foram mais frequentemente usadas para a recuperação. Neste último caso, a eficácia da busca é maior se a distribuição do uso de folhas for não uniforme.

Um determinado número, n_{MRU} , de folhas no topo da lista MRU é testado sucessivamente para determinar se seus EOAs cobrem o ponto de consulta. Com o mesmo propósito, um número específico, n_{MFU} , de folhas na lista MFU é testado, ignorando as folhas previamente testadas na lista MRU. A busca termina com sucesso se e quando um EOA que cobre o ponto de consulta é encontrado. Os valores ideais de n_{MRU} e n_{MFU} dependem da aplicação, no entanto, os autores

afirmam que $n_{MRU} = 5$ e $n_{MFU} = 30$ resultaram em um bom desempenho em toda a gama de casos investigados.

A Figura 2-2 mostra o esboço de uma árvore binária elipsoidal (EBT - *ellipsoidal binary tree*) simples, cuja utilização será apresentada a seguir, composta de três folhas (2, 4 e 5) e dois nós (1 e 3). Exemplificando o que acontece em uma EBT, o ponto φ^q é coberto pelo elipsoide da folha 4, que por sua vez é coberto pelos elipsoides dos nós anteriores (3 e 1). Note-se que pode ocorrer interseção dos elipsoides de folhas que concorrem em um mesmo nó.

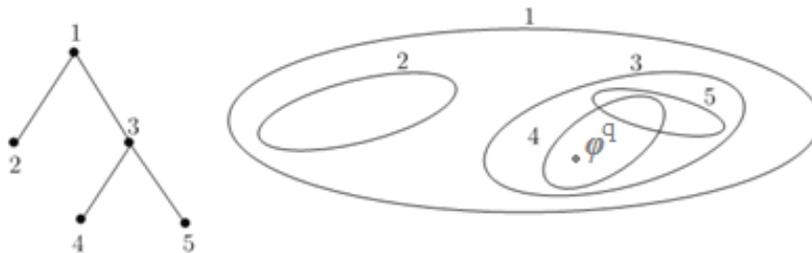


Figura 2-2. Esboço de uma árvore binária elipsoidal simples – EBT (Lu e Pope, 2009).

Na árvore binária elipsoidal (EBT), a folha está associada ao elipsoide de acurácia projetado (PEOA) e o nó, a um elipsoide, que abrange os elipsoides de ambos os filhos. Caso o ponto de consulta projetado não seja coberto pelo elipsoide de um nó, então o ponto de consulta não é abrangido por qualquer EOA da subárvore definida pelo nó, logo ela é considerada inviável e pode ser eliminada da busca.

A busca começa na folha primária: Em uma folha é testado se o EOA cobre o ponto de consulta. Se sim, a busca termina com sucesso, caso contrário, a procura sobe na árvore para o nó-pai da folha. Em um nó, se ambas as subárvores já tiverem sido testadas, move-se para o nó-pai do nó, caso ele não seja a raiz, pois nessa situação a busca termina sem sucesso. Caso contrário, se o elipsoide do nó não abrange o ponto de consulta, move-se para o nó-pai do nó; se abrange, para a folha-filho direita ou esquerda, dependendo de qual ainda não tiver sido testada.

A busca EBT pode ser cara, assim, Lu & Pope (2009) aconselham limitar esse tempo de busca como sendo uma fração especificada do tempo de CPU gasto para avaliar a função $f(\varphi_0)$, esse valor está em torno de 0,5. Os autores afirmam que o menor custo de busca é alcançado por este algoritmo quando todos os quatro métodos são usados: BT, MRU, MFU, EBT.

A

Figura 2-3 apresenta um diagrama explicativo do método das diferentes tentativas de busca. Nele, $P(\varphi^q)$ e $P(E)$ representam, respectivamente, a projeção do ponto φ^q e do elipsoide E no espaço reduzido; n_{MFU} e n_{MRU} representam um número específico de folhas para a busca na tabela com valores mais frequentemente usados (MFU) ou mais recentemente usados (MRU).

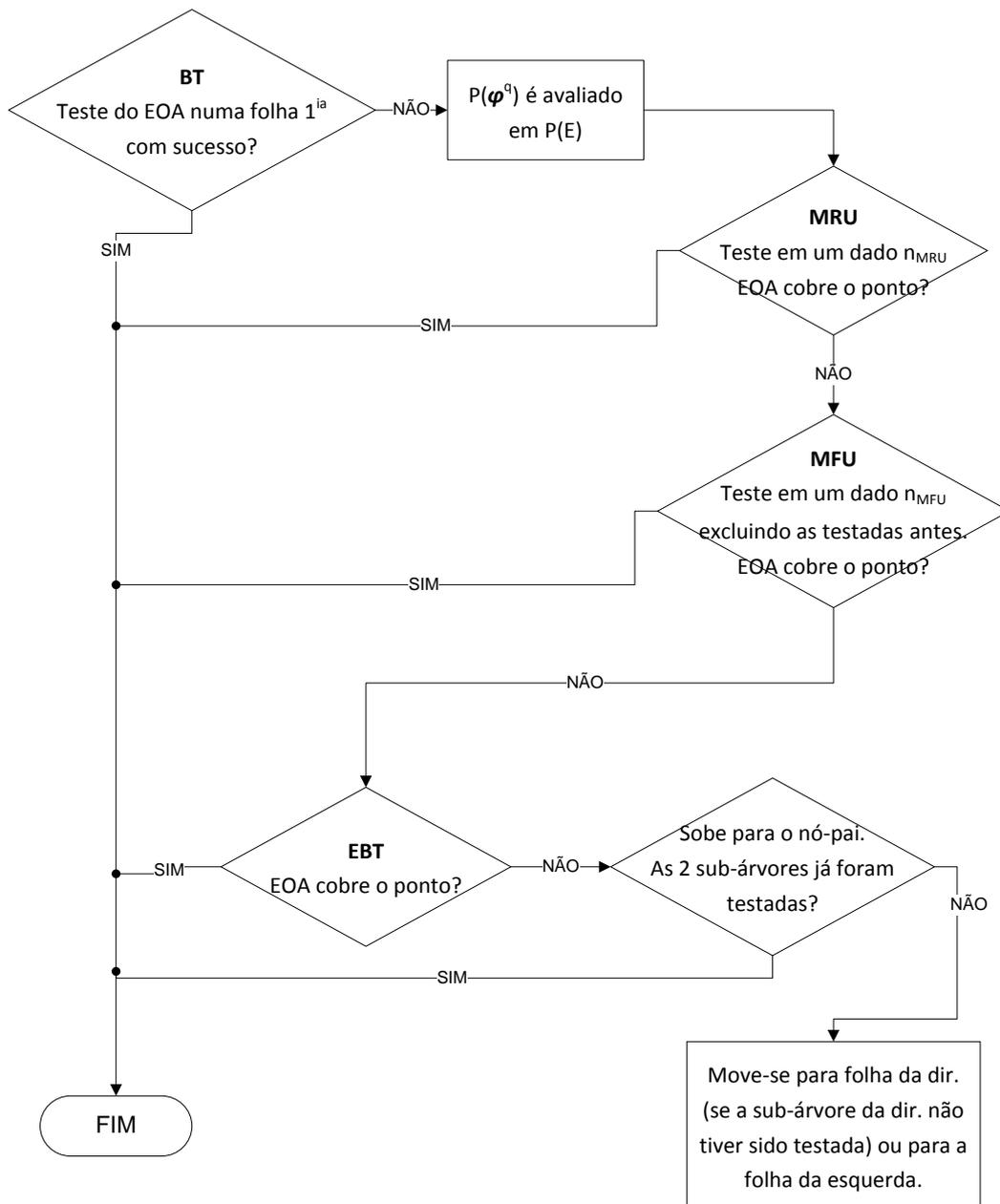


Figura 2-3. Esquema explicativo da etapa de tentativa de busca na tabela ISAT.

(2) Tentativa de crescimento:

Usada quando a tentativa de busca não obtém sucesso. Neste caso, o elipsoide de acurácia de uma folha só pode ser crescido se a aproximação linear correspondente for acurada. Uma ou mais folhas próximas a φ^q são avaliadas e selecionadas para a tentativa de crescimento. Para cada folha, o erro ε da aproximação linear, [Eq.(2.3)], é avaliado e, se este for menor que a tolerância dada (ε_{tol}), o EOA cresce para cobrir o ponto φ^q . Este elipsoide maior é definido como o elipsoide mínimo, com o mesmo centro, que cobre tanto o elipsoide original como o ponto de consulta φ^q . Se esta tentativa de crescimento for bem sucedida, a aproximação linear é retornada.

Além de um EOA (e sua projeção), cada folha tem um elipsoide de inacurácia (EOI), concêntrico com o EOA, e sua projeção (PEOI) no espaço afim. De modo aproximado, o EOA e EOI podem ser tidos como limites inferior e superior da região de acurácia. Um ponto, φ^q , coberto pelo EOA é considerado acurado, enquanto que um ponto não coberto pelo EOI não é considerado acurado.

Os EOIs são usados para determinar as folhas que são boas candidatas ao crescimento. Se um EOI cobrir φ^q , a aproximação linear pode ser acurada, e a folha é, então, considerada uma candidata ao crescimento. Por outro lado, se o EOI não cobrir φ^q , a aproximação linear é inacurada e a folha não é uma candidata ao crescimento. A identificação de folhas candidatas ao crescimento, feita pelo EOI, reduz o tempo computacional necessário à simulação.

(3) Adição:

Usada quando a recuperação e a tentativa de crescimento não obtém sucesso. Esta etapa, que consiste em adicionar uma nova folha à tabela ISAT, pode ser feita de duas maneiras:

- i. Caso a tabela não esteja saturada:

Cálculo do EOA seguido de cálculo do EOI e inserção de nova folha na tabela;

- ii. Caso a tabela já esteja saturada, as opções são:

Retornar $f(\varphi_0)$ sem alterar a tabela ou substituir a última entrada da lista (folha menos recentemente usada) MRU ou substituir a última entrada (folha menos frequentemente usada) da lista MFU.

Abrol (2009) destaca que a vantagem real no uso do ISAT ocorre quando o número de recuperações realizadas pelo algoritmo ultrapassa em muito número de crescimentos e adições na árvore binária.

