

CHRISTIAN JÚNIOR DE OLIVEIRA

**ANÁLISE COMPARATIVA DE DOIS MODELOS
DA DISPERSÃO AXIAL ESTOCÁSTICA**

São Paulo
2020

CHRISTIAN JÚNIOR DE OLIVEIRA

**ANÁLISE COMPARATIVA DE DOIS MODELOS
DA DISPERSÃO AXIAL ESTOCÁSTICA**

Trabalho apresentado à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para ob-
tenção do Título de Engenheiro Químico.

São Paulo
2020

CHRISTIAN JÚNIOR DE OLIVEIRA

**ANÁLISE COMPARATIVA DE DOIS MODELOS
DA DISPERSÃO AXIAL ESTOCÁSTICA**

Trabalho apresentado à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para ob-
tenção do Título de Engenheiro Químico.

Área de Concentração:
Engenharia Química

Orientador:
Ardson dos Santos Vianna Junior

São Paulo
2020

Aos meus pais, Lúcia e Antônio.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por sua profunda misericórdia e bondade. Aos meus pais, Lúcia e Antônio, pelo apoio incondicional dado ao longo da vida. Ao Ardson, pela dedicação e empenho em me ensinar tudo que fosse necessário, pelo esclarecimento de quaisquer dúvidas existentes e pelo exemplo e fonte de inspiração durante o projeto. À Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, pelas oportunidades que constituem esta formação de Engenheiro Químico.

*“Um pessimista vê uma dificuldade em
cada oportunidade; um otimista vê uma
oportunidade em cada dificuldade”*

-- Winston Churchill

RESUMO

Muitos fenômenos em Engenharia Química são modelados como determinísticos, isto é, sem nenhum termo aleatório. Propostas de construção de modelos estocásticos são geralmente feitas a partir de modelos determinísticos acrescentando-se a eles uma parte estocástica. Essa tarefa pode ser feita, considerando-se que um dos parâmetros do modelo seja estocástico. Este trabalho se desenvolve em duas partes: a primeira, na qual se exploram os pacotes e módulos de processos estocásticos do software Maple, com algumas aplicações em Mercado Financeiro e Engenharia Química; e a segunda, na qual se implementam códigos em MATLAB para resolução de dois modelos para a dispersão axial estocástica: um, denominado modelo v' , no qual a velocidade é o parâmetro estocástico; e outro, denominado modelo D' , no qual o parâmetro de dispersão axial apresenta estocasticidade. Tais modelos são estudados, via simulações gráficas, mas também sob argumentos assintóticos simples que permitem inferir sobre a relevância da parte estocástica de cada um deles com o passar do tempo. Por fim, realizam-se simulações a estilo Monte Carlo para a construção de regiões de confiança para a concentração de um traçador em dispersão axial.

Palavras-Chave – Processo Estocástico, Dispersão Axial, Cálculo de Itô.

LISTA DE FIGURAS

1	Movimento Browniano: $X_0 = 0$, $\mu(t) = 0$, $\sigma(t) = \sin(t)$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 10 trajetórias geradas.	20
2	Movimento Browniano: $X_0 = 0$, $\sigma(t) = \sin(t)$. (a) $\mu(t) = 0$ com 50 trajetórias geradas; (b) $\mu(t) = 1$ com 1 trajetória gerada; (c) $\mu(t) = 1$ com 3 trajetórias geradas.	20
3	Movimento Browniano: $X_0 = 0$. (a) $\mu(t) = 1$, $\sigma(t) = \sin(t)$ com 1 trajetória gerada; (b) $\mu(t) = 1$, $\sigma(t) = \sin(t)$ com 10 trajetórias geradas; (c) $\mu(t) = 1$, $\sigma(t) = \sin(t)$ com 50 trajetórias geradas.	21
4	Movimento Browniano: $X_0 = 5$. (a) $\mu(t) = \sin(3t)$, $\sigma(t) = \cos(2t)$ com 10 trajetórias geradas; (b) $\mu(t) = \cos(3t)$, $\sigma(t) = \cos(2t)$ com 10 trajetórias geradas.	21
5	Realizações do processo $dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2}$ com $X_0 = 2$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 10 trajetórias geradas.	22
6	Realizações do processo $dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2}$. (a) com $X_0 = 1$ e 1 trajetória gerada; (b) com $X_0 = 1$ e 3 trajetórias geradas; (c) com $X_0 = 0$ e 1 trajetória gerada.	23
7	Realizações do processo $dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2}$ com $X_0 = 0,5$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.	23
8	Realizações do processo $dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1 - X)dW(t)$ com $X_0 = 2$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.	24
9	Realizações do processo $dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1 - X)dW(t)$ com $X_0 = 0,5$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.	24
10	Realizações do processo $dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1 - X)dW(t)$ com $X_0 = 0$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.	25
11	Movimento Browniano Geométrico com $S_0 = 1$ e $\mu = 0,6$ com (a) $\sigma = 0$; (b) $\sigma = 0,4$	28

12	Movimento Browniano Geométrico com $S_0 = 1$ e $\mu = 0,6$ com (a) $\sigma = 1$; (b) $\sigma = 1,5$	28
13	Processo de Ornstein-Uhlenbeck com $X_0 = 0,5$, $\mu = 1$ e $\theta = 1$. (a) com $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 0,1$ e $\sigma_3 = 0,3$; (b) com $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 0,01$ e $\sigma_3 = 0,1$	30
14	Processo de Ornstein-Uhlenbeck com $X_0 = 1$, $\mu = 1$ e $\theta = 0$ e $\sigma = 0,5$ comparado com uma trajetória estacionária $X_0 = 1$	30
15	Processo CIR com $X_0 = 0$, $\kappa = 1$, $\theta = 1$ e $\sigma = 0,5$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 10 trajetórias geradas.	31
16	Processo CIR com $X_0 = 0$, $\kappa = 1$ e $\sigma = 1$. (a) com $\theta = 2$; (b) com $\theta = 1$	31
17	Processo CIR com $X_0 = 0$, $\kappa = 1$ e $\sigma = 1$. (a) com $\theta = 2$ e 3 trajetórias geradas; (b) com $\theta = 1$ e 10 trajetórias geradas.	32
18	Problema da DBO com $B_t(0) = 1,005$, $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 1$ e $\sigma = 0,1$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 3 trajetórias geradas até $t = 100$	34
19	Problema da DBO. (a) $B_t(0) = 2$, $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 1$ e $\sigma = 0$; (b) $B_t(0) = 2$, $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 0$ e $\sigma = 0,1$; (c) $B_t(0) = 10$, $s_1 = -1$, $\bar{K}_1 = 0$ e $\sigma = 0,1$	34
20	Problema da DBO: $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 1$ e $\sigma = 0,1$ com 10 trajetórias realizadas. (a) $B_t(0) = 0$; (b) $B_t(0) = 0,5$; (c) $B_t(0) = 1,5$	35
21	Concentração $y(t)$ para $x = 1$ da dispersão axial não-estocástica.	47
22	Perfis de concentração $y(x)$ para diferentes t 's. As linhas representam as concentrações y para um mesmo instante de tempo t . Simulação obtida para $Pe = 1000$, $n_x = 1000$ e $t_f = 1000$. Curvas à esquerda representam tempos menores que curvas à direita.	48
23	Perfil de concentração $y(t)$ na saída do reator, para uma simulação do modelo v' com $Pe = 10$, $\sigma = 0,5$	49
24	Perfil de concentração $y(t)$ na saída do reator, para uma simulação do modelo D' com $Pe = 10$, $\sigma = 0,1$	50
25	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores do número de Peclet no caso não-estocástico.	51
26	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de Pe com $\sigma = 0,1$	51

27	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de σ com $Pe = 10$	52
28	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de σ com $Pe = 10$	52
29	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de Pe com $\sigma = 0.1$	53
30	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de σ com $Pe = 10$	53
31	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para $Pe = 10$, $\sigma = 0.2$. (a) com 3 simulações; (b) com 50 simulações.	54
32	Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para $Pe = 10$, $\sigma = 0.1$. (a) com 3 simulações; (b) com 50 simulações.	54

SUMÁRIO

1	Introdução	12
	Parte I: FUNDAMENTOS	13
2	Revisão Bibliográfica	14
2.1	Aspectos Teóricos	14
2.1.1	Processos Estocásticos	14
2.1.2	Equações Diferenciais	16
2.1.3	Cálculo Estocástico	17
2.2	Processos Estocásticos com o Maple	18
2.2.1	Metodologia	19
2.2.2	Movimento Browniano	19
2.2.3	Processo de Itô	21
2.2.3.1	Primeiro exemplo	22
2.2.3.2	Segundo exemplo	23
2.2.4	Movimento Browniano Geométrico	25
2.2.4.1	Fórmula analítica	25
2.2.4.2	Equação Diferencial de Black-Scholes	26
2.2.4.3	Simulações	27
2.2.5	Processo de Ornstein-Uhlenbeck	28
2.2.5.1	Simulações	29
2.2.6	Processo CIR - Cox, Ingersoll e Ross	30
2.2.7	Aplicação em Engenharia Química	32
2.2.7.1	Resultados	33

2.3	Conclusões	35
Parte II: DISPERSÃO AXIAL		36
3	Modelagem	37
3.1	Hipóteses	37
3.1.1	Modelo v'	37
3.1.2	Modelo D'	38
3.2	Adimensionalização	38
3.2.1	Modelo v'	39
3.2.2	Modelo D'	39
4	Metodologia	41
4.1	Método de Crank-Nicolson	41
4.1.1	Modelo v'	42
4.1.2	Modelo D'	44
4.2	Algoritmo de Thomas	45
5	Resultados e Discussões	46
5.1	Comparação entre os modelos	46
5.1.1	Solução da equação não-estocástica	46
5.1.2	Simulação do modelo v'	49
5.1.3	Simulação do modelo D'	50
5.2	Análise de sensibilidade	50
5.2.1	Caso não-estocástico	51
5.2.2	Modelo v'	51
5.2.3	Modelo D'	53
5.3	Regiões de confiança	53
5.3.1	Modelo v'	54

5.3.2	Modelo D'	54
6	Conclusão	55
	Referências	56
	Anexo A – Método de Monte Carlo	57

1 INTRODUÇÃO

Modelagens determinísticas estão presentes na grande maioria dos fenômenos estudados nas ciências aplicadas e engenharia. Por exemplo, modelos de reatores químicos, tais como os CSTR's, utilizam equações diferenciais ordinárias para a descrição de seu comportamento ao longo do tempo, até se atingir, muito provavelmente, um estado estacionário. Modelos de fenômenos de transporte também em sua maioria são estudados como determinísticos, muitas vezes empregando equações diferenciais parciais no tempo e no espaço para a descrição da transferência de uma propriedade de interesse, tal como a quantidade de movimento, a energia e a massa de um componente específico.

É fato que tais modelos são bastante úteis e funcionam realmente bem em muitos casos, mas infelizmente, em alguns casos eles também falham, justamente por negligenciarem fenômenos aleatórios existentes.

A modelagem estocástica muito provavelmente ganhou força na matemática aplicada com o desenvolvimento da equação de Langevin, [10], que procura descrever o movimento aleatório de partículas microscópicas em um meio fluido. Ela se baseia na hipótese de tais partículas microscópicas estarem submetidas a forças aleatórias, oriundas do choque também aleatório entre as próprias partículas. Assim, a equação pode ser obtida via balanço de forças, basicamente sob a seguinte forma:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -6\pi\eta d_p \frac{dx}{dt} + \xi(t) \quad (1.1)$$

em que x é a posição da partícula, m é a sua massa, d_p é o diâmetro da partícula e η é a viscosidade do fluido. O termo $-6\pi\eta d_p \frac{dx}{dt}$ é uma força resistiva, linearmente dependente da velocidade $\frac{dx}{dt}$ e $\xi(t)$ é uma força aleatória.

O presente trabalho será desenvolvido em torno de modelos regidos por equações diferenciais estocásticas de interesse em Engenharia Química.

PARTE I

FUNDAMENTOS

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Aspectos Teóricos

2.1.1 Processos Estocásticos

Processos estocásticos estão presentes em inúmeras áreas do conhecimento. Desde o ato de se lançar um dado e se verificar o resultado que sai, até formulações no Mercado Financeiro e na Mecânica Quântica abordam em maior ou menor grau conceitos e resultados sobre eventos aleatórios. Este trabalho se inicia, considerando-se que o leitor já possui certa familiaridade com tais assuntos, tais como, probabilidade, variáveis aleatórias e distribuições de probabilidade. A seguir, são discutidas algumas definições importantes no decorrer do trabalho, grande parte delas retirada de [3].

Primeiramente, é dada a definição de um processo estocástico:

Definição 1. (Processo estocástico) *Uma coleção $\{X(t)|t \geq 0\}$ de variáveis aleatórias dependentes do tempo t é chamada de um processo estocástico.*

Assim, um processo estocástico é um conjunto que indexa para cada tempo $t \geq 0$, uma variável aleatória que pode ter uma distribuição de probabilidade conhecida ou não. Além disso, dado o processo estocástico $X(\cdot)$, é possível estabelecer o conceito de uma *trajetória amostral* correspondente a ele.

Definição 2. (Trajetória amostral) *Seja Ω um espaço amostral. Então, para cada ponto $\omega \in \Omega$, a transformação $t \mapsto X(t, \omega)$ é uma trajetória amostral correspondente ao processo $\{X(t)|t \geq 0\}$.*

A seguir, serão definidos os processos de Markov:

Definição 3. (Processo de Markov) *Um processo estocástico $\{X(t)|t \geq 0\}$ é chamado um processo de Markov se $\forall n \geq 3, \forall t_1 < t_2 < \dots < t_n, \forall x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{R}$*

$$P[x_{t_n} < x_n | X_{t_1} = x_1, \dots, X_{t_{n-1}} = x_{n-1}] = P[x_{t_n} < x_n | X_{t_{n-1}} = x_{n-1}] \quad (2.1)$$

Isto é, a probabilidade condicional de uma variável aleatória dado um número finito de variáveis aleatórias anteriores depende apenas da última dessas variáveis.

Uma ótima aplicação de um processo de Markov está nos processos com incrementos independentes, isto é, um processo no qual o estado atual $X(t_n)$ depende apenas do estado anterior, $X(t_{n-1})$. Assim, um processo com incrementos independentes é também um processo de Markov.

Existem inúmeros processos de Markov descritos na literatura, tais como, os a parâmetro discreto, a exemplo das Cadeias de Markov, e os a parâmetro contínuo, a exemplo do Movimento Browniano, que será estudado mais adiante.

Definição 4. (Movimento Browniano Unidimensional) *Um processo estocástico com valores reais é chamado Movimento Browniano ou Processo de Wiener se:*

- $W(0) = 0$;
- $W(t) - W(s) = N(0, t - s)$, para $\forall t \geq s \geq 0$;
- (Incrementos Independentes) Para toda sequência de tempos $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n$ as variáveis aleatórias $W(t_j) - W(t_i)$, $(1 \leq i < j \leq n)$ são independentes.

Em particular, fazendo $s = 0$ no segundo item da definição do movimento browniano,

$$W(t) = N(0, t) \text{ para } \forall t \geq 0, \quad (2.2)$$

isto é, todo processo de Wiener $W(t)$ é um processo normalmente distribuído com média 0 e variância t . Perceba-se, dessa forma, que um processo de Wiener também é um processo de Markov.

Definição 5. (Ruído Branco) *Seja $W(\cdot)$ um Processo de Wiener, então designa-se por ruído branco, o processo $\xi(\cdot)$ que satisfaz a seguinte equação:*

$$dW(t) = \xi(t)dt \quad (2.3)$$

isto é, o ruído branco é a derivada temporal de um Processo de Wiener. Na forma integral, o Processo de Wiener é dado por:

$$W(t) = \int_0^t \xi(s)ds \quad (2.4)$$

As últimas duas definições são estabelecidas para processos unidimensionais. De modo análogo, os conceitos de movimento browniano e ruído branco multidimensionais podem ser enunciados. De modo simplificado,

Definição 6. (Movimento Browniano n-dimensional) Um processo estocástico $\mathbf{W}(\cdot) = (W^1(\cdot), W^2(\cdot), \dots, W^n(\cdot))$ com valores em $\mathbb{R}^n$ é chamado Movimento Browniano ou Processo de Wiener *n-dimensional* se:

- para $\forall k \in \{1, 2, \dots, n\}$, $W^k(\cdot)$ é um movimento browniano unidimensional.
- $W^i(\cdot)$ e $W^j(\cdot)$ são independentes.

A última condição é equivalente ao seguinte lema demonstrado em Evans [3]:

$$E(W^k(t)W^l(s)) = \min\{t, s\}\delta_{kl} \text{ para } k, l = 1, 2, \dots, n. \quad (2.5)$$

em que δ_{kl} é o delta de Kronecker, que vale 0, para $k \neq l$; e 1, para $k = l$. De modo análogo, o ruído branco n-dimensional pode ser definido como

$$\xi(t) := \frac{d\mathbf{W}(t)}{dt} \quad (2.6)$$

que é bastante utilizado em processos multidimensionais.

2.1.2 Equações Diferenciais

Introduz-se nesta seção o conceito de equações diferenciais estocásticas. Inicialmente, considere o conhecido Problema de Valor Inicial, também chamado de Problema de Cauchy das equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{cases} \dot{x} = f(t, x) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad (2.7)$$

em que $x(t_0) = x_0$ é chamada condição inicial, $x : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ é chamada solução do problema, e $f : I \times U \rightarrow \mathbb{R}^n$, para $U \subseteq \mathbb{R}^n$, é frequentemente chamado de campo de vetores, ou mesmo, campo de velocidades, do problema.

Uma fórmula análoga de se dizer que uma função $\varphi(t, x_0)$ é solução do problema de Cauchy é dizer que $\varphi(t, x_0)$ satisfaz a seguinte equação integral:

$$\varphi(t, x_0) = x_0 + \int_{t_0}^t f(s, \varphi(s, x_0))ds \quad (2.8)$$

em que $\varphi(t, x_0)$ é chamada fluxo da EDO e depende da condição inicial do problema.

Existem inúmeros teoremas e resultados de equações diferenciais ordinárias (EDO's) que não são enunciados aqui, tais como o Teorema de Existência e Unicidade, que analisa a existência e a unicidade de soluções para o Problema de Cauchy, a partir de condições que

o campo f precisa satisfazer. A seguir, a definição de uma equação diferencial estocástica será abordada como uma modificação que inclua um termo aleatório na EDO acima. Para isso, seja

$$\begin{cases} \dot{X} = f(t, X) + F(t, X)\xi(t) \\ X(t_0) = X_0 \end{cases} \quad (2.9)$$

em que $\xi(t)$ é o ruído branco definido anteriormente e $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{M}^{n \times m}$ e $\mathbb{M}^{n \times m}$ é o espaço das matrizes $n \times m$.

Lembrando que $d\mathbf{W}(t) = \xi(t)dt$ e $\dot{X} = \frac{dX}{dt}$, pode-se reescrever a última equação, obtendo a forma usual de uma equação diferencial estocástica:

$$\begin{cases} dX = f(t, X)dt + F(t, X)d\mathbf{W}(t) \\ X(t_0) = X_0 \end{cases} \quad (2.10)$$

que será frequentemente usada no decorrer deste trabalho.

2.1.3 Cálculo Estocástico

A seguir, serão apresentados alguns elementos do cálculo estocástico, associando-os aos respectivos elementos no cálculo convencional, destacando a diferença entre eles. Emprega-se nesta seção a mesma notação de Evans [3].

Definição 7. (Integral Estocástica de Itô) *Seja $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$ um step process [3]. Então*

$$\int_0^T GdW := \sum_{k=0}^{m-1} G_k(W(t_{k+1}) - W(t_k))$$

é a integral estocástica de Itô de G no intervalo $]0, T[$.

Uma analogia clássica que pode aqui ser mencionada é entre a Integral de Itô e a Integral de Riemann utilizada no cálculo convencional.

Definição 8. *Seja $X(\cdot)$ um processo estocástico com valores reais satisfazendo*

$$X(r) = X(s) + \int_s^r Fdt + \int_s^r GdW$$

para todos os $0 \leq s \leq r \leq T$. Então diz-se que $X(\cdot)$ satisfaz a equação diferencial estocástica

$$dX = Fdt + GdW \text{ para } 0 \leq t \leq T.$$

Aqui, uma boa analogia existe entre a solução de um equação diferencial estocástica (EDE) e a solução da sua EDO correspondente.

Teorema 1. (Fórmula de Itô ou Fórmula da Cadeia de Itô) *Suponha que $X(\cdot)$ satisfaça:*

$$dX = Fdt + GdW$$

Seja $u : \mathbb{R} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ contínua com $\frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ existentes e contínuas. Então

$$d(u(X(t), t)) = \frac{\partial u}{\partial t}dt + \frac{\partial u}{\partial x}dX + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}G^2dt = \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x}F + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}G^2 \right) dt + \frac{\partial u}{\partial x}GdW.$$

Aqui, a analogia existente é entre a regra da cadeia do cálculo convencional e a regra de Itô. Perceba-se a presença do termo $\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}G^2dt$ adicional que diferencia as duas regras da cadeia.

Como exemplo de aplicação da *Fórmula de Itô*, será apresentada mais adiante uma dedução da *Equação Diferencial de Black-Scholes*.

Teorema 2. (Regra do Produto de Itô) *Sendo*

$$\begin{cases} dX_1 = F_1dt + G_1dW \\ dX_2 = F_2dt + G_2dW \end{cases} \quad (0 \leq t \leq T)$$

Então

$$d(X_1X_2) = X_2dX_1 + X_1dX_2 + G_1G_2dt \quad (2.11)$$

Por exemplo, como $dW = dW$, então na notação utilizada no enunciado da Regra do Produto de Itô, $F_1 = F_2 = 0$ e $G_1 = G_2 = 1$, o que implica:

$$d(W^2) = dt + 2WdW$$

Na forma integral, obtém-se uma identidade muito conhecida do cálculo estocástico:

$$\int_a^b WdW = \frac{W^2(b) - W^2(a)}{2} - \frac{b - a}{2}$$

Perceba-se que a regra de Itô difere da regra do produto convencional, ao se considerar o termo G_1G_2dt , que depende da variação no tempo.

2.2 Processos Estocásticos com o Maple

Nesta seção, são apresentados exemplos de processos estocásticos que podem ser simulados com o auxílio do software Maple.

2.2.1 Metodologia

A simulação de processos estocásticos no Maple foi executada na versão 18. Empregou-se o módulo *Finance* e o pacote *Stochastic Processes*. Tal módulo, usado em modelagem financeira, suporta uma vasta biblioteca de processos estocásticos utilizados em Engenharia Financeira. Processos para preço de ações, opções e taxas de juros estão presentes. Nas próximas seções são abordados alguns exemplos simulados com os seguintes comandos:

- **Movimento Browniano:** `BrownianMotion( $x_0, \mu, \sigma$ )`
- **Processo de Itô:** `ItoProcess( $x_0, \mu, \sigma, x, t$ )`
- **Movimento Browniano Geométrico:** `GeometricBrownianMotion( $x_0, \mu, \sigma, t$ )`
- **Processo de Ornstein-Uhlenbeck:** `OrnsteinUhlenbeckProcess( $x_0, \mu, \theta, \sigma$ )`
- **Processo CIR:** `SquareRootDiffusion( $x_0, \kappa, \theta, \sigma$ )`

em que x_0 é o estado inicial, μ é um parâmetro que depende de processo para processo, σ é a volatilidade e κ é um parâmetro especificado posteriormente. Alguns comandos, tais como o *ItoProcess* permitem simular casos em que μ e σ variam com o tempo e com o próprio processo, representado por x . Por fim, como aplicação adicional do comando *ItoProcess* resolve-se um problema, descrito em [4], sobre demanda bioquímica de oxigênio.

2.2.2 Movimento Browniano

O Movimento Browniano foi assim chamado quando o botânico escocês Robert Brown analisou o movimento aleatório do pólen ao microscópio sobre uma superfície de líquido. Depois de vários estudos, observou-se que o movimento se dá devido aos choques aleatórios entre o pólen e as partículas do meio. O movimento browniano tem inúmeras aplicações em diversas áreas do conhecimento, principalmente por ser um objeto central na teoria dos processos estocásticos. Exemplos das aplicações são a dinâmica de partículas microscópicas, a variação dos preços de ativos no Mercado Financeiro e o ruído térmico nos circuitos elétrico.

Seja X um processo estocástico, então diz-se que X é um Movimento Browniano se X satisfaz a seguinte equação diferencial estocástica:

$$\begin{cases} dX(t) = \mu(t)dt + \sigma(t)dW(t) \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (2.12)$$

em que $\mu(t)$ é conhecido como *drift* e $\sigma(t)$ é a *volatility* de X .

A figura 1 mostra alguns resultados de simulações do Movimento Browniano, quando o processo estocástico é governado apenas pela parte aleatória, isto é, quando se desconsiderou a parte determinística, igualando-a a zero. Nessas figuras, a volatilidade utilizada varia com o tempo, conforme uma resposta senoidal: $\sigma(t) = \sin(t)$. As figuras (a), (b) e (c) diferem entre si pelo número de trajetórias geradas.

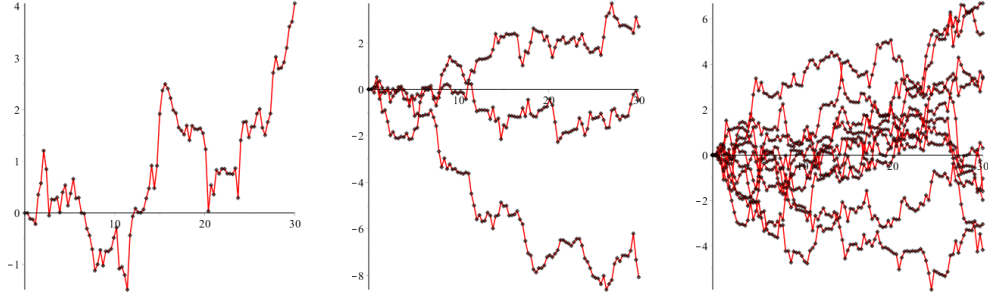


Figura 1: Movimento Browniano: $X_0 = 0$, $\mu(t) = 0$, $\sigma(t) = \sin(t)$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 10 trajetórias geradas.

Entretanto, se o valor da parte determinística do processo for alterado, alterando-o para 1, o comportamento do processo já se assemelha mais ao do comportamento determinístico, como pode ser verificado na figura 2, uma vez que a volatilidade $\sigma(t) = \sin(t) < 1$, sendo relativamente pequeno. Assim, para esses exemplos, verifica-se que o processo alcançou, para $t = 30$, valores bem maiores, superiores a 25 na figura (b), e superiores a 30 na figura (c), enquanto que na figura (a) os valores não ultrapassam um terço do valor percebido nas outras condições. As equações para as simulações são: $dX(t) = \sin(t)dW(t)$ para a simulação (a) e $dX(t) = dt + \sin(t)dW(t)$ para as simulações (b) e (c).