2.1.3. Correção e Verificação de Erros

Lu & Pope (2009) acrescentam, ainda ao ISAT-5, um novo conceito à técnica, que é a correção e verificação de erro (ECC - *error checking and correction*), considerando o fato de que os maiores erros observados ocorrem porque alguns EOAs são aumentados inadvertidamente para englobar regiões inacuradas. Esse conceito, particularmente eficaz na redução do erro incorrido, consiste em verificar aleatoriamente o erro incorrido, onde o valor exato $f(\varphi_0)$, calculado por integração direta, é avaliado juntamente com o valor aproximado, $f^l(\varphi^q)$, obtido com o ISAT e, caso este erro exceda a tolerância especificada (ε_{tol}), o EOA responsável pela recuperação inacurada é diminuído. Devido às avaliações diretas requeridas para realizar o ECC, este se torna um processo computacionalmente caro.

As recuperações são selecionadas ao acaso para o tratamento do ECC, com uma probabilidade escolhida de tal forma que, em média, a frequência de eventos ECC pode ser definida usando um dos dois seguintes modos:

1. A frequência de verificação e correção do erro é controlada de forma que o tempo de CPU gasto no ECC seja 10% do tempo total.
2. A frequência de verificação e correção do erro é controlada de forma que o número de eventos ECC esteja em torno de 10% do número total de eventos de crescimentos.

Os autores afirmam que o uso do ECC pode reduzir significativamente o número necessário de entradas na tabela para um determinado valor de erro incorrido.

Pope & Ren (2009) também descrevem as melhorias trazidas ao ISAT pela incorporação de ECC. O erro incorrido tem uma distribuição caracterizada pelo erro a 90 por cento, $\varepsilon_{0.9}$, quer dizer, 90% das pesquisas feitas tem o erro ε , o qual é definido como a diferença entre o valor retornado e o valor verdadeiro, menor do que $\varepsilon_{0.9}$. Para uma dada implementação do ISAT, o $\varepsilon_{0.9}$ varia quase que

linearmente com ε_{tol} , no entanto a razão $\varepsilon_{0,9}/\varepsilon_{tol}$ pode ser afetada pelas particularidades de cada implementação.

A Figura 2-4 ilustra a influência da aplicação do ECC no desempenho do ISAT, empregado num reator parcialmente misturado para combustão não pré-misturada, usando mecanismo esqueleto de 16 espécies, 100 partículas, 10^6 passos de tempo, resultando em 10^8 consultas. Observa-se que conforme a fração entre o tempo dispendido no ECC e o tempo total de CPU, dada por ζ , aumenta, o erro $\varepsilon_{0,9}$ diminui, mas o tempo médio de CPU por consulta aumenta. O valor ótimo de ζ é em torno de 0.1, com esse valor, o tempo médio de CPU por consulta feita, necessário para um dado valor de $\varepsilon_{0,9}$ cai aproximadamente pela metade quando comparado com $\zeta=0$.

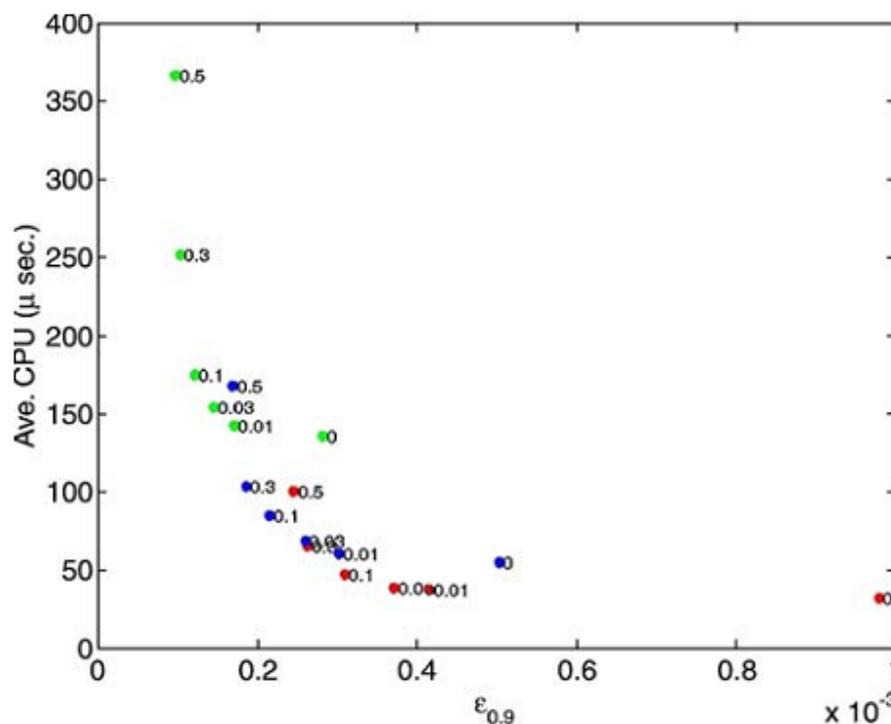


Figura 2-4. Tempo médio de CPU (μ s) por consulta em função do erro a 90 por cento. Tolerância do erro: $\varepsilon_{tol} = 1 \times 10^{-4}$ (verde); $\varepsilon_{tol} = 2 \times 10^{-4}$ (azul); $\varepsilon_{tol} = 3 \times 10^{-4}$ (vermelho). Os números 0, 0.01, 0.03, 0.1, 0.3, 0.5 indicam o valor da fração ζ , que controla a quantidade de correção e verificação feita. (Pope e Ren, 2009)

Ressalta-se que o aumento do controle e verificação de erros no algoritmo ISAT leva a uma diminuição significativa no erro de tabulação incorrido e também diminui as chances de aproximações inaccuradas em consultas subsequentes.

2.1.4. Aglomerção e Múltiplas Árvores

No trabalho de Abrol (2009), é apresentada uma formulação modificada para o ISAT, chamada de mISAT, que visa melhorar a taxa de recuperação da técnica.

Versões anteriores do ISAT envolvem o uso de uma única árvore de busca binária para construir o banco de dados. No entanto, a desvantagem dessa busca em árvore binária é que o registro mais próximo à composição desejada, nem sempre é o recuperado. Para superar isso, algumas técnicas de busca envolvendo múltiplas árvores binárias são sugeridas para aumentar a probabilidade de encontrar o registro mais próximo, o que melhora a acurácia do resultado.

O autor mostra que várias estruturas de árvore binária podem ser usadas para distribuir no banco de dados os registros, que são armazenados como folhas no final da estrutura de árvore binária ramificada; essas várias estruturas de árvore permitem estimativas mais precisas da matriz de sensibilidade A , uma vez que melhora as chances de se recuperar o registro mais próximo quando uma busca é feita.

Uma primeira abordagem para a implementação de múltiplas árvores binárias é assim descrita: considerando n_ϕ como sendo a dimensão do vetor de entrada, mais de uma árvore pode ser construída para recuperar um conjunto de $4n_\phi$ folhas próximas. Segundo Abrol (2009), $4n_\phi$ é a quantidade necessária para uma estimativa precisa da matriz sensibilidade. Isto pode ser conseguido através da distribuição das folhas entre $4n_\phi$ árvores binárias, onde se tem que de cada árvore, uma única folha é recuperada.

Outra abordagem seria recuperar duas folhas em cada árvore e, nesse caso, apenas n_ϕ árvores binárias precisariam ser armazenadas. Para a recuperação dessas duas folhas, uma árvore é percorrida em ambos os ramos e, de cada sub-ramo, uma folha é recuperada.

Para evitar que o tempo de pesquisa para várias árvores seja afetado, as folhas devem ser distribuídas uniformemente entre as diferentes árvores. Assim, um tempo de busca aproximadamente igual é necessário para pesquisar completamente cada uma das árvores em paralelo, no caso em que múltiplos processadores estiverem disponíveis para o uso.

Abrol (2009) apresenta diferentes técnicas de distribuição de folhas da árvore binária para melhorar a decomposição espacial nas árvores. Tais técnicas têm base na distribuição uniforme e em “*k-means cluster*”, que é uma técnica de agrupamento com base na avaliação e comparação dos valores numéricos dos dados, separação deles e realocação em grupos similares. O uso desse agrupamento garantirá que os dados semelhantes sejam colocados próximos uns dos outros e a busca na árvore binária resulte na recuperação mais acurada. Os dados assim distribuídos em grupos, também melhoram o tempo de pesquisa.

2.1.5. Balanceamento Dinâmico da Árvore Binária

A árvore binária construída pelo ISAT não é necessariamente balanceada, pois isso depende do vetor de consulta e do vetor armazenado. Tendo em vista que tal árvore, desbalanceada, exige mais tempo para a localização de uma folha, uma estrutura alternativa para a construção da árvore binária de busca do ISAT é sugerida por Abrol (2009): a árvore AVL, que tem como objetivo reduzir o tempo de busca na tabela ISAT, é uma árvore binária na qual a diferença entre a altura das subárvores direita e esquerda nunca é maior que um, ou seja, ela é uma árvore balanceada.

Ao contrário da árvore binária originalmente usada no ISAT, para uma árvore AVL, cada nó é uma folha, que armazena também uma chave numérica, a identificação dessa folha. Como o vetor de consulta é um conjunto de valores numéricos, encontrar um único número que representa esse vetor pode ser uma dificuldade. No entanto, segundo o autor, a decomposição em valores singulares (SVD) do vetor fornece um valor único para cada folha, e pode ser usado como chave numérica, isto é, uma identificação da folha.

Descrevendo brevemente o método, tem-se que, conforme a árvore é construída, a folha com uma chave menor que a chave do registro encontrada no nó, é adicionada à esquerda, e se tiver uma chave maior, à direita. O algoritmo verifica a altura das subárvores após cada adição de nova folha e se a diferença entre as subárvores da esquerda e da direita for maior do que um, ele executa rotações na árvore para restabelecer seu equilíbrio.

Com base no exposto acima, conclui-se que esta estrutura alternativa para a construção do banco de dados do ISAT, onde a árvore tem os ramos equilibrados, conhecida como árvore AVL é uma boa alternativa para reduzir consideravelmente o tempo de busca, especialmente quando o número de folhas na árvore é grande.