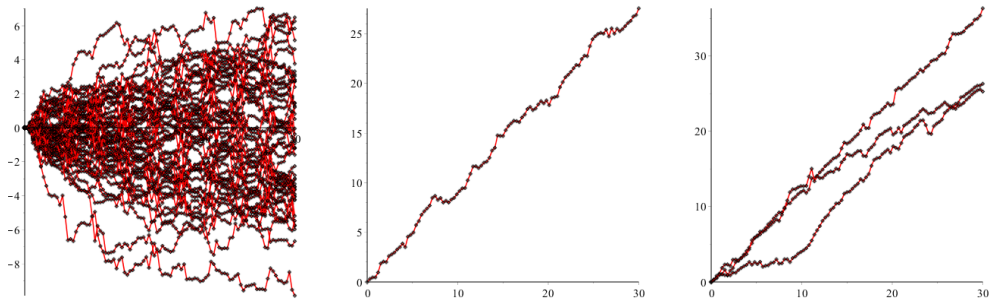


Figura 2: Movimento Browniano: $X_0 = 0$, $\sigma(t) = \sin(t)$. (a) $\mu(t) = 0$ com 50 trajetórias geradas; (b) $\mu(t) = 1$ com 1 trajetória gerada; (c) $\mu(t) = 1$ com 3 trajetórias geradas.

A figura 3 elucida a evolução das mesmas condições do processo, quando várias tra-

jetórias diferentes são geradas.

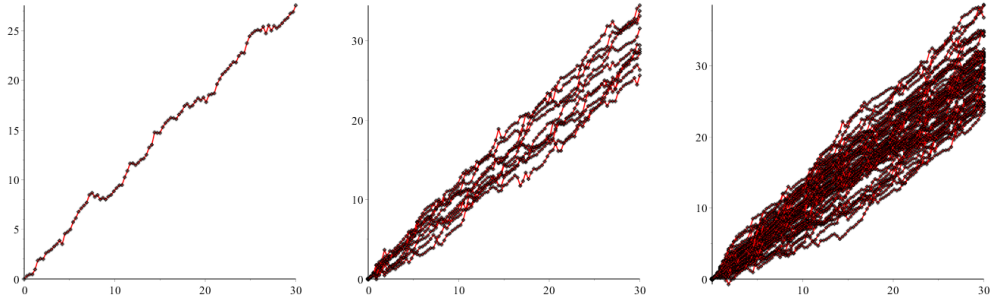


Figura 3: Movimento Browniano: $X_0 = 0$. (a) $\mu(t) = 1$, $\sigma(t) = \sin(t)$ com 1 trajetória gerada; (b) $\mu(t) = 1$, $\sigma(t) = \sin(t)$ com 10 trajetórias geradas; (c) $\mu(t) = 1$, $\sigma(t) = \sin(t)$ com 50 trajetórias geradas.

A figura 4 elucida o caso em que o *drift* varia com o tempo. Nas figuras (a) e (b), $\sigma(t) = \cos(2t)$, enquanto $\mu(t) = \sin(3t)$ em (a), e $\mu(t) = \cos(3t)$ em (b). As equações simuladas são: $dX(t) = \sin(3t)dt + \cos(2t)dW(t)$ para a simulação (a), $dX(t) = \cos(3t)dt + \cos(2t)dW(t)$ para a simulação (b).

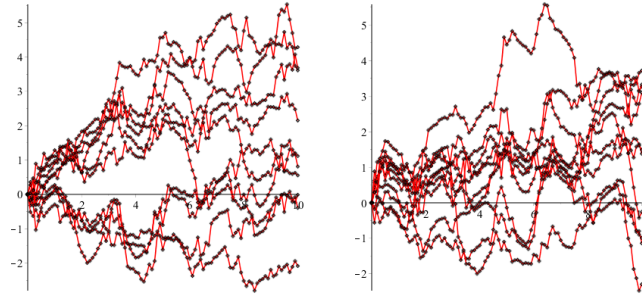


Figura 4: Movimento Browniano: $X_0 = 5$. (a) $\mu(t) = \sin(3t)$, $\sigma(t) = \cos(2t)$ com 10 trajetórias geradas; (b) $\mu(t) = \cos(3t)$, $\sigma(t) = \cos(2t)$ com 10 trajetórias geradas.

Uma generalização interessante do Movimento Browniano é o *Processo de Itô*:

2.2.3 Processo de Itô

Seja X um processo estocástico, então diz-se que X é um Processo de Itô se X satisfaz a seguinte equação diferencial estocástica:

$$\begin{cases} dX(t) = \mu(X(t), t)dt + \sigma(X(t), t)dW(t) \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (2.13)$$

em que $\mu(X(t), t)$ é chamado de *drift* e $\sigma(X(t), t)$ de *volatility*.

A grande vantagem do Processo de Itô, frente ao Movimento Browniano, é poder ser mais genérico, de modo que fenômenos, nos quais a *drift* e a *volatility* variam com o processo $X(\cdot)$, possam ser modelados por este processo.

Como aplicação do Processo de Itô, é estudado um exemplo no qual a volatilidade $\sigma(X(t), t)$ tende a zero quando $t \rightarrow +\infty$, isto é,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma(X(t), t) = 0$$

Tal exemplo tem uma grande aplicabilidade quando o processo estocástico no infinito apresenta aleatoriedade pequena.

2.2.3.1 Primeiro exemplo

Seja X um processo estocástico governado por um Processo de Itô, cujo *drift* é dado por $\mu(X(t), t) = X(1 - X)$ e cuja volatilidade é dada por $\sigma(X(t), t) = \frac{1}{1+t^2}$. Assim, o modelo de processo a ser simulado será:

$$\begin{cases} dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2} \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (2.14)$$

A figura 5 apresenta o resultado das simulações para $X_0 = 2$. Perceba-se que quanto maior o valor de t , menor é a aleatoriedade apresentada pela trajetória simulada.

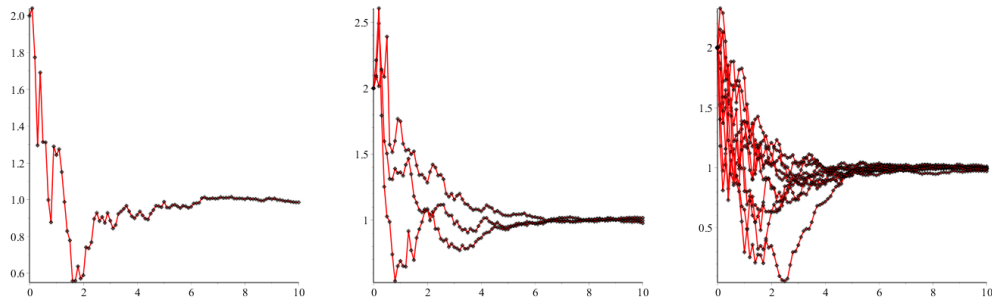


Figura 5: Realizações do processo $dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2}$ com $X_0 = 2$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 10 trajetórias geradas.

A figura 6 apresenta o resultado das simulações para X_0 sendo diferentes valores de posição de equilíbrio da EDO correspondente, isto é, valores de X_0 que são soluções da equação $\mu(X, t) = 0$. Perceba-se que o desvio de X das posições de X_0 para tempos pequenos dependem exclusivamente do termo aleatório, isto é, de $\sigma(X, t)dW(t)$. Além disso, como se analisa o mesmo modelo, percebe-se que a aleatoriedade do processo diminui com o tempo.

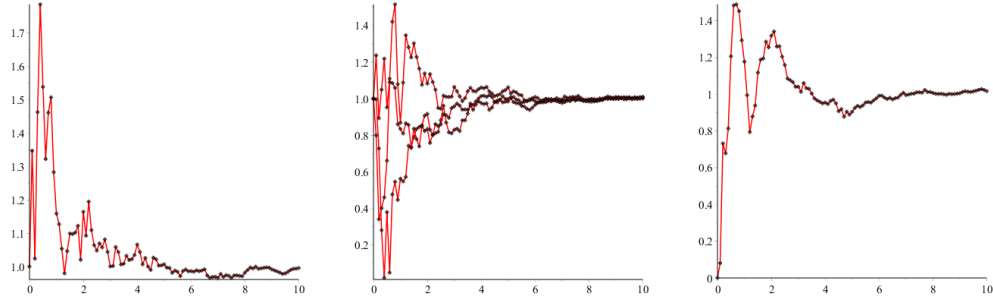


Figura 6: Realizações do processo $dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2}$. (a) com $X_0 = 1$ e 1 trajetória gerada; (b) com $X_0 = 1$ e 3 trajetórias geradas; (c) com $X_0 = 0$ e 1 trajetória gerada.

Por último, analisa-se o caso em que $X_0 = 0,5$, valor entre as duas raízes de $\mu(X, t) = 0$. A figura 7 mostra os resultados de duas simulações.

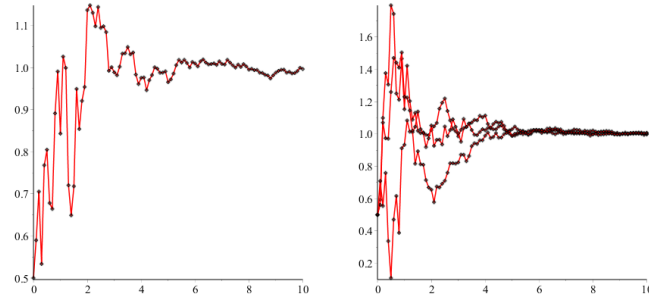


Figura 7: Realizações do processo $dX(t) = X(1 - X)dt + \frac{dW(t)}{1+t^2}$ com $X_0 = 0,5$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.

2.2.3.2 Segundo exemplo

Agora, considere um exemplo que troca o *drift* e a volatilidade com o último exemplo, isto é, agora $\mu(X, t) = \frac{1}{1+t^2}$ e $\sigma(X, t) = X(1 - X)$, logo o processo a ser simulado é:

$$\begin{cases} dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1 - X)dW(t) \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (2.15)$$

A figura 8 apresenta o resultado de 2 simulações para $X_0 = 2$. Note que para valores pequenos de t , X é bastante influenciado pelo *drift*, enquanto que para valores grandes de t , o *drift* contribui pouco com a variação de X . Logo, se X atingiu valores próximos de 1, a volatilidade fica muito baixa, ou seja, próxima de zero, e consequentemente a aleatoriedade das trajetórias tende a ficar pequena.

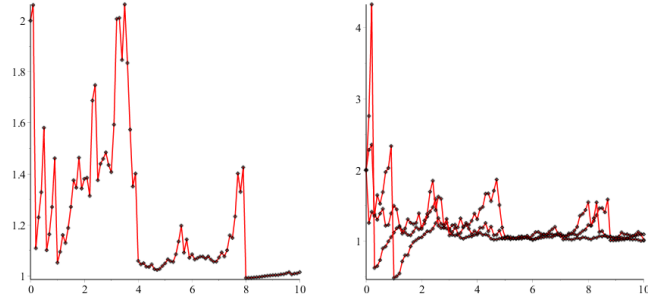


Figura 8: Realizações do processo $dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1-X)dW(t)$ com $X_0 = 2$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.

A figura 9 apresenta o resultado de 2 simulações para $X_0 = 0,5$. Perceba-se que para valores pequenos de t , o *drift* contribui com inclinações acentuadas que tendem a se aproximar de zero para $t \rightarrow +\infty$. Note que na primeira simulação, o processo X se aproximou de 0, o que fez com que $\sigma(X, t) = X(1-X) \approx 0$ e como o *drift* foi ficando cada vez menor, o processo X se aproximou da solução estacionária, com um erro cada vez menor.

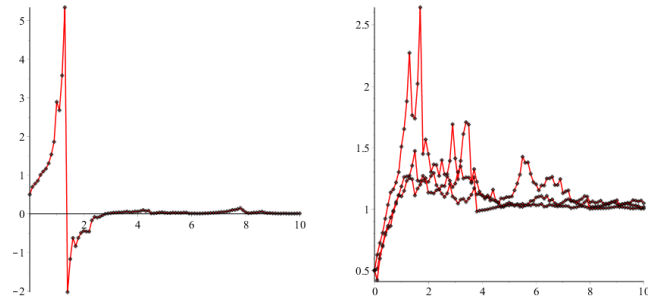


Figura 9: Realizações do processo $dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1-X)dW(t)$ com $X_0 = 0,5$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.

A figura 10 apresenta o resultado de 2 simulações para $X_0 = 0$. Perceba-se que para valores pequenos de t , o *drift* contribui com uma elevada inclinação e à medida que para essas duas simulações, X se aproxima de 1, a contribuição da volatilidade sobre o fenômeno aleatório fica bem pequena, o que caracteriza uma solução próxima da estacionária.

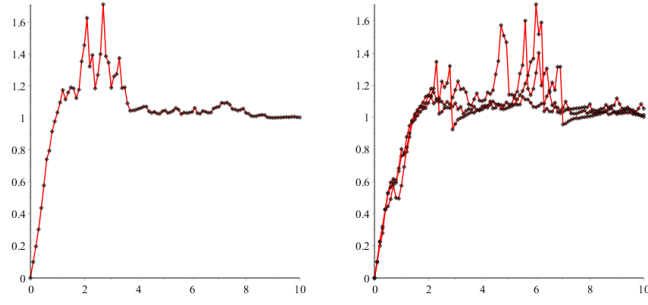


Figura 10: Realizações do processo $dX(t) = \frac{dt}{1+t^2} + X(1-X)dW(t)$ com $X_0 = 0$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas.