2.1.6. Especificação de Regiões de Acurácia e de Inacurácia

No algoritmo ISAT original, quando uma busca na árvore binária por um registro é realizada, tem-se que no caso de o vetor inicial de consulta se encontrar dentro de um determinado EOA, este é retornado como o registro mais próximo.

O problema com esta abordagem é que o EOA, tido como uma aproximação para região de acurácia (ROA) e pertencente a certo ponto de dados pode cruzar mais de uma ROA. Da mesma forma, a região a que este ponto tenha sido atribuído pode conter outros EOAs.

Na Figura 2-5, são vistos os EOAs e as ROAs; como se nota, a função $f(\varphi^q)$ não pode ser aproximada usando $f(\varphi_1)$, mas pode ser aproximada usando $f(\varphi_2)$. Como, φ^q e φ_2 são de regiões diferentes, a busca na árvore binária usando o algoritmo original ISAT não irá resultar na recuperação do registro mais próximo possível.

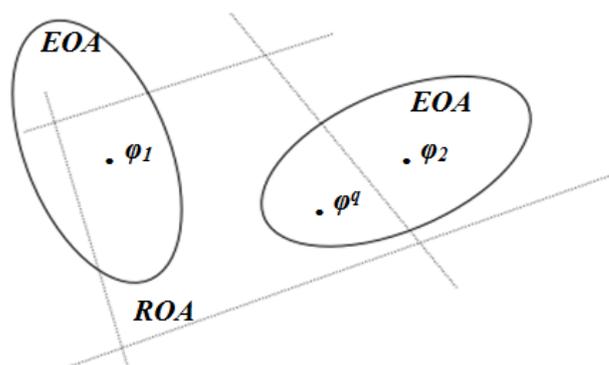


Figura 2-5. Interseção do elipsoide de acurácia com a região convexa. Os EOAs não são conformes à região convexa (adaptado de (Abrol, 2009)).

Para superar essa deficiência, um novo algoritmo, chamado mISAT, é sugerido por Abrol (2009): Consideram-se todos os pontos em que o EOA está parcial ou totalmente contido na região a qual o vetor de consulta pertence; isto é

feito associando uma lista de pontos (e não apenas um único ponto) a uma determinada região.

Um parâmetro *list_size* é definido como sendo o número máximo de registros que podem ser adicionados a certa folha da árvore binária, isto é, número máximo de EOAs associados a uma determinada região. Como o propósito de uma estrutura de árvore binária, é reduzir o tempo de pesquisa, o parâmetro *list_size* deve ser escolhido de forma a levar ao menor tempo de pesquisa, sem comprometer a taxa de recuperação.

A procura em uma árvore binária é feita pela travessia por ela usando o plano de corte definido para cada nó. Um novo registro é adicionado à mesma folha (região) se o número de registros nela for menor que o parâmetro *list_size*; se for maior, a região é dividida em duas sub-regiões.

Uma vez que o registro é adicionado em uma nova sub-região, uma busca sequencial de todas as folhas da árvore é realizada para verificar se o novo registro tem um elipsoide que poderia estar parcialmente contido em outra região. Esta pesquisa sequencial não leva muito tempo, pois as folhas mantêm uma "lista" de registros e para encontrar a intersecção do EOA com a região, apenas a região (ou folha) que contém tal registro(s) deve ser considerada.

Manter uma "lista" de todos os EOAs que cruzam uma região convexa melhora a possibilidade de se recuperar o registro mais próximo, o que melhora o desempenho do ISAT. Pode-se inferir que o algoritmo apresentado por Abrol (2009), é capaz de realizar recuperações simultaneamente, mantendo o controle de todos os pontos cujos EOAs estão em uma região convexa, de forma total ou parcial e ainda obter resultados mais acurados que a versão original do ISAT.

O trabalho de Liu & Pope (2005) apresenta um estudo abrangente da caracterização do erro inerente ao uso do algoritmo ISAT, determinando a precisão dos erros local e global associados ao armazenamento e à recuperação no cálculo da chama turbulenta empregando o mecanismo esqueleto para a combustão do metano com ar, constituído por 16 espécies e 41 reações.

O trabalho faz, ainda, uma discussão a respeito das três diferentes estratégias para o crescimento do EOA, uma exposição da função de distribuição acumulativa (*cumulative distribution functions* - CDF) do erro local e uma caracterização do erro global, usando uma determinada configuração de teste.

O crescimento do EOA é um método efetivo utilizado para aumentar o número de recuperações no ISAT com um determinado tamanho de tabela, no entanto, isto se torna uma das maiores causas de ocorrência de grandes erros locais.

Liu & Pope (2005) apresentam diferentes estratégias de crescimento do elipsoide de acurácia (EOA) possíveis:

I. Modo de crescimento 1 → crescimento do elipsoide:

Estratégia proposta originalmente por Pope (1997). Dado um EOA centrado no ponto φ_0 , o novo EOA é o hiperelipsoide único, de volume mínimo, centrado em φ_0 que engloba ambos o EOA original e o ponto de consulta, φ^q , como mostrado na Figura 2-6.

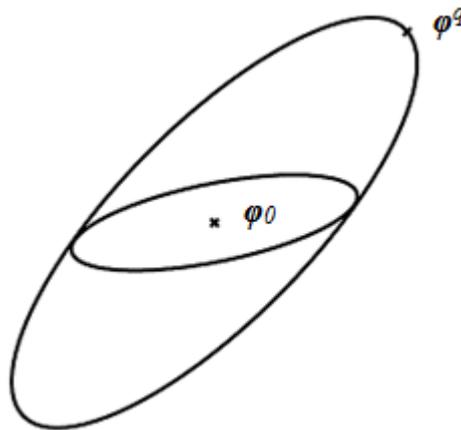


Figura 2-6. Ilustração do crescimento do EOA no modo 1 (Liu e Pope, 2005).

II. Modo de crescimento 2 → crescimento do elipsoide com modificação de Chew

Mais conservador que o anterior. Para cada EOA, o hiperelipsoide é primeiramente transformado em uma hiperesfera, como mostrado na Figura 2-7. Um hipercubo é inscrito dentro dessa hiperesfera unitária, com os seus vértices sobre a superfície da mesma. Quando o EOA cresce, o novo EOA (no espaço transformado) é o hiperelipsoide único de volume mínimo que engloba o hipercubo e o ponto de crescimento, φ^q .

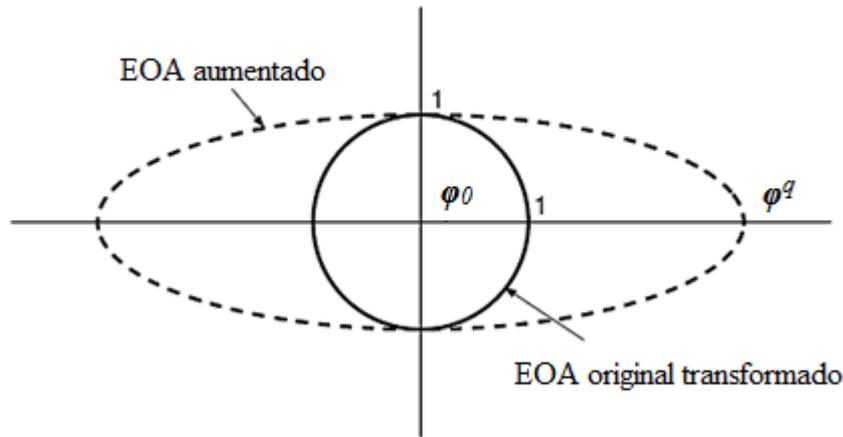


Figura 2-7. Ilustração do crescimento do elipsoide de acurácia usando o modo 1, no espaço transformado. (Liu e Pope, 2005)

A Figura 2-8 ilustra o crescimento do elipsoide de acurácia e suas diferenças usando os modos 1 e 2, no espaço transformado bidimensional.

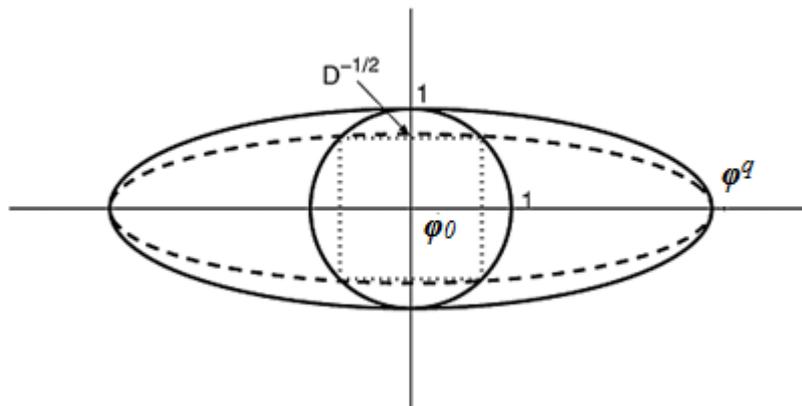


Figura 2-8. Ilustração dos diferentes modos de crescimento. Linhas sólidas: modo1. Linhas pontilhadas: hipercubo usado no modo 2. Linhas tracejadas: crescimento do EOA usando o modo 2. (Liu e Pope, 2005)

I. Modo de crescimento 3 → crescimento cônico:

A Figura 2-9 mostra o crescimento do elipsoide de acurácia usando o modo 3, no espaço transformado.

Este é o modo mais conservativo dos 3 casos. O EOA cresce usando um cone baseado no EOA atual e no ponto de crescimento; então, esse elipsoide é transformado em uma hiperesfera unitária, com o ponto de crescimento φ^q localizado no eixo a uma distância r da origem. O erro no ponto de crescimento é ε . O ponto limite, φ^p , é definido como sendo o local no eixo onde o erro é o mesmo da tolerância, isto é: $\varphi^p = \varphi^q (\varepsilon_{tol}/\varepsilon)^{1/2}$.

Um cone é criado no espaço transformado, com o vértice no ponto limite φ^p . O novo EOA é então o hiperelipsoide de volume máximo que pode ser inscrito dentro do cone, e que não inclui o ponto de crescimento. É possível que o novo EOA tenha um volume menor do que o EOA original. Neste caso, o EOA original é mantido, e assim nenhum crescimento é realizado. Esta estratégia de crescimento garante que, para o caso em que a região de acurácia (ROA) é convexa, o EOA após crescimento encontra-se inteiramente dentro dela.

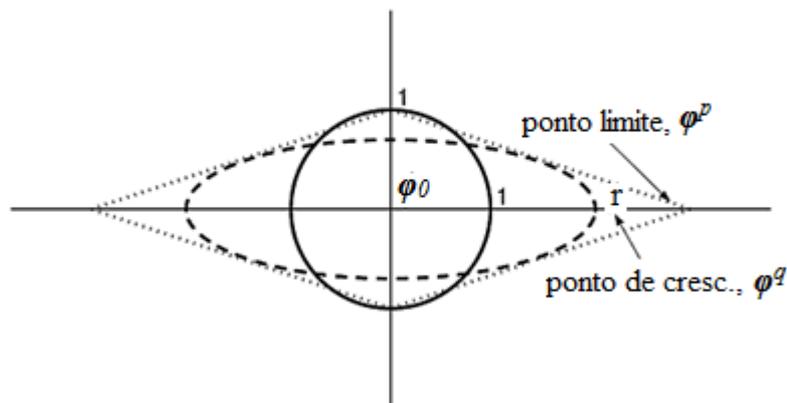


Figura 2-9. Ilustração do modo de crescimento 3. Linhas sólidas: EOA original. Linhas pontilhadas: cone usado no modo 3. Linhas tracejadas: crescimento do EOA no modo 3 (Liu e Pope, 2005).

Também foram investigadas as possíveis razões para imprecisão devido ao crescimento do elipsoide de acurácia. Existem três possíveis razões pelas quais imprecisões surgem quando do crescimento do EOA; abaixo, uma breve discussão a respeito delas é apresentada.

Em primeiro lugar, é possível que ao longo da região de acurácia, que é aquela na qual o erro não excede a tolerância especificada e que é aproximada para um elipsóide, a função tabulada seja significativamente não linear, e, portanto, a análise da série de Taylor truncada pode ser imprecisa, originando a possibilidade de comportamento não-monotônico do erro, ε .

Se este for o caso, então, dado um ponto de consulta φ^q , podem existir seções sobre o segmento de linha entre φ_0 e φ^q onde ε é maior do que ε_{tol} , embora o ponto de crescimento em si tenha ε menor do que ε_{tol} . Contudo, em tal situação, o EOA é aumentado para englobar essas regiões imprecisas, introduzindo a possibilidade de que recuperações subsequentes sejam imprecisas. Este problema,

se existir, tende a desaparecer quando ε_{tol} se torna suficientemente pequeno, porque a ROA encolhe e a precisão da série de Taylor aumenta nesta ROA.

Em segundo lugar, a ROA pode não ser convexa, com uma natureza hiperbólica. Neste caso, todas as estratégias de crescimento podem fazer com que o EOA, depois do crescimento, inclua as regiões imprecisas.

Em terceiro lugar, mesmo que a ROA seja convexa (por exemplo, elipsoidal), as estratégias de crescimento do elipsoide podem levar à inclusão de regiões imprecisas.

A caracterização do erro local, ε , para um grande número de recuperações, é feita através do cálculo da função de distribuição acumulativa (CDF) do erro local:

$$F(x) \equiv Prob\{\varepsilon < x\}, \quad (2.5)$$

onde x é a variável correspondente ao erro.

A Tabela 2-1 mostra os valores tabelados dos erros estatísticos do ISAT para os diferentes modos de crescimento com $\varepsilon_{tol}=10^{-4}$ e $\varepsilon_{ref}=\varepsilon_{0.9}$ e os casos onde não há crescimento do EOA. Para o caso onde o crescimento não é permitido, há um número insignificante de amostras com erros superiores a ε_{tol} , por isso os erros não aparecem na tabela. Neste caso a tabela ISAT está saturada, ou seja, todo o espaço destinado a ela foi ocupado e não é possível fazer adições na árvore binária.

As estatísticas de ε normalizado por ε_{tol} mostram que os modos 1 e 2 apresentam resultados semelhantes, com o modo 2 sendo um pouco mais conservador do que o modo 1, como esperado. O modo 3 apresenta melhor controle de erro (em relação à tolerância do erro). Como esperado, a ausência de crescimento fornece o melhor controle de erro entre todos.

Tabela 2-1. Estatísticas de erro do ISAT para diferentes estratégias de crescimento com $\varepsilon_{tol} = 1 \times 10^{-4}$ (Liu e Pope, 2005).

Modo de crescimento	1	2	3	Sem crescimento
$\varepsilon_{ref} \times 10^6$	342	303	67,8	-
$\varepsilon_{0,99}/\varepsilon_{ref}$	6,93	6,77	5,94	-
$\varepsilon_{0,999}/\varepsilon_{ref}$	19,77	18,65	15,04	-
Prob ($\varepsilon > \varepsilon_{ref}$) %	20,02	19,89	7,14	0,0
$\varepsilon_{0,9}/\varepsilon_{tol}$	3,42	3,42	0,678	-
$\varepsilon_{0,99}/\varepsilon_{tol}$	23,7	20,5	4,03	0,016
$\varepsilon_{0,999}/\varepsilon_{tol}$	67,6	56,5	10,2	0,027

Os autores afirmam que nenhum dos modos exibe um controle excelente de erro, no entanto, para o modo 3, o desempenho do controle de erro piora quando ε_{tol} diminui. Além disso, as principais conclusões sobre o erro local são apresentadas a seguir:

1. Grandes erros locais são observados, embora com pequena probabilidade;
2. Os grandes erros locais observados são resultados do processo de crescimento do EOA. Quando o crescimento é suprimido, os maiores erros são apenas uma pequena percentagem de ε_{tol} ;
3. Os grandes erros locais não são causados pelo comportamento não monotônico de ε . Se este fosse o caso, o controle de erros melhoraria conforme ε_{tol} diminuísse, mas isso não foi observado;
4. Os erros grandes são associados a regiões de acurácia não convexas;
5. É aconselhável o uso do modo mais simples de crescimento (modo 1) já que a função de distribuição cumulativa de $\varepsilon/\varepsilon_{ref}$ é basicamente a mesma para todas as estratégias de crescimento e valores de ε_{tol} .

Liu & Pope (2005) também fazem uma caracterização do erro global, nos cálculos que utilizam o transporte da PDF, decorrente dos erros locais incorridos no algoritmo ISAT. Isto é realizado considerando o erro da média das frações de massa das espécies químicas e da temperatura.

O erro global de qualquer quantidade ψ é definido como a diferença entre o valor calculado de ψ , usando ISAT e o valor obtido com a integração direta. Se o erro global for controlado, as quantidades consideradas devem convergir para o valor resultante da integração numérica direta conforme o erro tende a zero.

Os autores afirmam que, para os quatro menores valores de ε_{tol} estudados ((1/64, 1/16, 1/4 e 1)×10⁻⁴), todos os resultados calculados estão em concordância, dentro dos intervalos de confiança. Isto indica que os erros devido ao ISAT são pequenos em relação aos erros estatísticos para $\varepsilon_{tol}=10^{-4}$, além disso, os erros diminuem conforme ε_{tol} é reduzido. Por outro lado, dentre os valores estudados pelos autores, são observados grandes erros devidos ao ISAT para valores de $\varepsilon_{tol}=4\times 10^{-4}$ e 16×10^{-4} . Os autores afirmam, ainda, que o erro global do ISAT varia linearmente com ε_{tol} como faz o erro local e como é desejado.

Cálculos foram realizados a fim de examinar o erro global no ISAT. As seguintes observações e conclusões sobre o erro global podem ser feitas:

1. Os intervalos de confiança para os testes feitos são grandes para os dois maiores valores de ε_{tol} , devido à ocorrência de grandes erros estatísticos.
2. Em geral, para os quatro menores valores de ε_{tol} , os resultados calculados são melhores, indicando que os erros do ISAT são pequenos em relação aos erros estatísticos para $\varepsilon_{tol} \leq 10^{-4}$ (valores estudados pelos autores).
3. O erro global varia linearmente com ε_{tol} , conforme o desejado.

Os autores descobriram que o cálculo do vetor de Householder, usado no algoritmo para crescer os EOAs, em algumas raras situações é mal condicionado e isso pode resultar em elipsoides inaccurados, e consequentemente, recuperações inaccuradas.

Por fim, cabe ressaltar que, em geral, os valores adequados de ε_{tol} dependem de muitos fatores (por exemplo, o mecanismo químico, o intervalo de passo de tempo, etc.). Assim, esse estudo deve ser tomado apenas a título de valores da maneira de escolha de ε_{tol} .

2.1.7. Operadores de Separação

Pope & Ren (2009) têm seu foco em questões relativas à aplicação eficiente de mecanismos de cinética química detalhada em combustão computacional, para tanto, se faz uma descrição do esquema computacionalmente eficiente de operador de separação de fluxos, e também descrevem os desenvolvimentos recentes no algoritmo de armazenamento e recuperação ISAT.

Duas classes de esquemas de separação são introduzidas: uma é baseada na técnica de separação Strang, onde as reações químicas são separadas da difusão e da convecção; e a outra é baseada em passos de tempo escalonado.

Para cada passo de tempo Δt , o esquema baseado na separação de Strang requer 2 subpassos de reação de valor $\Delta t/2$ e 1 subpasso de transporte de valor Δt . O esquema baseado em passos de tempo escalonado requer um único passo fracionado de reação de tamanho Δt e um único subpasso de transporte de tamanho Δt . As soluções dos subpassos de transporte são obtidas através de métodos preditores corretores ou linearizações.

Os autores afirmam que quando o esquema de separação de Strang, baseado no ISAT é aplicado a uma chama unidimensional de metano-ar, usando cinética química detalhada (GRI3.0), um fator global de aceleração de cerca de 7,5 é atingido após a tabela ISAT ser construída e preenchida. Testes realizados mostraram que os esquemas de separação propostos atingiram uma acurácia de segunda ordem no tempo.

A Figura 2-10 mostra o erro numérico para diferentes esquemas de separação propostos, em função dos passos de tempo. Como podem ser observados, os erros diminuem com Δt aproximadamente como Δt^2 , ilustrando a acurácia de segunda ordem no tempo, isto é, $\varepsilon_{max}(\Delta t) \sim \Delta t^2$, como pode ser visto na linha tracejada de inclinação 2.