Um caso particular de processo de Itô é o Movimento Browniano Geométrico:

2.2.4 Movimento Browniano Geométrico

Seja S um processo estocástico, então diz-se que S é um Movimento Browniano Geométrico se S satisfaz a seguinte equação diferencial estocástica:

$$\begin{cases} \frac{dS(t)}{S(t)} = \mu(t)dt + \sigma(t)dW(t) \\ S(0) = S_0 \end{cases} \quad (2.16)$$

O caso, em que $\mu(t)$ e $\sigma(t)$ são constantes, é conhecido como *Modelo Clássico de Black-Scholes*, que modela o comportamento do preço de um ativo $S(\cdot)$ com a *risk free rate* μ e a *volatility* σ .

2.2.4.1 Fórmula analítica

Resolvendo o caso $\mu(t)$ e $\sigma(t)$ constantes:

$$\begin{cases} dS = \mu S dt + \sigma S dW(t) \\ S(0) = S_0 \end{cases} \quad (2.17)$$

Pela Fórmula de Itô, considerando $dX = dW \implies F = 0$ e $G = 1$, basta que:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial x} = \sigma S \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = \mu S \end{cases} \quad (2.18)$$

A primeira equação implica

$$S = e^{\sigma x} \cdot C_1(t)$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right) = \sigma^2 S$$

Substituindo o resultado na segunda equação:

$$\frac{dC_1}{dt} = \left(\mu - \frac{1}{2}\sigma^2 \right) C_1 \implies C_1(t) = C \cdot e^{(\mu - \frac{1}{2}\sigma^2)t}$$

Para a condição inicial $S(0) = S_0$ e como $S = e^{\sigma W} \cdot C_1(t)$ e $W(0) = 0$, tem-se que:

$$S(t) = S_0 e^{\sigma W(t) + (\mu - \frac{1}{2}\sigma^2)t} \quad (2.19)$$

2.2.4.2 Equação Diferencial de Black-Scholes

Seja $C = C(S(t), t)$ o preço de uma opção sobre um ativo financeiro (uma ação, por exemplo) que satisfaz a seguinte equação diferencial estocástica:

$$dS = \mu S dt + \sigma S dW$$

isto é, o preço do ativo é um Movimento Browniano Geométrico. Pela Fórmula de Itô,

$$\begin{aligned} dC &= \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \mu S \frac{\partial C}{\partial S} + \frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} \right) dt + \sigma S \frac{\partial C}{\partial S} dW \\ \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} \right) dt &= dC - \frac{\partial C}{\partial S} (\mu S dt + \sigma S dW) \\ \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} \right) dt &= dC - \frac{\partial C}{\partial S} dS \end{aligned}$$

Construindo um portfólio constituído da opção e do ativo com uma estratégia de *hedge*, a estratégia de *hedge* é um mecanismo de proteção que visa minimizar o risco da perda financeira decorrente de uma variação inesperada no preço da opção e do seu ativo-objeto. Assim, o valor do portfólio é dado por:

$$\Pi := C - \Delta S = C - \frac{\partial C}{\partial S} S$$

em que para cada opção se escolhe o número de ativos-objeto Δ no portfólio igual a $\frac{\partial C}{\partial S}$. Logo o retorno esperado para o portfólio em um intervalo de tempo dt é dado por:

$$d\Pi = dC - \frac{\partial C}{\partial S} dS = \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} \right) dt$$

Para uma condição de não-arbitragem, é necessário que esse retorno seja dado por uma taxa livre de risco, isto é,

$$d\Pi = r\Pi dt$$

em que r é a taxa de retorno livre de risco. Logo,

$$\begin{aligned}\frac{d\Pi}{dt} &= r\Pi = \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2}\sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} \right) \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2}\sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} + rS \frac{\partial C}{\partial S} - rC &= 0\end{aligned}\tag{2.20}$$

que é conhecida como Equação Diferencial de Black-Scholes.

Essa última dedução apenas exemplifica uma importante aplicação dessa modelagem de processos estocásticos no Mercado Financeiro. Cabe ressaltar que o Modelo de Black-Scholes utiliza-se de várias hipóteses. Podem-se enunciar as principais, conforme [2]:

- O Preço do ativo-objeto S segue um Movimento Browniano Geométrico.
- A taxa de juros livre de risco r é conhecida e constante no tempo.
- O ativo não paga dividendos.
- O mercado é perfeito.
- A opção é do tipo europeia, ou seja, o direito oferecido pela opção só pode ser exercido na data de vencimento.
- Não existem condições de arbitragem sem risco.

2.2.4.3 Simulações

A figura 11 apresenta o resultado de duas simulações para o Movimento Browniano Geométrico com o *drift* e a volatilidade constantes. Perceba-se que para uma realização do movimento com um volatilidade $\sigma = 0$, a realização se aproxima da trajetória exponencial da equação diferencial ordinária $dS = \mu S dt$, ou, como de costume: $\frac{dS}{dt} = \mu S$. Por outro lado, ao se alterar a volatilidade para $\sigma = 0,4$, percebe-se um distanciamento entre a trajetória exponencial da EDO e a realização do movimento.

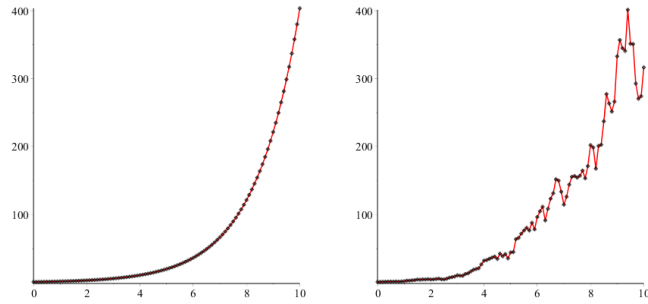


Figura 11: Movimento Browniano Geométrico com $S_0 = 1$ e $\mu = 0,6$ com (a) $\sigma = 0$; (b) $\sigma = 0,4$.

Do mesmo modo, a figura 12 mostra duas simulações para o movimento para valores diferentes de volatilidade. Perceba-se que na segunda simulação, quando a volatilidade $\sigma = 1,5$ é maior que o valor da volatilidade da primeira simulação, em que $\sigma = 1$, a aleatoriedade da trajetória não foi maior para valores grandes de t . Isso se deve ao fato de a contribuição estocástica do modelo, que é dada por $\sigma S dW$, ficar menor com o passar do tempo justamente por causa dos valores que S foi tomando. Note que os valores de S foram ficando cada vez mais próximos de zero e, por consequência, o termo estocástico $\sigma S dW$ do movimento foi se reduzindo a 0.

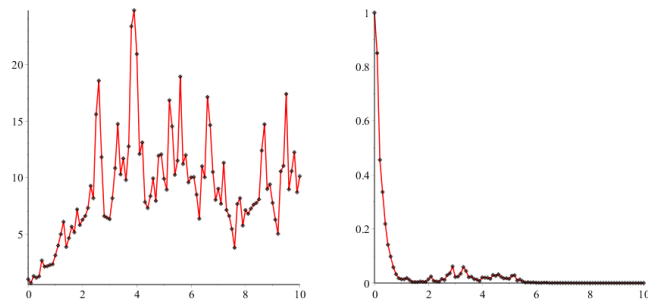


Figura 12: Movimento Browniano Geométrico com $S_0 = 1$ e $\mu = 0,6$ com (a) $\sigma = 1$; (b) $\sigma = 1,5$.

2.2.5 Processo de Ornstein-Uhlenbeck

Um Modelo muito conhecido em Econometria, utilizado frequentemente para modelar a curva de juros, é o *Modelo de Vasicek*. Ele considera uma característica de a Curva de Juros no longo prazo retornar a um valor médio. O Modelo de Vasicek é também conhecido como Processo de *Ornstein-Uhlenbeck*.

Seja X um processo estocástico, então diz-se que X é um *Processo de Ornstein-*

Uhlenbeck se X satisfaz a seguinte equação diferencial estocástica:

$$\begin{cases} dX(t) = \theta(\mu - X(t))dt + \sigma(t)dW(t) \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (2.21)$$

em que X_0 é o valor inicial, θ é o *speed of mean reversion*, μ é o *long-running mean* e σ é a volatilidade.

De fato, tal modelo considera uma reversão à média, como pode ser verificado resolvendo-se a equação diferencial ordinária referente ao processo:

$$\begin{cases} \frac{dE[X(t)]}{dt} = \theta(\mu - E[X(t)]) \\ X(0) = X_0 \end{cases}$$

por separação de variáveis,

$$E[X(t)] = \mu - (\mu - X_0)e^{-\theta t} \quad (2.22)$$

Isso significa que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E[X(t)] = \mu$$

que é a média histórica do processo. Assim, no longo prazo o modelo recupera o retorno à média do processo X .

2.2.5.1 Simulações

O Processo de Ornstein-Uhlenbeck é aproveitado aqui para se analisar a sensibilidade do processo frente a variações na volatilidade $\sigma(t)$, quando esta é constante. A figura 13 mostra o resultado da realização de três processos, que diferem entre si pelo valor da volatilidade. A primeira simulação mostra a realização dos processos, cujas volatilidades são dadas por $\sigma_1 = 0$; isto é, um processo determinístico; $\sigma_2 = 0,1$; um processo com uma volatilidade pequena; e $\sigma_3 = 0,3$; um processo com uma volatilidade maior. Perceba-se que quanto menor a volatilidade, mais próxima a trajetória estocástica tende a estar de uma trajetória determinística. A segunda simulação também aborda este ponto, ao considerar três processos com volatilidades $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 0,01$ e $\sigma_3 = 0,1$. Percebendo-se isso, é possível induzir a modelagem de fenômenos, sempre com uma parte aleatória, que pode ser tão pequena quanto se queira. Isso é usado nas próximas seções.

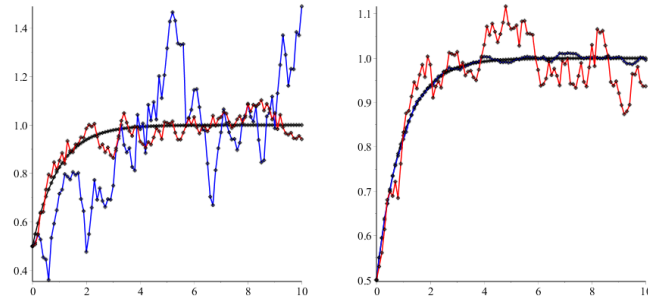


Figura 13: Processo de Ornstein-Uhlenbeck com $X_0 = 0,5$, $\mu = 1$ e $\theta = 1$. (a) com $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 0,1$ e $\sigma_3 = 0,3$; (b) com $\sigma_1 = 0$, $\sigma_2 = 0,01$ e $\sigma_3 = 0,1$.

A figura 14 aborda o mesmo ponto, quando se compara um processo estocástico, cuja realização é dada apenas por um fenômeno aleatório, isto é, $\mu(X, t) = 0$ e $\sigma = 0,5$; com uma solução estacionária determinística.

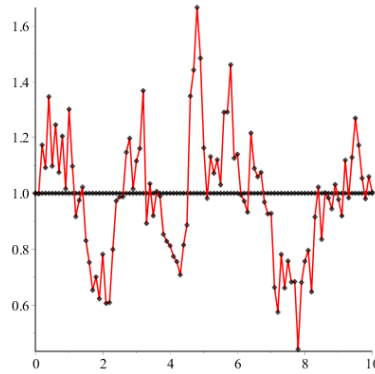


Figura 14: Processo de Ornstein-Uhlenbeck com $X_0 = 1$, $\mu = 1$ e $\theta = 0$ e $\sigma = 0,5$ comparado com uma trajetória estacionária $X_0 = 1$.

2.2.6 Processo CIR - Cox, Ingersoll e Ross

Segundo [1], um dos problemas do *Processo de Ornstein-Uhlenbeck* é que as taxas de juros nominais podem se tornar negativas. Outro problema é que a volatilidade da taxa de juros é constante, diferentemente dos dados reais. Assim, um modelo que procura corrigir o problema da volatilidade e das taxas negativas, mantendo a tendência de reversão à média, é o modelo desenvolvido em 1985 por Cox, Ingersoll e Ross.

Seja X um processo estocástico, então diz-se que X é um Processo CIR - Cox, Ingersoll, and Ross se X satisfaz a seguinte equação diferencial estocástica:

$$\begin{cases} dX(t) = \kappa(\theta - X(t))dt + \sigma\sqrt{X(t)}dW(t) \\ X(0) = X_0 \end{cases} \quad (2.23)$$

em que X_0 é o valor inicial, κ é o *speed of mean reversion*, θ é o *long-running mean* e σ é a volatilidade.

Aproveita-se o Processo CIR para abordar um novo ponto interessante em simulações estocásticas, estimação de parâmetros estatísticos, via Simulações Monte Carlo. Um esboço do que pode ser feito é ilustrado nesta seção. A figura 15 mostra três simulações do processo, nas quais se podem gerar inúmeras trajetórias, permitindo induzir o valor esperado, a variância e um intervalo de confiança para a média, por exemplo. Perceba-se que na primeira simulação, a simulação (a), apenas uma trajetória foi simulada; em (b), três trajetórias foram realizadas; enquanto que em (c), 10 trajetórias foram simuladas. Assim, é possível ver graficamente onde mais provavelmente está o valor que X assume para um instante de tempo t .