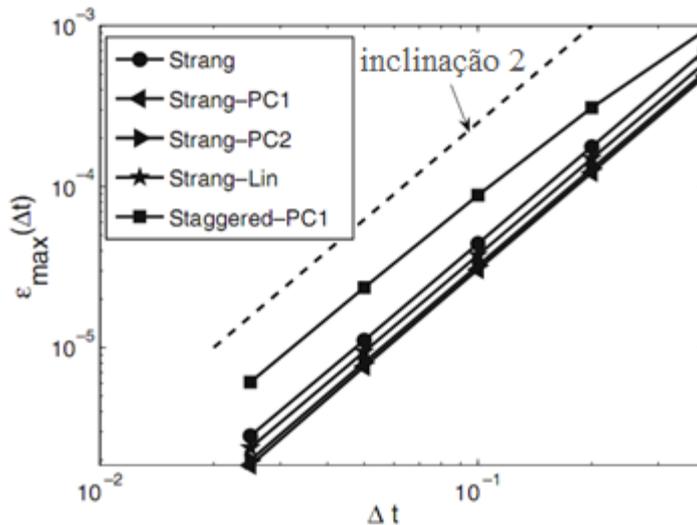


Figura 2-10. Erros numéricos. Esquemas de Strang (Strang-PC1, Strang-PC2, Strang-Lin) e esquemas escalonados (Staggered-PC1) (Pope e Ren, 2009).

2.2. Algumas Técnicas que Consideram a Estrutura da Combustão

Nesta segunda parte será relatada uma análise de artigos que apresentam técnicas com algum tipo de restrição sobre a estrutura da chama. Para cada um desses artigos será feito um resumo da técnica.

2.2.1. F-TACLES (Tabulação Química Filtrada para Simulação de Grandes Escalas)

Ignição de chamas, extinção ou predição de poluentes são questões importantes na simulação de grandes escalas (LES) de combustão pré-misturada. A tabulação química filtrada para simulação de grandes escalas - *Filtered Tabulated Chemistry for Large Eddy Simulation* (F-TACLES) (Fiorina, Vicquelin, *et al.*, 2010) - é um método de tabulação química em combustão pré-misturada aplicado em simulação de grandes escalas. O objetivo desta tabulação é garantir que a velocidade de propagação da frente de chama filtrada tende para a da chama laminar quando a escala subfiltro de turbulência diminui e o modelo tende para a simulação numérica direta.

Neste método, a estrutura a priori de uma chama laminar, plana, unidimensional e pré-misturada é filtrada e usada para a construção de uma tabela que armazena as propriedades termoquímicas filtradas de interesse para o cálculo

da propagação da chama. No trabalho de Fiorina, Vicquelin, *et al.* (2010) é demonstrado que o formalismo β -PDF, quando aplicado à combustão pré-misturada modelada em LES, não permite uma boa descrição da frente de chama laminar filtrada.

Nos modelos clássicos, para acoplar a química tabulada com a combustão turbulenta, quantidades médias devem ser determinadas utilizando funções de densidade de probabilidade presumidas. Neste tipo de modelo o principal problema encontrado é que a espessura da chama geralmente é menor do que o tamanho da malha LES. Isto ocorre devido ao fato de o termo fonte da variável de progresso da reação ser muito “rígido”, assim, a frente da chama não pode ser diretamente resolvida em malhas LES, o que leva a problemas de representação.

Uma solução recentemente proposta para este problema é o modelo FPI-PCM (*Presumed Conditional Moment*) (Galpin, Naudin, *et al.*, 2008), desenvolvido para introduzir os efeitos da cinética química em LES. O modelo combina função densidade de probabilidade (PDF) e tabelas baseadas no prolongamento da chama do tubo de distribuição intrínseco de baixa dimensão (*Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional manifolds – FPI*) para descrever a taxa de reação química da variável de progresso filtrada. Esse modelo leva em conta a interação entre turbulência e cinética química ao nível de escala subfiltro.

Em Fiorina, Vicquelin, *et al.* (2010) as propriedades termodinâmicas e químicas são tabuladas em função de uma única variável de progresso de reação, c , a qual se encontra relacionada com a temperatura ou com uma combinação de espécies químicas. Por definição, $c=0$ corresponde aos gases frescos e $c=1$, aos gases totalmente queimados. A tabela é acoplada à descrição do escoamento, por adição da equação de transporte da variável de progresso às equações de Navier-Stokes. Assim, as equações filtradas resolvidas neste modelo são as de: transporte de massa, quantidade de movimento, energia total, variável de progressão e a equação de estado.

O modelo proposto é capaz de representar a chama turbulenta dobrada em situações nas quais os modelos clássicos falham:

1. O dobramento da chama é totalmente resolvido no tamanho de filtro LES;

2. O dobramento ocorre na escala de subfiltro, logo, afeta a velocidade da chama filtrada.

Considerando uma chama laminar, plana, filtrada e pré-misturada, caso não ocorra nenhum enrugamento na escala subfiltro, a velocidade de propagação da frente de chama filtrada é idêntica à velocidade da chama laminar.

Quando o tamanho do filtro é maior do que a frente de chama, a velocidade de propagação da variável progresso filtrada é superestimada pela função β presumida. Uma solução para propagar uma frente de chama na velocidade correta é artificialmente engrossar a zona de reação, porém ela deixa de corresponder à estrutura da frente de chamas filtrada. Uma alternativa a isso é aplicar diretamente uma função filtro normalizada para estimar a taxa de reação filtrada.

O procedimento de tabulação da estrutura de chama plana laminar pré-misturada filtrada proposto nesta técnica é apresentado e consiste em criar uma base de dados do termo de reação filtrado, com a variável sendo tabulada em uma tabela bidimensional em função do tamanho do filtro.

Os autores também demonstram que a aproximação usual, a qual consiste em desprezar os termos de difusão laminar filtrado ou aproximá-los usando os valores médios das quantidades transportadas é grosseira e introduz erros de primeira ordem na formulação. A proposta desse trabalho é modelar os termos de difusão filtrados usando uma função filtro normalizada e criando uma tabela com um fator de correção do termo de transporte da propriedade filtrada.

Estes fatores de correção são obtidos aplicando-se o processo de filtragem à solução de uma chama laminar plana, o que implica na criação de uma biblioteca parametrizada pelo tamanho do filtro. Cabe ressaltar que uma limitação desta técnica é a hipótese de que a chama plana permanece válida no nível de escala subfiltro.

A interação entre a turbulência e a combustão pode causar o dobramento da frente de chama no nível de escala subfiltro. Os autores apresentam, também, uma estratégia para estender o modelo descrito acima para esta situação de chama turbulenta, baseada em um “fator de dobramento da chama”.

2.2.2. MFM (Tubos Multidimensionais Gerados por Elemento de Chama)

O conceito de elemento de chama laminar tem sido largamente empregado na modelagem da combustão turbulenta pré-misturada e não pré-misturada. Nestes casos, as propriedades locais da chama turbulenta são obtidas pela média do comportamento de um conjunto de chamas laminares, geralmente assumidas como unidimensionais.

O conceito de elemento de chama pré-misturado também foi empregado com sucesso para reduzir a complexidade da cinética química, a fim de manter os custos computacionais em um nível moderado. Este é o caso, em particular, de duas abordagens equivalentes conhecidas como *Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional manifolds* (FPI) e *Flamelet-Generated Manifolds* (FGM) (citados em (Nguyen, Vervisch, *et al.*, 2010)), as quais consistem em resolver um conjunto de chamas laminares pré-misturadas unidimensionais; a taxa de reação e a fração de massa das espécies são, então, tabuladas em função de alguma coordenada pré-definida.

No entanto, no trabalho de Nguyen, Vervisch, *et al.* (2010) conclui-se que a tabulação de elemento de chama pré-misturado, em geral, falha quando aplicada a chamas ricas parcialmente misturadas ou de difusão. A fim de superar esta deficiência e descrever situações em que ocorrem os três regimes: de chama pré-misturada, de chama parcialmente pré-misturada e de chama de difusão, (Nguyen, Vervisch, *et al.*, 2010) propõem um modelo de elemento de chama multidimensional. Assim, o método chamado *Multidimensional Flamelet-Generated manifolds* (MFM - tradução livre: tubos multidimensionais gerados por elemento de chama) resolve um conjunto de chamas laminares nos três regimes. Para este fim, as equações governantes são derivadas da projeção do conjunto de equações de balanço de espécies e conservação de massa em um subconjunto do espaço de composição, através de um sistema de coordenadas não ortogonal. Com isso, os únicos parâmetros críticos do modelo são as taxas de dissipação características i) da mistura, ii) do progresso de reação e iii) cruzada (escalar reativo e não reativo).

Essa transformação leva a evolução temporal e a espacial do sistema a serem expressas como função de uma combinação linear das frações de massa das

espécies e de taxas de dissipação dos escalares reativos. Utilizando-se parâmetros de controle, como taxas de dissipação escalar, condições de contorno da chama, etc., a solução das equações de espécies e de energia são, então, tabuladas.

2.3.

Algumas Técnicas que Não Consideram a Estrutura da Combustão

Nesta terceira parte são abordados alguns trabalhos que apresentam técnicas mais gerais, ou seja, que não fazem nenhum tipo de hipótese sobre a estrutura da chama ou do processo de combustão. A técnica ISAT adotada neste estudo pertence a esta categoria.

Embora essas técnicas não venham a ser usadas no trabalho aqui desenvolvido, acredita-se que sua descrição serve para situar o grau de complexidade associado à redução do custo computacional de mecanismos cinéticos detalhados.

2.3.1.

Redução por Análise dos Passos de Reação

Revel, Boettner, *et al.* (1994) apresentam um método baseado em análise dos passos da reação e em cálculo do fluxo atômico para a redução dos mecanismos de cinética química detalhada. A redução por análise e fluxo atômico consiste em estudar os passos da reação ao longo da coordenada de reação, retirando as espécies que se encontram em estado estacionário e determinando uma reação global entre as espécies restantes.

O método foi aplicado à mistura $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$, incluindo as reações do NO_x . Um mecanismo global para a combustão de metano e da formação de NO foi elaborado envolvendo apenas seis reações químicas e dez espécies. Este mecanismo é capaz de reproduzir o tempo de ignição, a evolução da temperatura e da concentração de espécies majoritárias e de NO sobre uma gama de condições experimentais.