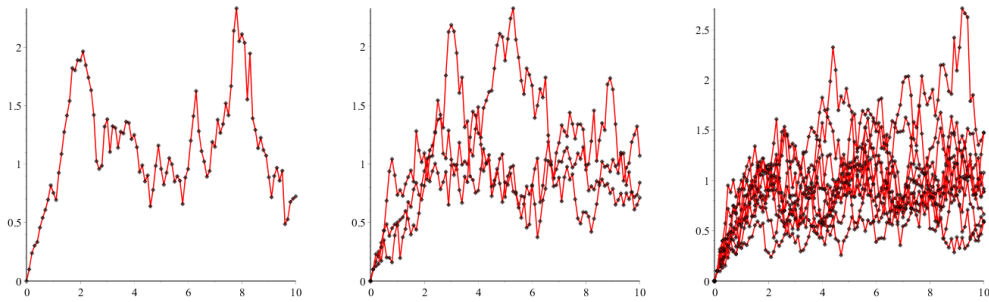


Figura 15: Processo CIR com $X_0 = 0$, $\kappa = 1$, $\theta = 1$ e $\sigma = 0,5$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 10 trajetórias geradas.

Por outro lado, apenas interpretando melhor este processo, é possível ver na figura 16, a resposta à alteração do parâmetro θ na simulação. Perceba-se que alterando o valor de θ de 2 para 1, a média histórica da trajetória foi reduzida.

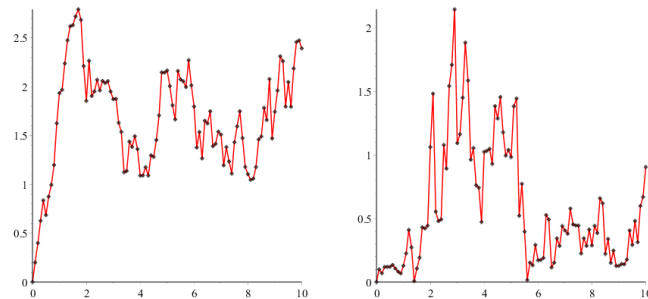


Figura 16: Processo CIR com $X_0 = 0$, $\kappa = 1$ e $\sigma = 1$. (a) com $\theta = 2$; (b) com $\theta = 1$.

A resposta à alteração de θ pode ser vista melhor, simulando-se várias trajetórias, como verificado na figura 17. Perceba-se que a média histórica foi reduzida, reduzindo-se

o valor de θ .

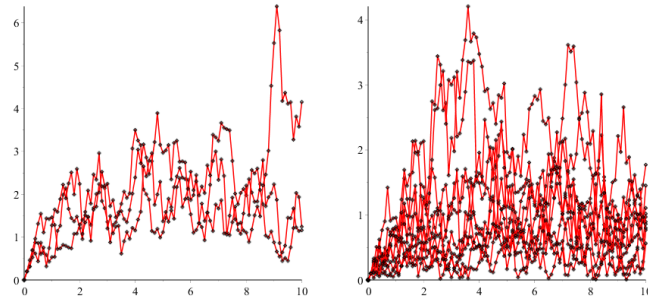


Figura 17: Processo CIR com $X_0 = 0$, $\kappa = 1$ e $\sigma = 1$. (a) com $\theta = 2$ e 3 trajetórias geradas; (b) com $\theta = 1$ e 10 trajetórias geradas.

2.2.7 Aplicação em Engenharia Química

Como aplicação dos processos estocásticos vistos no Maple, em especial o Processo de Itô, um exemplo de aplicação em Engenharia Química será estudado: um exemplo de DBO, demanda bioquímica de oxigênio, reportado em [4]. A demanda bioquímica de oxigênio é a quantidade de oxigênio consumida na degradação da matéria orgânica no meio aquático por processos biológicos, sendo expresso em miligramas por litro.

Para isso, seja t uma pseudo-variável para a distância percorrida em um córrego, isso é feito, considerando-se a velocidade de escoamento constante. A DOB B_t , mg/L, satisfaz a seguinte equação diferencial ordinária: [4]

$$\frac{dB}{dt} = -K_1 B + s_1 \quad (2.24)$$

em que K_1 é a velocidade específica de reação, em dia^{-1} , s_1 , mg/L, é o termo independente de produção ou consumo ao longo do córrego.

A modelagem estocástica de demanda bioquímica é dada, considerando-se uma aleatoriedade na velocidade específica de reação K_1 , sendo considerada normalmente distribuída com média $\bar{K}_1$ e variância $\sigma^2 \bar{K}_1^2$. Assim, a equação diferencial estocástica de BOD, na interpretação de uma SDE de Stratonovitz, é dada pela equação:

$$dB_t = (s_1 - B_t \bar{K}_1)dt - \sigma B_t \bar{K}_1 dW_t \quad (2.25)$$

em que W_t é um processo de Wiener. Por outro, a simulação deste problema usará a equação estocástica na forma de Itô que é dada por:

$$dB_t = \left(s_1 - B_t \bar{K}_1 + \frac{1}{2} \sigma^2 \bar{K}_1^2 B_t \right) dt - \sigma B_t \bar{K}_1 dW_t \quad (2.26)$$

A simulação aplicando o software Maple pode então ser feita, empregando-se o comando referente ao Processo de Itô, considerando-se as seguintes adequações:

$$\begin{cases} X(t) = B_t \\ \mu(X(t), t) = s_1 - B_t \bar{K}_1 + \frac{1}{2} \sigma^2 \bar{K}_1^2 B_t \\ \sigma(X(t), t) = -\sigma B_t \bar{K}_1 \end{cases} \quad (2.27)$$

2.2.7.1 Resultados

A análise do modelo via variação de parâmetros e condições iniciais segue os seguintes passos. Primeiramente, analisa-se o estado estacionário da parte determinística da SDE, de modo que:

$$\begin{aligned} s_1 - B_t \bar{K}_1 + \frac{1}{2} \sigma^2 \bar{K}_1^2 B_t &= 0 \implies \\ B_t^s &= \frac{s_1}{\bar{K}_1 - \frac{1}{2} \sigma^2 \bar{K}_1^2} \end{aligned} \quad (2.28)$$

é o ponto de equilíbrio da parte determinística do modelo. Se a condição inicial $B_t(0)$ for igual a B_t^s , a evolução de uma trajetória do modelo será dada, para o instante $t = 0$, apenas pelo termo aleatório da SDE. Porém, à medida que o termo aleatório altera o valor de B_t , a parte determinística se torna diferente de 0, o que faz com que a evolução da trajetória seja dada novamente pelos termos determinístico e estocástico. Tal análise é fundamental, pois mostra uma diferença importante entre as evoluções de trajetórias para uma EDO e para uma EDE. Além disso, analisando que o ponto de equilíbrio B_t^s é estável, o que fisicamente corresponde ao alcance de um equilíbrio de demanda bioquímica de oxigênio, espera-se que a evolução de uma trajetória da EDE não vá se distanciar tanto de B_t^s no infinito.

A figura 18 mostra o resultado de três simulações, nas quais se considerou o valor de $B_t(0) \approx B_t^s$. Embora não seja fácil perceber, mas cabe ressaltar novamente que a evolução de B_t é dada preponderantemente pela parte aleatória inicialmente, mas depois se torna dependente também da parte determinística. A terceira simulação, simulação (c), foi realizada em uma janela maior de tempo, para mostrar que as trajetórias da EDE permanecem próximas de B_t^s .

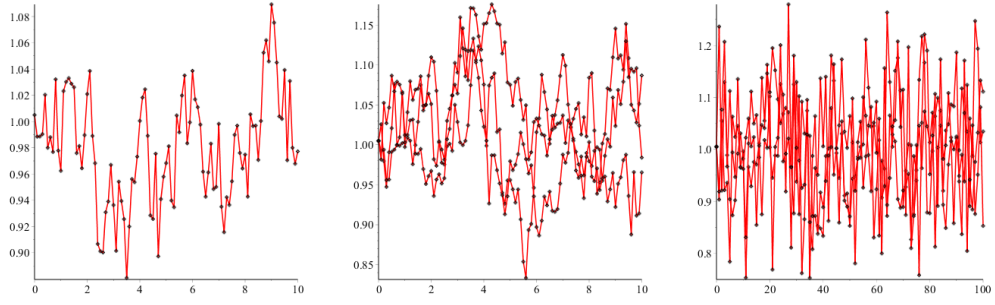


Figura 18: Problema da DBO com $B_t(0) = 1,005$, $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 1$ e $\sigma = 0,1$. (a) com 1 trajetória gerada; (b) com 3 trajetórias geradas; (c) com 3 trajetórias geradas até $t = 100$.

Além disso, a solução pode apresentar caráter estocástico ou não conforme se escolhem os valores dos parâmetros. Por exemplo, escolhendo $\sigma = 0$ ou $\bar{K}_1 = 0$, a trajetória não apresentará caráter estocástico, sendo portanto determinada pela parte não aleatória da SDE.

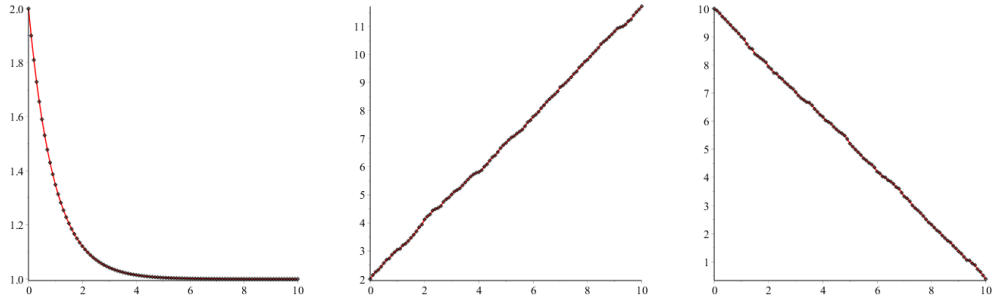


Figura 19: Problema da DBO. (a) $B_t(0) = 2$, $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 1$ e $\sigma = 0$; (b) $B_t(0) = 2$, $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 0$ e $\sigma = 0,1$; (c) $B_t(0) = 10$, $s_1 = -1$, $\bar{K}_1 = 0$ e $\sigma = 0,1$.

A figura 19 mostra o resultado de três simulações nas quais, verifica-se a ausência de termo estocástico no resultado da trajetória. Isso acontece, porque em (a), a volatilidade $\sigma = 0$, caracterizando um decaimento exponencial de DBO; já em (b) e em (c), isso acontece porque a velocidade específica de reação era nula, sendo, portanto, a DBO linearmente crescente para o termo fonte $s_1 > 0$ e linearmente decrescente para o termo de consumo $s_1 < 0$.

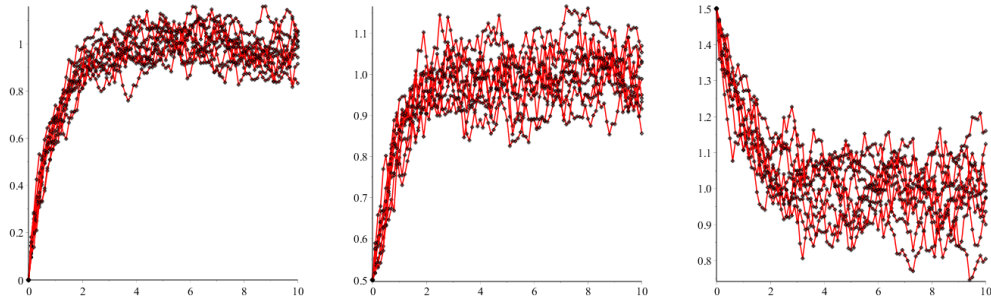


Figura 20: Problema da DBO: $s_1 = 1$, $\bar{K}_1 = 1$ e $\sigma = 0.1$ com 10 trajetórias realizadas. (a) $B_t(0) = 0$; (b) $B_t(0) = 0,5$; (c) $B_t(0) = 1,5$.

A figura 20 mostra o resultado de três simulações nas quais se alterou o valor da condição inicial $B_t(0)$, replicando 10 realizações do processo. Note que em todas elas, o valor esperado para $t = 10$ se aproxima de 1. Realizando 10^4 trajetórias, o software forneceu um valor esperado para $t = 10$ de 1.0046 ± 0.0007 , para o caso (a); um valor esperado de 1.0043 ± 0.0007 , para o caso (b); e de 1.0054 ± 0.0007 , para o caso (c). Esses resultados, obtidos das simulações permitem verificar com uma dada probabilidade se o valor de DBO para um instante de tempo, por exemplo $t = 10$, ultrapassa um valor limite crítico. Por fim, tal abordagem é muito importante e utilizada em inúmeras simulações estocásticas.

2.3 Conclusões

Obtém-se com o auxílio do Maple um bom conhecimento aplicado sobre processos estocásticos e equações diferenciais estocásticas, que são construídas a partir de equações diferenciais ordinárias. Várias simulações de modelos foram feitas, utilizando o software, com a estratégia de perceber a sensibilidade do termo aleatório nos modelos, além de fazer algumas aplicações úteis no Mercado Financeiro e em Engenharia Química com o modelo da DBO. Também, uma formalização matemática de alguns princípios que fundamentam a área em estudo foi apresentada, grande parte retirada de [3].

Nos próximos capítulos serão analisados modelos para a dispersão axial estocástica, implementando um código em MATLAB e analisando os resultados das simulações. Para isso, emprega-se o método de Crank-Nicolson estocástico de discretização de equações diferenciais e o método de Thomas para resolução de sistemas lineares tri-diagonais. Ao final, os modelos são comparados e recomendações de trabalhos futuros são feitas.