A estratégia de redução permite dissociar os efeitos térmicos e cinéticos. Determina-se o fluxo atômico para cada átomo presente, derivado das taxas de reação, então, obtêm-se os fluxogramas para cada um dos átomos, C, H, O, N, e para diferentes tempos de reação. Comparando-se os gráficos dos diferentes

elementos, pode-se encontrar a reação envolvida em uma dada transformação, assim, as espécies e os coeficientes estequiométricos podem ser calculados.

Nesta técnica, as espécies estacionárias são identificadas e eliminadas; em seguida, obtêm-se as reações globais entre as demais espécies, aquelas não estacionárias. O estudo da evolução da reação no tempo permite identificar e separar cada passo importante e, então, elaborar um modelo global em acordo com as características termoquímicas da combustão. O último passo consiste em encontrar expressões para as taxas globais, que sejam numericamente estáveis, e adaptá-las aos resultados oriundos do mecanismo de cálculo detalhado.

2.3.2. ICE-PIC

O estado termodinâmico de um sistema é completamente descrito pela pressão, temperatura e frações molares, logo, quanto maior o número de espécies no mecanismo de cinética química detalhada, maior é o custo computacional associado ao cálculo das reações químicas. Assim, com o intuito de reduzir este custo computacional, Ren, Pope, *et al.* (2006) apresentam um método de simplificação da cinética química detalhada para reduzir o número de variáveis necessárias à descrição do sistema. Este método é conhecido como *Invariant Constrained Equilibrium Edge Preimage Curve* (ICE-PIC) e pode ser usado juntamente com métodos de armazenamento, como o ISAT, para reduzir, em muito, o custo computacional de uma simulação. Este método é, em grande parte, baseado em considerações geométricas, envolvendo diversas superfícies curvas, tubos de distribuição e suas interseções (Ren e Pope, 2005).

Esta é uma técnica cujos únicos parâmetros de entrada são o espaço de composição reduzida das espécies químicas e o mecanismo cinético detalhado. Os autores propõem um novo método baseado em um tubo de borda de equilíbrio restrito invariante (ICE). Esse tubo é gerado pelas trajetórias de reação oriundas da borda, onde a composição encontra-se em um estado de equilíbrio restrito. Em cada local deste tubo o estado termodinâmico é completamente caracterizado pela pressão, entalpia e número específico de moles das espécies. A técnica determina um único ponto deste tubo, que corresponde a cada valor realizável das variáveis representadas. A reconstrução de espécies, que é o processo de identificação do

ponto, tem como objetivo a determinação de uma estimativa da composição completa no tubo de distribuição ICE considerado.

Também é apresentado um método local de reconstrução das espécies, chamado de ICE-PIC, baseado num tubo ICE e usando pré-imagens de curvas (PIC), no qual não há a necessidade de representar o tubo ou gerá-lo por inteiro, o que seria mais custoso computacionalmente (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Os autores demonstram como as equações de uma chama laminar plana em regime permanente são resolvidas para gerar bibliotecas da composição completa das espécies químicas como função da distância ao longo da chama. Uma vez que a composição reduzida pode ser deduzida desta distância, uma das possíveis metodologias para reconstrução de espécies é usada para estimar a composição química completa e, a partir disso, o erro inerente à reconstrução das espécies.

O sistema de interesse consiste de n_s , espécies químicas compostas de n_{el} elementos. A composição das espécies é dada pela matriz \mathbf{E} de dimensão $n_s \times n_{el}$, onde o componente E_{ij} indica o número de átomos do elemento j em uma molécula da espécie i . Os autores usam o vetor $\mathbf{z} = \{z_1, z_2, \dots, z_{n_s}\}$ para representar a fração molar, o qual pertence ao espaço de composição completa C .

Considerando que a fração molar do elemento i denotada por z_i^e é parte do vetor $\mathbf{z}^e = \mathbf{E}^T \mathbf{z}$, (onde T denota a matriz transposta) de dimensão n_{el} , tem-se que, dado que o número de moles z^e é conservado, o sistema reativo pode ser descrito no espaço afim, de dimensão $n_s - n_{el}$, definido por:

$$C(\mathbf{z}^e) \equiv \{\mathbf{z} \mid \mathbf{E}^T \mathbf{z} = \mathbf{z}^e, \mathbf{z} \in C\}. \quad (2.6)$$

Define-se a região realizável C^+ do espaço reativo afim como:

$$C^+(\mathbf{z}^e) \equiv \{\mathbf{z} \mid z_i \geq 0, \mathbf{E}^T \mathbf{z} = \mathbf{z}^e, \mathbf{z} \in C\}. \quad (2.7)$$

Para ilustrar a técnica, Ren, Pope, *et al.* (2006) usam o espaço tridimensional ($n_s - n_{el} = 3$) do sistema quimicamente reativo idealizado H_2/O , sendo $n_s = 6$ e $n_{el} = 3$. A Figura 2-11 mostra a região realizável $C^+(\mathbf{z}^e)$, projetada no subespaço tridimensional C , com os vetores correspondentes espécies H_2 , O , e H_2O . A região realizável $C^+(\mathbf{z}^e)$ é um polítopo convexo de cinco lados em forma de cunha e a sua fronteira é composta por cinco faces (planas), em cada uma das

quais pelo menos um componente de z é zero, enquanto que no interior a região realizável todos componentes de z são estritamente positivos. Observa-se que duas trajetórias de reação hipotéticas estão representadas, através dos pontos z e z' , a partir dos pontos de origem na fronteira $z^b(z)$ e $z^b(z')$ e terminando no ponto de equilíbrio único $z_{eq}(z^e)$.

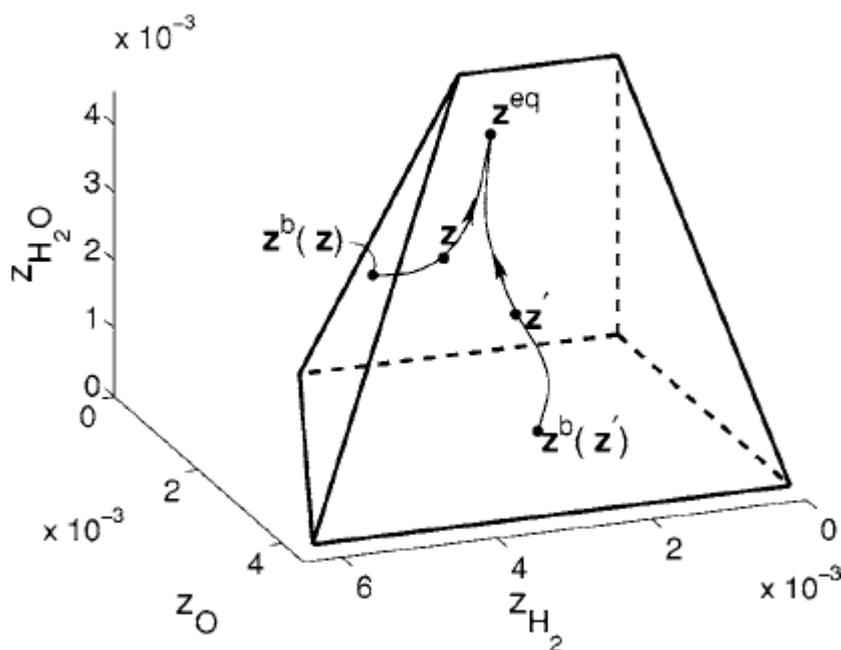


Figura 2-11. Ilustração da região realizável para o sistema idealizado H_2/O , com 2 trajetórias originando na fronteira e terminando no ponto de equilíbrio (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Devido às reações químicas, a composição $z(t)$ evolui no tempo, t , de acordo com o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs):

$$\frac{dz(t)}{dt} = S[z(t)], \quad (2.8)$$

onde $S(z)$ é o vetor taxa de variação, determinado pelo mecanismo de cinética química. As soluções da Eq.(2.8) fornecem o mapa de reação, $R(z,t)$, que representa a trajetória de reação no espaço de z :

$$R(z, 0) = z, \quad \frac{\partial R(z,t)}{\partial t} = S[R(z,t)]. \quad (2.9)$$

Os autores mostram que a trajetória da reação através de \mathbf{z} permanece na região realizável tende para o ponto de equilíbrio, quando o tempo é grande, e considerando-se a inversão da flecha do tempo, a trajetória intercepta a fronteira.

A composição reduzida, \mathbf{r} , é definida como um conjunto de n_r variáveis representadas, sendo $1 \leq n_r \leq (n_s - n_{el})$, que são, por exemplo, as espécies químicas majoritárias. Define-se, também, uma combinação linear das espécies, a qual forma a composição reduzida, $\mathbf{r} = \mathbf{B}^T \mathbf{z}$, onde \mathbf{B} é uma matriz $n_s \times n_r$. A composição reduzida \mathbf{r} é um vetor de dimensão n_r no espaço de composição reduzida, B , e é confinada à região realizável reduzida B^+ :

$$B^+(\mathbf{z}^e) \equiv \{\mathbf{r} | \mathbf{r} = \mathbf{B}^T \mathbf{z}, \mathbf{z} \in C^+(\mathbf{z}^e)\}, \quad (2.10)$$

a essa região reduzida, correspondem as espécies químicas representadas, as demais se constituem em espécies não representadas.

Redução de dimensão consiste, principalmente, da identificação de um tubo de atração de dimensão n_r , $M(\mathbf{z}^e)$, na região de realizável $C^+(\mathbf{z}^e)$. Os autores afirmam que, para cada ponto \mathbf{r} na região realizável reduzida, $B^+(\mathbf{z}^e)$, existe um único ponto correspondente ao tubo, denotado por $\mathbf{z}^M(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$, isto é, o tubo não é dobrado: Por hipótese da técnica, as composições que se encontram perto do tubo, são aproximadas por aquelas que estão dentro do tubo.