PARTE II

DISPERSÃO AXIAL

3 MODELAGEM

Neste capítulo são apresentadas as hipóteses de desenvolvimento dos modelos de dispersão axial em estudo.

3.1 Hipóteses

O Modelo de Dispersão Axial sem reação é aplicado a reatores tubulares para descrever a concentração de um traçador, uma espécie que não reage no meio. Primeiramente, assume-se como hipótese primária, um meio fluido contínuo, no qual se considera uma geometria cilíndrica. Assume-se que apenas a coordenada axial da geometria interfere nas variáveis de interesse, sem efeitos radiais, e que a velocidade v é uniforme ao longo da coordenada axial. A coordenada axial deve representar o comprimento do reator tubular. Assim, a concentração do traçador é afetada por um termo convectivo e um termo de dispersão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (3.1)$$

em que $v \frac{\partial C}{\partial z}$ é um termo convectivo, $D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$ é um termo de dispersão, v é a velocidade do fluido e D é um parâmetro de dispersão axial.

A presente modelagem analisa o efeito dos dois parâmetros do modelo: v e D , se cada um, em separado, for considerado parâmetro estocástico, com uma componente média: $\bar{v}$ ou $\bar{D}$; e uma componente flutuante: v' ou D' .

3.1.1 Modelo v'

O modelo v' considera uma flutuação na velocidade axial do fluido. Assim, propõe-se um modelo aditivo para a velocidade, de modo que ela possa ser considerada como a soma entre uma componente média $\bar{v}$ e uma componente estocástica v' . Assim,

$$v = \bar{v} + v' \quad (3.2)$$

de modo que

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \bar{v} \frac{\partial C}{\partial z} - v' \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.3)$$

3.1.2 Modelo D'

O modelo D' , desenvolvido em [5], por sua vez, considera uma flutuação no parâmetro de dispersão axial. Assumindo um modelo aditivo,

$$D = \bar{D} + D' \quad (3.4)$$

obtém-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (\bar{D} + D') \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3.5)$$

3.2 Adimensionalização

Para a obtenção dos modelos a serem simulados, serão empregadas as variáveis adimensionalizadas:

$$x = \frac{z}{L} \quad (3.6)$$

em que L é o comprimento do reator.

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}} = \frac{t\bar{v}}{L} \quad (3.7)$$

em que $\bar{t}$ é o tempo médio de residência no reator. E a concentração adimensionalizada

$$y = \frac{C - C_0}{C_\infty - C_0} \quad (3.8)$$

em que C_0 é a concentração inicial ao longo do reator, antes da perturbação degrau na entrada, e C_∞ é a concentração em estado estacionário.

Definindo-se o número de Peclet Pe , que será empregado nas adimensionalizações, como [5]

$$Pe := \frac{\bar{v}L}{D} = \frac{\text{taxa de transporte por convecção}}{\text{taxa de transporte por dispersão axial}} \quad (3.9)$$

Adimensionalizam-se os modelos:

3.2.1 Modelo v'

Utilizando-se as variáveis adimensionalizadas e a definição do número de Peclet, obtém-se:

$$\frac{\partial y}{\partial \theta} = \left(\frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x} \right) - \frac{\partial y}{\partial x} \frac{v'}{\bar{v}} \quad (3.10)$$

em que $\frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x}$ é chamada parte determinística do modelo e $\frac{\partial y}{\partial x} \frac{v'}{\bar{v}}$ é chamada parte estocástica do modelo. A simulação considera $\frac{v'}{\bar{v}}$ como um processo de Wiener. Assim, chamando $\frac{v'}{\bar{v}} = \sigma \dot{W}(\theta)$, em que σ corresponde a um parâmetro de "relevância estocástica", o equivalente em Econometria a uma volatilidade: se $\sigma = 0$, não existe estocasticidade no modelo e quanto maior for o valor de σ , maior será o fenômeno aleatório. Rearranjando-se a última expressão, obtém-se a equação diferencial parcial estocástica:

$$\frac{\partial y}{\partial \theta} - \frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{\partial y}{\partial x} + \sigma \frac{\partial y}{\partial x} \dot{W}(\theta) = 0 \quad (3.11)$$

ou, sob outra forma:

$$dy = \left(\frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x} \right) d\theta - \sigma \frac{\partial y}{\partial x} dW(\theta) \quad (3.12)$$

com as condições:

Condição inicial: [5]

$$y(x, \theta = 0) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } 0 < x \leq 1 \end{cases} \quad (3.13)$$

Condições de contorno: [5]

$$y(0^-) = y(0^+) - \frac{1}{\bar{P}e^+} \frac{dy(0^+)}{dx} \quad (3.14)$$

$$\frac{dy(1^-)}{dx} = 0 \quad (3.15)$$

3.2.2 Modelo D'

Utilizando-se as variáveis adimensionalizadas e a definição do número de Peclet, obtém-se:

$$\frac{\partial y}{\partial \theta} = \left(\frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \frac{D'}{vL} \quad (3.16)$$

em que $\frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x}$ é chamada parte determinística do modelo e $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \frac{D'}{vL}$ é chamada parte estocástica do modelo. Por outro lado, a parte estocástica será considerada como $\sigma \sqrt{y} \dot{W}(\theta)$

[5]. Assim,

$$\frac{\partial y}{\partial \theta} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{\partial y}{\partial x} - \sigma \sqrt{y} \dot{W}(\theta) = 0 \quad (3.17)$$

ou, sob outra forma:

$$dy = \left(\frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x} \right) d\theta + \sigma \sqrt{y} dW(\theta) \quad (3.18)$$

com as condições:

Condição inicial: [5]

$$y(x, \theta = 0) = \begin{cases} 1, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } 0 < x \leq 1 \end{cases} \quad (3.19)$$

Condições de contorno: [5]

$$y(0^-) = y(0^+) - \frac{1}{Pe^+} \frac{dy(0^+)}{dx} \quad (3.20)$$

$$\frac{dy(1^-)}{dx} = 0 \quad (3.21)$$

é o modelo a ser simulado.

4 METODOLOGIA

A simulação dos modelos foi desenvolvida no software MATLAB, empregando-se o gerador de números aleatórios normalmente distribuídos do mesmo. Nele, desenvolveram-se o método de Crank-Nicolson estocástico e o método de Thomas para resolução de sistemas tri-diagonais lineares.

4.1 Método de Crank-Nicolson

Para resolução dos modelos apresentados anteriormente, será empregado o método de Crank-Nicolson estocástico, discutido no artigo de [7].

O artigo trata sobre as condições de estabilidade do método de Crank-Nicolson aplicado a uma EDP estocástica da forma:

$$u_t(x, t) + au_{xx}(x, t) + bu_x(x, t) + cu(x, t) + (du_x(x, t) + \gamma u(x, t))\dot{W}(t) = 0 \quad (4.1)$$

O método de Crank-Nicolson consiste-se em usar a média entre as fórmulas de diferenças finitas aplicadas nos pontos (x, t_j) e (x, t_{j+1}) . Assim, usam-se as seguintes fórmulas de discretização:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} \right) \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^j - u_i^j}{\Delta x} + \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1}}{\Delta x} \right) \quad (4.3)$$

$$u = \frac{u_i^j + u_i^{j+1}}{2} \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} \quad (4.5)$$

$$\dot{W}(t) = \frac{W^{j+1} - W^j}{\Delta t} \quad (4.6)$$

em que $\Delta W_j = W^{j+1} - W^j$ é um incremento browniano, satisfazendo as mesmas condições da Definição 4. Isto é, $\Delta W_j = \sqrt{\Delta t} \cdot N(0, 1)$.

Convém analisar que a fórmula de discretização $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^j - u_i^j}{\Delta x} + \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1}}{\Delta x} \right)$ é uma fórmula de primeira ordem em Δx , diferentemente da fórmula de discretização para $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. Uma abordagem comum em um problema de discretização como este se caracteriza pela substituição

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1}^j - u_{i-1}^j}{2\Delta x} + \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_{i-1}^{j+1}}{2\Delta x} \right) \quad (4.7)$$

de modo que o método seja de segunda ordem em Δx .

O artigo [7] enuncia e prova o seguinte teorema de estabilidade do método:

Teorema 3. (Estabilidade do Método de Crank-Nicolson) *O método de Crank-Nicolson aplicado a equação*

$$u_t(x, t) + au_{xx}(x, t) + bu_x(x, t) + cu(x, t) + (du_x(x, t) + \gamma u(x, t))\dot{W}(t) = 0$$

é estável em erro quadrático médio com relação à norma $|\cdot|_\infty$, norma do máximo, com: $(n+1)\Delta t = T$, $2R_1 + R_2 - R_3 \leq 0$ e $R_1 = a\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}$, $R_2 = b\frac{\Delta t}{2\Delta x}$, $R_3 = \frac{c\Delta t}{2}$.

A condição de estabilidade é empregada nas simulações. Escolhendo-se uma malha computacional $(n_x + 1) \times (n_t + 1)$, com os índices i ($1 \leq i \leq n_x + 1$) e j ($1 \leq j \leq n_t + 1$) sendo associados a x e t , respectivamente, o ponto $u(x_i, t_j)$ será denotado por u_i^j . Assim, as condições de contorno discretizadas são dadas por: [5]

$$\left[\frac{1}{Pe\Delta x} + 1 \right] u_1^j - \frac{1}{Pe\Delta x} u_2^j = 1 \quad (4.8)$$

$$- \frac{1}{\Delta x} u_{n_x}^j + \frac{1}{\Delta x} u_{n_x+1}^j = 0 \quad (4.9)$$

para $1 \leq j < n_t + 1$. E a condição inicial é dada por:

$$u_i^1 = 1, \text{ para } i = 1 \text{ e } u_i^1 = 0, \text{ para } i \neq 1. \quad (4.10)$$

4.1.1 Modelo v'

Aplicando o método ao modelo, obtém-se:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} - \frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} [u_{i+1}^j + u_{i+1}^{j+1} - 2(u_i^j + u_i^{j+1}) + u_{i-1}^j + u_{i-1}^{j+1}] \quad +$$

$$\frac{1}{2\Delta x} \left[u_{i+1}^j - u_i^j + u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1} \right] + \frac{\sigma}{2\Delta x \Delta t} \left[u_{i+1}^j - u_i^j + u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1} \right] \Delta W_j = 0$$

Desse modo, os pontos internos na malha satisfazem a seguinte equação rearranjada:

$$\begin{aligned} & u_{i-1}^{j+1} \left[-\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} \right] + u_i^{j+1} \left[\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{Pe(\Delta x)^2} - \frac{1}{2\Delta x} - \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right] + \\ & u_{i+1}^{j+1} \left[-\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{1}{2\Delta x} + \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right] = u_{i-1}^j \left[\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} \right] + \\ & u_i^j \left[\frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{Pe(\Delta x)^2} + \frac{1}{2\Delta x} + \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right] + u_{i+1}^j \left[\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} - \frac{1}{2\Delta x} - \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right] \end{aligned}$$

para $1 \leq i \leq n_x$ e $1 \leq j \leq n_t$.

Na forma matricial, constrói-se para cada $1 \leq j \leq n_t$ o sistema

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & b & c & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & b & c & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a & b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a & b & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & a_{n_x+1} & b_{n_x+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{j+1} \\ u_2^{j+1} \\ u_3^{j+1} \\ \vdots \\ u_{n_x-1}^{j+1} \\ u_{n_x}^{j+1} \\ u_{n_x+1}^{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ d_2^j \\ d_3^j \\ \vdots \\ d_{n_x-1}^j \\ d_{n_x}^j \\ d_{n_x+1}^j \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

em que

$$b_1 = \left[\frac{1}{Pe\Delta x} + 1 \right], \quad c_1 = -\frac{1}{Pe\Delta x}, \quad b = \left[\frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{Pe(\Delta x)^2} - \frac{1}{2\Delta x} - \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right],$$

$$c = \left[-\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{1}{2\Delta x} + \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right], \quad a = \left[-\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} \right],$$

$$d_i^j = u_{i-1}^j \left[\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} \right] + u_i^j \left[\frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{Pe(\Delta x)^2} + \frac{1}{2\Delta x} + \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right] + u_{i+1}^j \left[\frac{1}{2Pe(\Delta x)^2} - \frac{1}{2\Delta x} - \frac{\sigma \Delta W_j}{2\Delta x \Delta t} \right]$$

e cuja solução é dada pelo Método de Thomas. Se $u_i^{j+1} > 1$, emprega-se a seguinte condição [5]

$$u_i^{j+1} \leftarrow \min [1, u_i^{j+1}]$$

4.1.2 Modelo D'

Aplicando o método ao modelo, obtém-se:

$$\begin{aligned} & u_{i-1}^{j+1} \left[-\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right] + u_i^{j+1} \left[1 + \frac{\Delta t}{Pe(\Delta x)^2} \right] + \\ & u_{i+1}^{j+1} \left[-\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right] = u_{i-1}^j \left[\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right] + \\ & u_i^j \left[1 - \frac{\Delta t}{Pe(\Delta x)^2} \right] + u_{i+1}^j \left[\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right] + \sigma \sqrt{u_i^j} \Delta W_j \end{aligned}$$

para $1 \leq i \leq n_x$ e $1 \leq j \leq n_t$.