Na reconstrução das espécies, dados \mathbf{z}^e e \mathbf{r} , determina-se $\mathbf{z}^M(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$, que é um ponto e portanto não há necessidade de gerar ou representar o tubo por inteiro. Nesse caso, define-se também a região viável, F , que é a união da composição \mathbf{z} na região de C^+ e que contém a composição reduzida \mathbf{r} :

$$F(\mathbf{z}^e, \mathbf{r}) \equiv \{\mathbf{z} | \mathbf{B}^T \mathbf{z} = \mathbf{r}, \mathbf{z} \in C^+(\mathbf{z}^e)\}. \quad (2.11)$$

Dados \mathbf{z}^e e \mathbf{r} , sem outras considerações, geralmente não é possível determinar \mathbf{z} : as composições não representadas, \mathbf{u} , não são conhecidas. Mas sabe-se que \mathbf{z} está na região viável, F .

A Figura 2-12 mostra a região reduzida realizável $B^+(\mathbf{z}^e)$ (área sombreada), que é a projeção perpendicular da região realizável $C^+(\mathbf{z}^e)$ no subespaço reduzido. O plano horizontal $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ é o espaço de composição reduzido, B . Dada a composição \mathbf{z} , a composição reduzida \mathbf{r} é simplesmente a projeção

ortogonal no plano r_1 - r_2 . A composição não representada está no eixo u_1 . A figura também mostra as regiões viáveis (unidimensional) $F(r)$ e $F(r')$, correspondente aos pontos no interior r e na fronteira r' ; a região viável de dimensão zero, $F(r'')$, corresponde ao ponto r'' na fronteira.

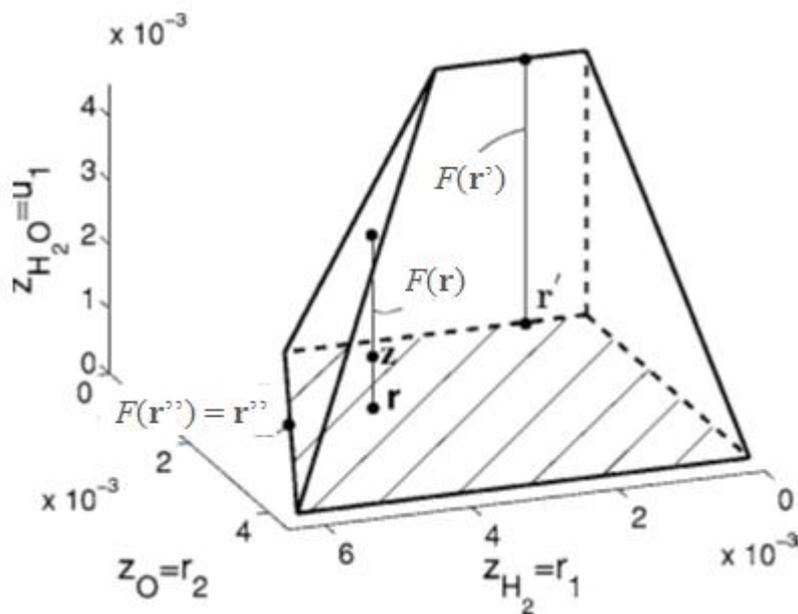


Figura 2-12. Ilustração da região realizável reduzida (hachurada), como a projeção da região realizável C^+ . A figura também mostra a região viável F (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Para um sistema considerado isobárico e isotérmico, define-se o tubo de equilíbrio restrito (CEM), denotado por $M^{CE}(z^e)$, como sendo a união dos pontos, $z^{CE}(z^e, r)$ na região viável onde a função de Gibbs é mínima:

$$M^{CE}(z^e) \equiv \{z = z^{CE}(z^e, r) | r \in B^+(z^e)\}. \tag{2.12}$$

A Figura 2-13 mostra o tubo CEM (grade) com H_2 e O sendo as espécies representadas para o sistema idealizado. O ponto é a composição de equilíbrio químico do sistema. As linhas em negrito formam a borda de equilíbrio restrito, que é a interseção entre o CEM e a fronteira da região realizável.

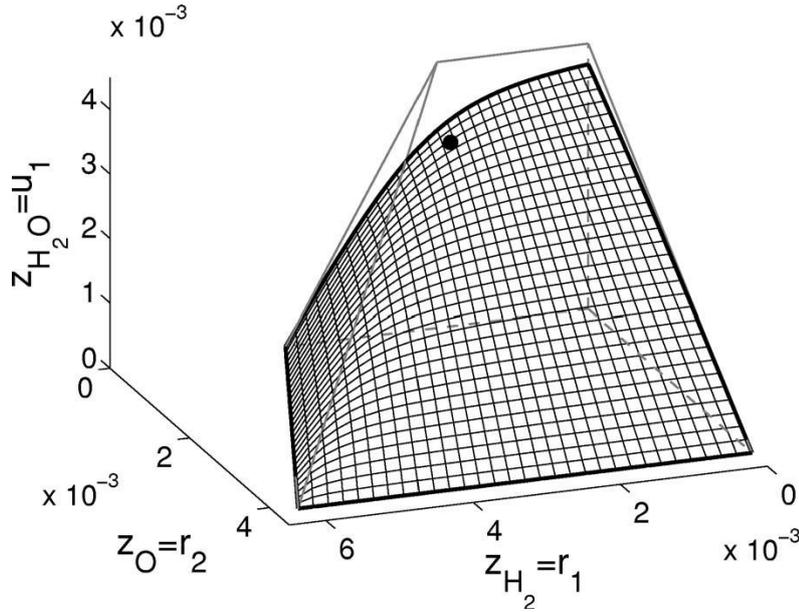


Figura 2-13. Tubo CEM, em negrito está a borda equilíbrio restrito $\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e)$ (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

A borda de equilíbrio restrito, outra curva de interesse, que representa a interseção de $M^{CE}(\mathbf{z}^e)$ e a fronteira da região realizável, é dada por:

$$\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e) \equiv M^{CE}(\mathbf{z}^e) \cap \partial C^+(\mathbf{z}^e). \quad (2.13)$$

Para cada ponto na fronteira da região realizável reduzida, $\partial B^+(\mathbf{z}^e)$, existe um único correspondente ponto na borda de equilíbrio restrito, que é dado por:

$$\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e) \equiv \{\mathbf{z} = \mathbf{z}^{CE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r}) | \mathbf{r} \in \partial B^+(\mathbf{z}^e)\}. \quad (2.14)$$

O tubo ICE, ilustrado na Figura 2-14, é a união de todas as trajetórias reação $\mathbf{R}(\mathbf{z}^s, t)$ progressivas no tempo t e provenientes da geração de pontos na, \mathbf{z}^s , na borda do tubo de equilíbrio restrito, $\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e)$. Assim, o tubo ICE (tubo de borda de equilíbrio restrito e invariante) que contém os pontos de equilíbrio, é definido como:

$$M^{ICE}(\mathbf{z}^e) \equiv \{\mathbf{z} | \mathbf{z} = \mathbf{R}(\mathbf{z}^g, t), t \geq 0, \mathbf{z}^g \in \partial M^{CE}(\mathbf{z}^e)\}. \quad (2.15)$$

Observa-se da Figura 2-14 que, para cada ponto originado na fronteira $\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e)$, a trajetória de reação segue, quase como uma linha reta, em direção a um tubo unidimensional altamente atrator. Apesar de não ser evidente a partir da

figura, esta trajetória muda bruscamente para aderir ao tubo atrator seguindo para o ponto de equilíbrio.

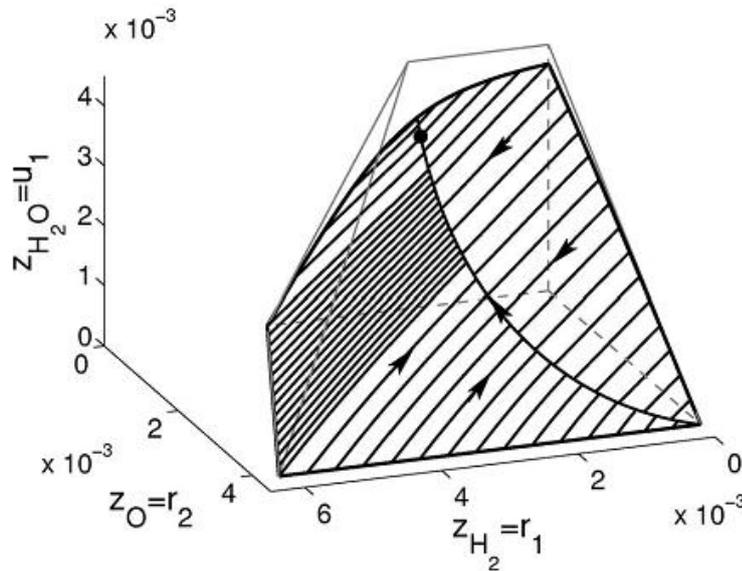


Figura 2-14. Tubo de equilíbrio invariante restrito (ICE), para um sistema idealizado, que é a união das trajetórias de reação da borda linhas do equilíbrio restrito (em negrito) (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Para cada composição reduzida \mathbf{r} existe um único ponto $\mathbf{z}^{ICE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$ correspondente no tubo, este ponto é definido como:

$$\mathbf{z}^{ICE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r}) \equiv \{\mathbf{z} | \mathbf{z} \in M^{ICE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r}), \mathbf{B}^T \mathbf{z} = \mathbf{r}\}. \quad (2.16)$$

As pré-imagens dos tubos (*preimage manifold*) mostrados na Figura 2-15, são assim descritos: Dada a composição reduzida, a composição completa é conhecida por estar na região viável, onde para cada ponto sobre ela, a trajetória de reação pode ser seguida para trás no tempo, até que cruze a fronteira neste determinado ponto. O *preimage manifold* é definido como a união de todas essas trajetórias de reação. A Figura 2-15 mostra a região viável e o *preimage manifold* gerado por ela, cujas fronteiras são as curvas $b1$ e $b2$, para o sistema idealizado H_2/O . Essas fronteiras são as intersecções entre *preimage manifold* e as fronteiras da região realizável.