De modo análogo, para cada $1 \leq j \leq n_t$, constrói-se o sistema

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & b & c & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & b & c & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a & b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a & b & c \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & a_{n_x+1} & b_{n_x+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{j+1} \\ u_2^{j+1} \\ u_3^{j+1} \\ \vdots \\ u_{n_x-1}^{j+1} \\ u_{n_x}^{j+1} \\ u_{n_x+1}^{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ d_2^j \\ d_3^j \\ \vdots \\ d_{n_x-1}^j \\ d_{n_x}^j \\ d_{n_x+1}^j \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

em que

$$b_1 = \left[\frac{1}{Pe\Delta x} + 1 \right], \quad c_1 = -\frac{1}{Pe\Delta x}, \quad b = \left[1 + \frac{\Delta t}{Pe(\Delta x)^2} \right],$$

$$c = \left[-\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right], \quad a = \left[-\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right],$$

$d_i^j = u_{i-1}^j \left[\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right] + u_i^j \left[1 - \frac{\Delta t}{Pe(\Delta x)^2} \right] + u_{i+1}^j \left[\frac{\Delta t}{2Pe(\Delta x)^2} + \frac{\Delta t}{4\Delta x} \right] + \sigma \sqrt{u_i^j} \Delta W_j$ e cuja solução é dada pelo Método de Thomas. Se $u_i^{j+1} > 1$, emprega-se a seguinte condição [5]

$$u_i^{j+1} \leftarrow \min [1, u_i^{j+1}]$$

4.2 Algoritmo de Thomas

Nessa seção, é apresentado o método numérico para resolução dos sistemas obtidos com a discretização dos modelos. Para o sistema tri-diagonal

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-2} & b_{n-2} & c_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

Define-se, por conveniência, $a_1 = c_n = 0$ e definem-se as variáveis auxiliares:

$$c'_i = \begin{cases} \frac{c_i}{b_i}, & \text{se } i = 1 \\ \frac{c_i}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & \text{se } 2 \leq i \leq n-1 \end{cases} \quad (4.14)$$

e

$$d'_i = \begin{cases} \frac{d_i}{b_i}, & \text{se } i = 1 \\ \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & \text{se } 2 \leq i \leq n-1 \end{cases} \quad (4.15)$$

Então a solução do sistema tri-diagonal é dada por:

$$u_n = \begin{cases} d'_n \\ d'_i - c'_i u_{i+1}, & \text{se } n-1 \geq i \geq 1 \end{cases} \quad (4.16)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 Comparação entre os modelos

Primeiramente, observa-se que a parte determinística dos dois modelos são exatamente iguais à EDP para um traçador em dispersão axial. O que difere os dois modelos é apenas a forma como se adiciona uma parte aleatória em ambos. Assim, a primeira análise a ser feita é estudar o comportamento de uma solução no caso não-estocástico para assim poder inferir conclusões sobre o comportamento de cada modelo em separado.

5.1.1 Solução da equação não-estocástica

A solução da equação da dispersão axial não-estocástica

$$\frac{\partial y}{\partial \theta} - \frac{1}{\bar{P}e} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{\partial y}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

é simulada com as mesmas condições iniciais e de contorno dos modelos estudados.

A razão de se estudar tal EDP é analisar a tendência da concentração ao longo do reator e também ao longo do tempo. Dessa forma, será possível concluir para quais (x, θ) as partes determinísticas e estocásticas dos modelos terão contribuições não nulas e talvez inferir sobre a magnitude da contribuição de cada uma delas.

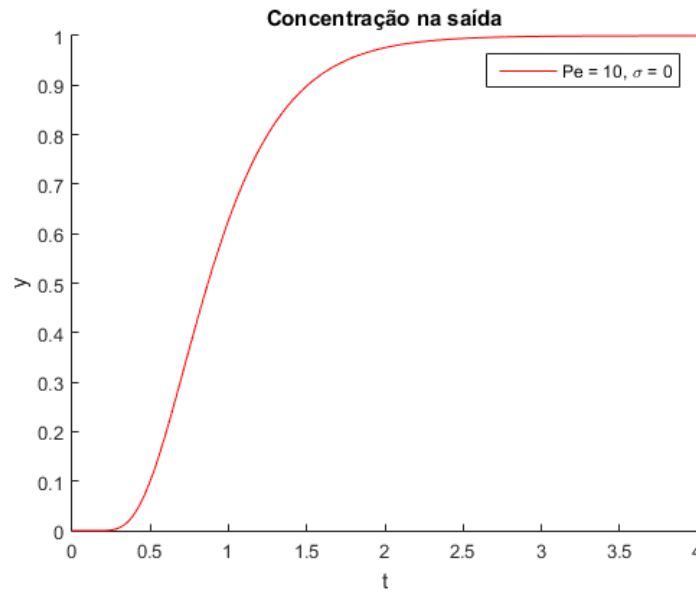


Figura 21: Concentração $y(t)$ para $x = 1$ da dispersão axial não-estocástica.

A figura 21 mostra a solução do problema, para a condição de saída do reator, quando o número de $Pe = 10$ e $\sigma = 0$. Perceba-se que no início a concentração é nula, aumenta e atinge o estado estacionário em $y = 1$. Assim, espera-se que para $\theta \approx 0$, as soluções dos dois modelos não tenham influência das partes estocásticas.

A figura 22, por sua vez, mostra curvas de concentração y em função de x , para tempos fixados. Perceba-se na figura 22 que, para tempos menores, as inclinações das curvas $y = y(x)$ são maiores que as das curvas para tempos maiores. Isso significa que $\frac{\partial y}{\partial x}\big|_{t_1} \geq \frac{\partial y}{\partial x}\big|_{t_2}$, se $t_1 < t_2$, ou seja, o gradiente de concentração diminui com o passar do tempo, de modo que no modelo v' a relevância estocástica também diminuirá ao longo do tempo.

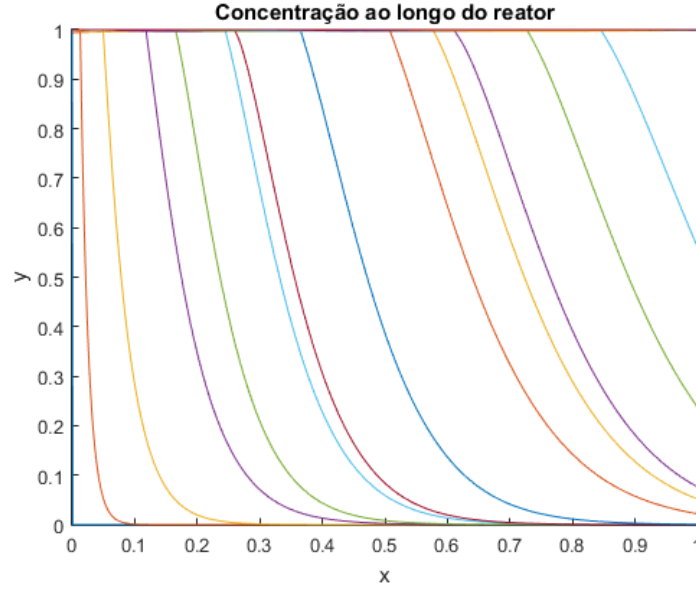


Figura 22: Perfis de concentração $y(x)$ para diferentes t 's. As linhas representam as concentrações y para um mesmo instante de tempo t . Simulação obtida para $Pe = 1000$, $n_x = 1000$ e $t_f = 1000$. Curvas à esquerda representam tempos menores que curvas à direita.

Ainda na figura 22, analisando as retas horizontais $y(x) = 1$, percebe-se que o gradiente $\frac{\partial y}{\partial x} = 0$, de modo que, para $t \rightarrow \infty$, o modelo v' será totalmente governado por sua parte determinística.

Por outro lado, como o modelo D' tem a sua parte estocástica dependente de $\sqrt{y}$, espera-se que para t pequeno, quando $y \approx 0$, a parte estocástica será aproximadamente nula e à medida que $y \rightarrow 1$, a parte estocástica será cada vez maior. Assim, nessa simulação, a concentração y muito provavelmente nunca atingirá um valor estacionário como no caso determinístico, pois o estado estacionário da parte determinística, dado por

$$\frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\partial y}{\partial x} = 0 \quad (5.2)$$

é dado para $y = 1$, quando a parte estocástica não está em estado estacionário, caso que ocorre somente em $\sqrt{y} = 0$.

O modelo v' , por sua vez, tem como estado estacionário da parte estocástica quando

$$\frac{\partial y}{\partial x} = 0 \quad (5.3)$$

ao passo que o estado estacionário da parte determinística é dado por:

$$\frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\partial y}{\partial x} \quad (5.4)$$

Assim, se a parte estocástica estiver em estado estacionário, a parte determinística também estará, pois

$$\frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\partial y}{\partial x} = 0$$

Dessa forma, o modelo v' pode não ser bom para representar flutuações mesmo em estado estacionário.

A seguir, são apresentados resultados de simulações dos modelos v' e D' .

5.1.2 Simulação do modelo v'

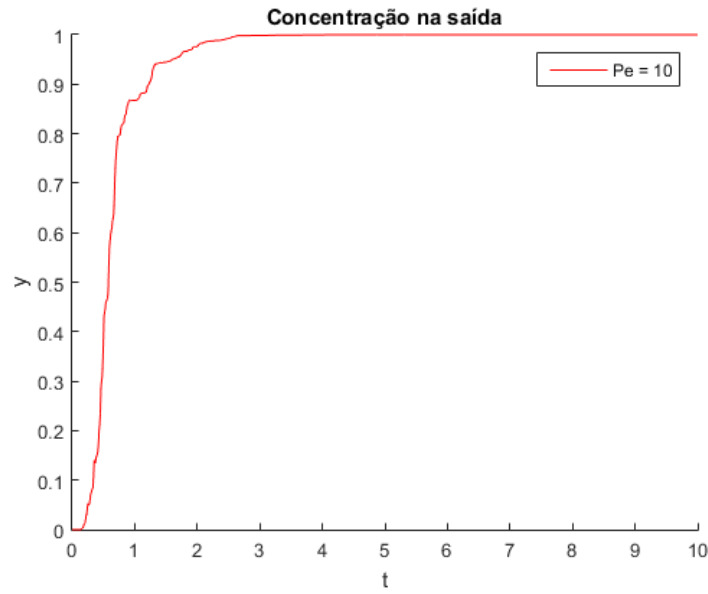


Figura 23: Perfil de concentração $y(t)$ na saída do reator, para uma simulação do modelo v' com $Pe = 10$, $\sigma = 0.5$.

5.1.3 Simulação do modelo D'

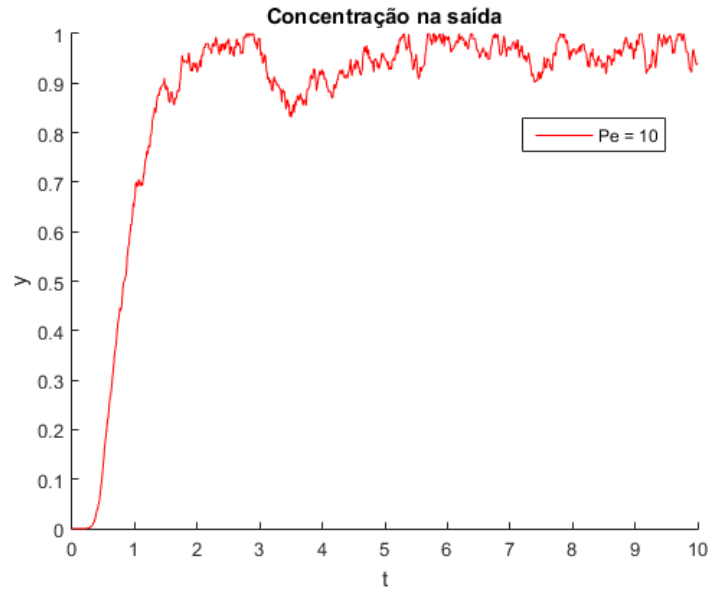


Figura 24: Perfil de concentração $y(t)$ na saída do reator, para uma simulação do modelo D' com $Pe = 10$, $\sigma = 0.1$.

A figura 24 mostra o resultado de uma simulação da dispersão axial via modelo D' , para uma escolha de $Pe = 10$ e $\sigma = 0.1$. Perceba-se o caráter *não-ergódico* do modelo, de modo que o perfil de concentração nunca ficará uniforme ao longo do reator, apresentando sempre uma aleatoriedade.

5.2 Análise de sensibilidade

Nesta seção serão abordados resultados e discussões sobre análise de sensibilidade frente aos dois parâmetros dos modelos: o número de Peclet e o termo de relevância estocástica σ .

5.2.1 Caso não-estocástico

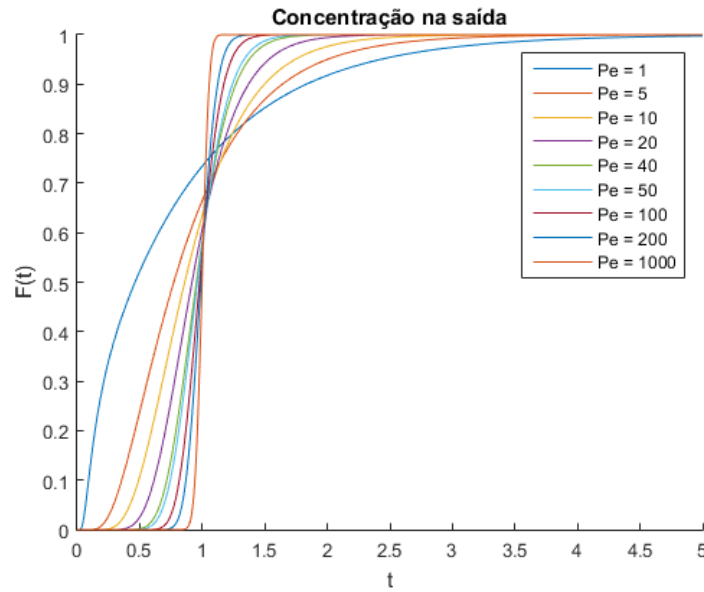


Figura 25: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores do número de Peclet no caso não-estocástico.