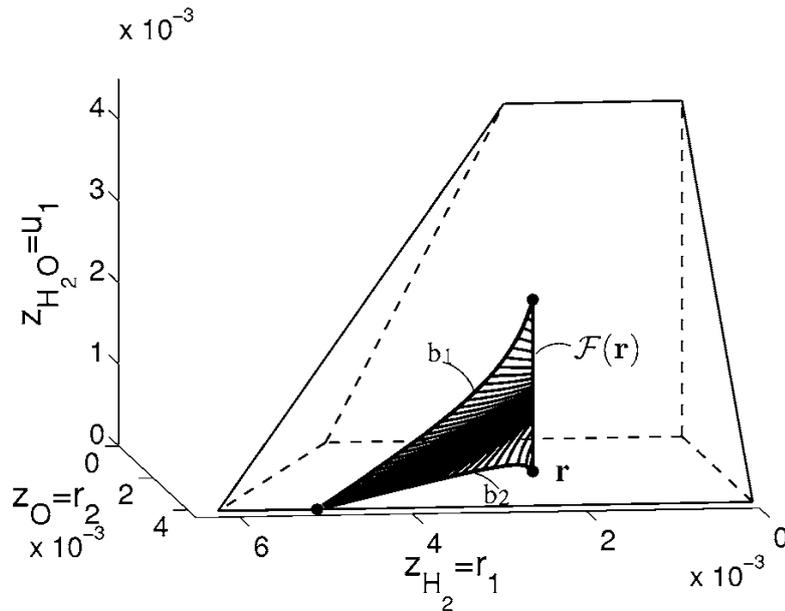


Figura 2-15. Representação da região realizável e do *preimage manifold* (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Ren, Pope, *et al.* (2006) consideram que a pré-imagem de uma curva é aquela situada no *preimage manifold* com uma extremidade na região viável e outra na fronteira da região realizável; e ainda, que todos os pontos nessa curva são pontos de equilíbrio restrito. Assim, a pré-imagem da curva de equilíbrio restrito (CE-PIC) é a interseção entre *preimage manifold* e tubo de equilíbrio restrito (CEM). Esta situação é apresentada na Figura 2-16:

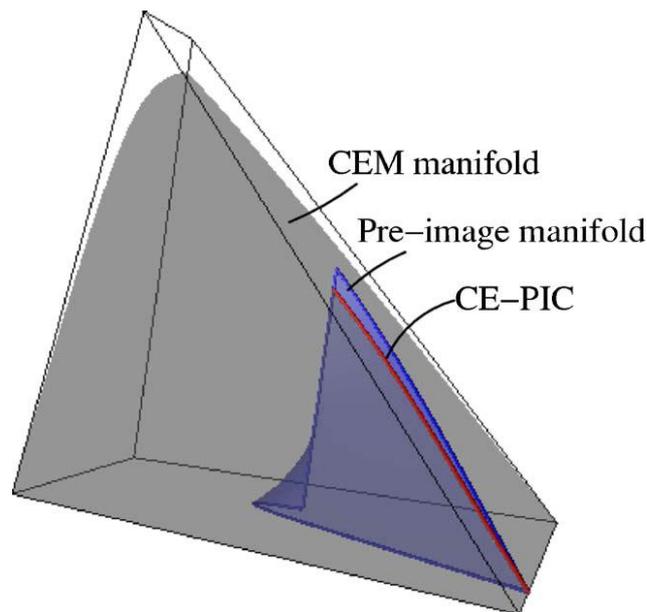


Figura 2-16. Representação da interseção entre *preimage manifold* e tubo de equilíbrio restrito (CEM). Essa interseção é a pré-imagem da curva de equilíbrio restrito (CE-PIC) (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Na redução da dimensão da cinética química da combustão, em substituição ao método global para geração do tubo de distribuição completo, que é computacionalmente inviável para a combustão química da maioria dos combustíveis, a proposta dos autores é usar uma técnica local de reconstrução das espécies, que identifica os pontos $\mathbf{z}^{ICE} = (\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$ no tubo ICE, para determinados valores da composição reduzida $(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$. A técnica, chamada ICE-PIC, que usa pré-imagem de curvas de equilíbrio restrito é ilustrada na Figura 2-17 e segue o algoritmo:

1. A composição do equilíbrio restrito $\mathbf{z}^{CE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$ é determinada;
2. A pré-imagem da curva de equilíbrio restrito, CE-PIC, é seguida partindo do fim da região viável $\mathbf{z}^{PIC}(0) = \mathbf{z}^{CE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$ até a fronteira $\mathbf{z}^{PIC}(s^b) = \mathbf{z}^g(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$;
3. A trajetória de reação de $\mathbf{z}^g(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$ é seguida progressivamente no tempo até interceptar a região viável em $\mathbf{z}^F(s^b) = \mathbf{z}^{ICE}(\mathbf{z}^e, \mathbf{r})$.

A Figura 2-17 representa o método ICE-PIC, com uma divisão em espécies representadas (r_1 e r_2) e não representadas (u_1). São feitas uma representação reduzida das espécies e uma redução da dimensão do sistema seguida da reconstrução das espécies. Na figura, observa-se um esquema da região realizável $C^+(\mathbf{z}^e)$ mostrando a região viável $F(\mathbf{r})$ e o ponto de equilíbrio restrito $\mathbf{z}^{CE}(\mathbf{r})$, correspondendo à composição reduzida \mathbf{r} dada. A pré-imagem da curva de equilíbrio restrito C^{CE} vai de \mathbf{z}^{CE} até sua borda terminando em \mathbf{z}^g , a qual está em uma face de $\partial C^+(\mathbf{z}^e)$ (triângulo à esquerda, no qual r_1 vale zero). É ilustrada também a borda do equilíbrio restrito $\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e)$ nesta face e a trajetória $\mathbf{R}(\mathbf{z}^g, t')$, que intercepta a região viável em \mathbf{z}^{ICE} .

Baseado nos dois pontos do CE-PIC $\mathbf{z}^{PIC}(s_1)$ e $\mathbf{z}^{PIC}(s_2)$, o valor previsto $\mathbf{z}^{\wedge g}$ é obtido por extrapolação de \mathbf{z}^g até a face. Uma iteração de Newton é feita e resulta em uma sucessão de estimativas $[\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{z}^{(1)}, \dots, \mathbf{z}^{(k)}, \dots]$ de \mathbf{z}^g (todas em $\partial M^{CE}(\mathbf{z}^e)$). O chute inicial, $\mathbf{z}^{(0)}$, tem o mesmo valor das variáveis representadas como $\mathbf{z}^{\wedge g}$. A iteração é baseada no refino de $\mathbf{z}^{(k)}$ com o cuidado de fazer a trajetória de reação projetada $\mathbf{B}^T \mathbf{R}(\mathbf{z}^{(k)}, t')$ passar por \mathbf{r} .

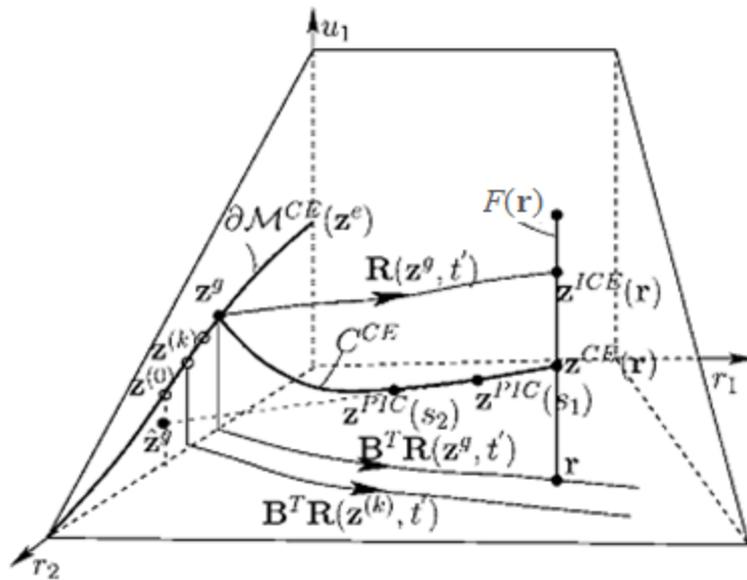


Figura 2-17. Esquema do método ICE-PIC (Ren, Pope, *et al.*, 2006).

Os autores afirmam que das metodologias de reconstrução de espécies que mostram bons resultados sobre uma gama de temperaturas, o ICE-PIC é o que produz o menor erro máximo.

2.4. Considerações Finais

A simulação numérica de processos de combustão está se tornando uma ferramenta de análise generalizada em diversas áreas, tais como turbinas a gás e de fornos de combustão.

No entanto, um dos principais inconvenientes que limitam a descrição fiel da realidade de modelos de combustão é o esforço computacional necessário para a solução de equações de transporte. De fato, tais equações envolvem um grande número de variáveis (fração de massa das espécies químicas) e incluem um termo fonte não linear associado à lei de Arrhenius. A rigidez e o esforço computacional relacionados com a determinação de tal termo, em grande parte, dominam o custo incorrido às simulações.

Esta dissertação é parte de um estudo cujo objetivo é minimizar os custos de avaliação de uma técnica de redução automática dos mecanismos de cinética química. Assim, duas abordagens de técnicas de redução automática do custo computacional associado aos mecanismos de cinética química foram analisadas: a

primeira faz alguma restrição a respeito da estrutura da chama a que a técnica pode ser aplicada, e nela foram estudados os métodos F-TACLES e MFM; a segunda não faz nenhuma consideração sobre a estrutura da chama, podendo ser aplicada a qualquer sistema, nela estão as técnicas ISAT, ICE-PIC e redução por análise dos passos de reação.

Das técnicas apresentadas e considerando-se o estado de desenvolvimento alcançado pela equipe de combustão da PUC-Rio, o ISAT é a técnica adotada neste estudo, por ser, ainda, uma técnica geral cuja aplicação não tem restrições e pode se dar a qualquer sistema. Durante a revisão bibliográfica, foi visto que o ISAT é uma técnica que vem sendo objeto de estudo, em busca de melhorias, desde que foi proposta, por isso, esse é um algoritmo que ainda está em constante evolução.

Sabendo que existem limitações de desempenho que podem ser reparadas, modificações no algoritmo serão propostas nessa dissertação objetivando a melhora da capacidade de armazenamento, do tempo de simulação, da acurácia das respostas e da eficiência da técnica. Estas modificações são implantadas sobre o algoritmo ISAT original, não fazendo parte do escopo deste trabalho a implementação de versões mais atuais da técnica ou seu acoplamento com o ICE-PIC.