A figura 25 mostra a variação dos perfis de concentração com o número de Peclet. Perceba-se que quanto maior o número de Peclet, mais próximo de um degrau unitário em $\theta = 1$ é o perfil de concentração. Por outro lado, quando menor o Peclet, mais parecida é a resposta à de um CSTR.

5.2.2 Modelo v'

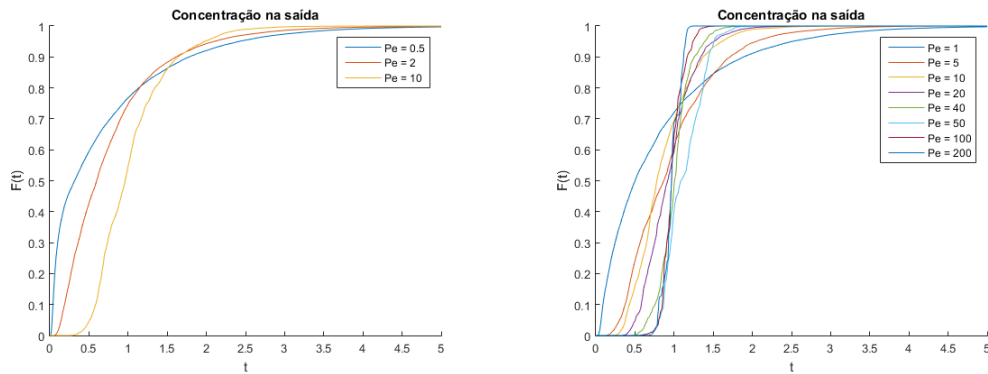


Figura 26: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de Pe com $\sigma = 0.1$.

A figura 26 mostra a variação dos perfis de concentração com o número de Peclet para o modelo v' . O comportamento com o número de Peclet para este modelo se assemelha ao comportamento do modelo não-estocástico, sendo que para Pe suficientemente pequeno a resposta se assemelha a de um CSTR.

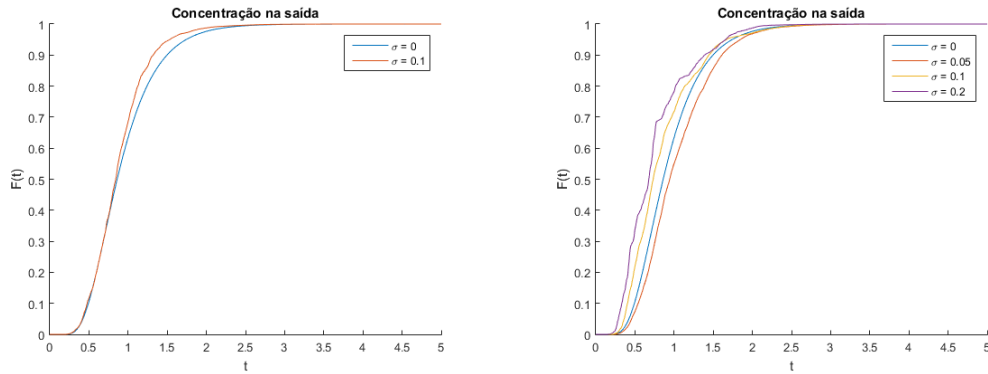


Figura 27: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de σ com $Pe = 10$.

Variações no σ para o modelo v' não implica em grandes desvios dos casos determinísticos, como se pode verificar na figura 27. Como complemento, simula-se o modelo para vários σ 's diferentes na figura 28.

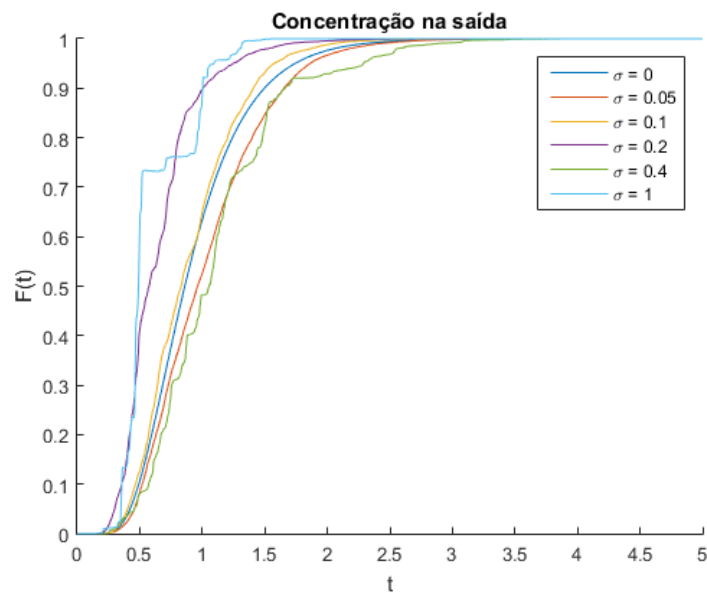


Figura 28: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de σ com $Pe = 10$.

5.2.3 Modelo D'

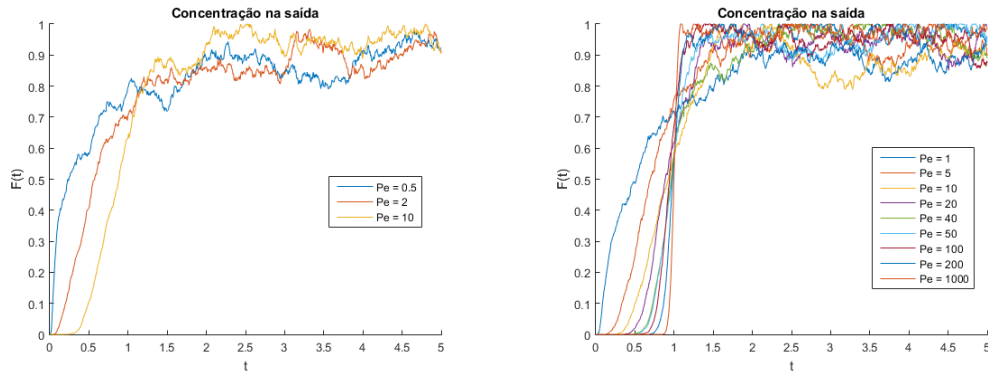


Figura 29: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de Pe com $\sigma = 0.1$.

O número de Peclet influencia apenas a parte determinística do modelo, pela figura 29, percebe-se que o número de Peclet apenas interfere na inclinação da curva $y = y(t)$, de modo que à medida que Pe cresce, a inclinação cresce.

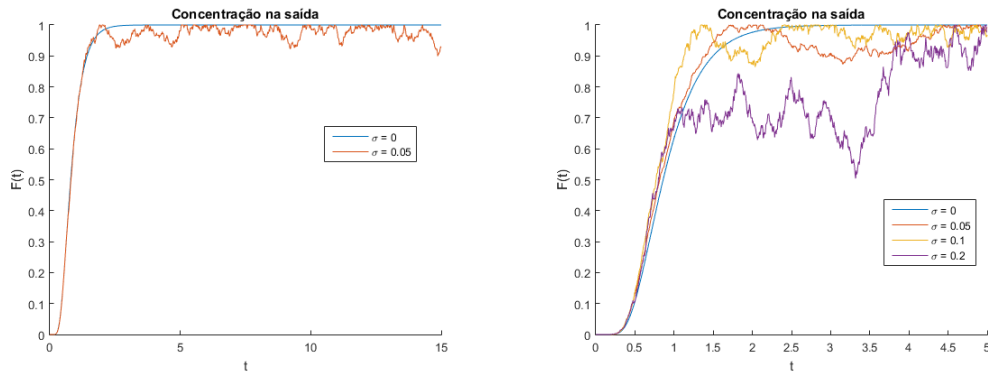


Figura 30: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para diferentes valores de σ com $Pe = 10$.

Já o σ interfere basicamente a parte estocástica do modelo, conforme pode ser verificado na figura 30.

5.3 Regiões de confiança

Nesta seção serão apresentadas, via análise gráfica, as regiões mais prováveis, nas quais um dado experimental pode estar. Tal análise se baseia em simular inúmeras vezes

os modelos estocásticos e plotar os resultados em uma mesma figura. A seguir, são apresentados resultados para 3 e 50 simulações dos modelos.

5.3.1 Modelo v'

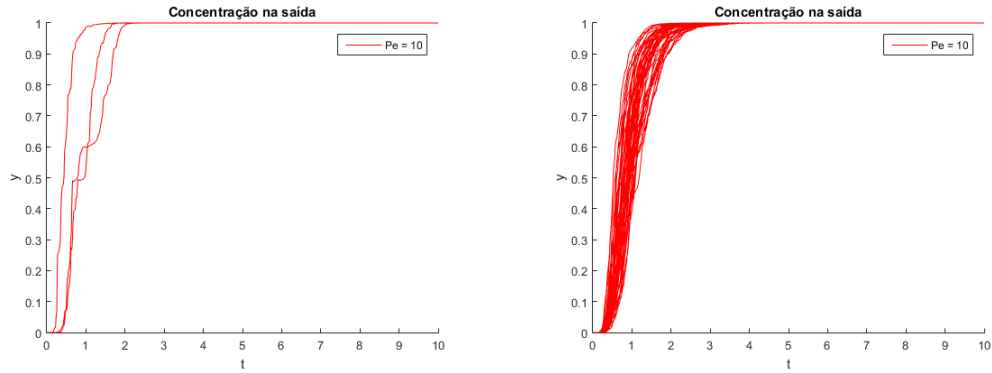


Figura 31: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para $Pe = 10$, $\sigma = 0.2$. (a) com 3 simulações; (b) com 50 simulações.

Desvios de $y = 1$, para θ suficientemente grande, não são capturados pelo modelo v' , ao passo que para o

5.3.2 Modelo D'

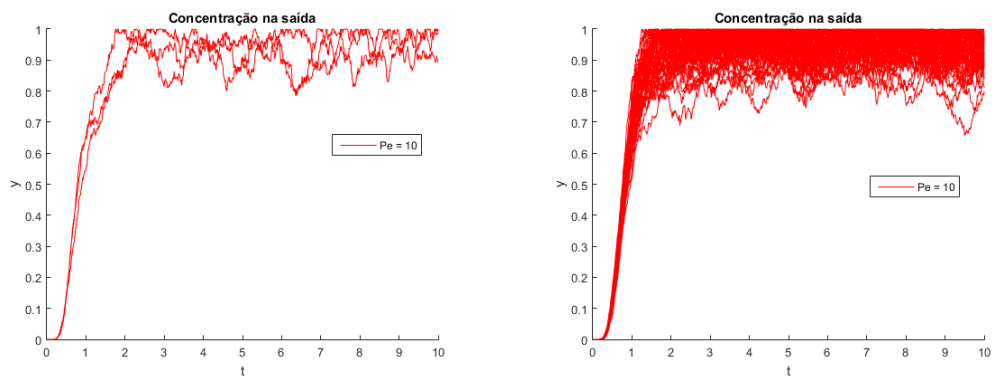


Figura 32: Perfis de concentração $y(t)$ na saída do reator, para $Pe = 10$, $\sigma = 0.1$. (a) com 3 simulações; (b) com 50 simulações.

esses desvios são capturados.

6 CONCLUSÃO

A seguir são listadas as principais conclusões do trabalho:

- A parte estocástica tanto do modelo D' quanto do modelo CIR de 1985 para as taxas de juros são iguais.
- O modelo D' , na sua forma adimensionalizada, pode ser obtido tanto por flutuações na velocidade quanto no parâmetro de dispersão axial, desde que se faça a hipótese adequada.
- O modelo D' representa melhor o fenômeno estocástico em estado estacionário.
- O modelo v' foi simulado sem aplicação de nenhuma hipótese sob a forma do gradiente $\frac{\partial y}{\partial x}$.
- A construção dos modelos poderiam ter sido feitas, sem assumir flutuação nos parâmetros, sendo o modelo estocástico dado pela parte determinística, cuja forma é conhecida como o modelo determinístico convencional, e uma parte estocástica, cujo parâmetro de volatilidade σ pode vir a ser estimado com dados experimentais.
- Incluir o fenômeno estocástico no parâmetro que já engloba, como de costume na literatura, as não idealidades do reator é uma passagem sutil que pode ser caracterizada como um ajuste fino para representação dos dados experimentais.
- Os resultados das simulações do modelo v' podem, em trabalhos futuros, ser confrontados com argumentos de turbulência.

REFERÊNCIAS

- [1] J. S. F. Barbachan, J. R. H. Ornelas, Apreçamento de Opções de IDI Usando o Modelo CIR. *Est. econ.*, São Paulo, 33(2): 287-323, abr-jun 2003.
- [2] Bonotto, E. M. A equação de Black-Scholes com ação impulsiva. USP-São Carlos. Maio/2008. Tese (Doutoramento em Ciências-Matemática), Instituto de Ciências Matemáticas, Universidade de São Paulo.
- [3] Evans, L. C. An introduction to stochastic differential equations. Department of Mathematics, UC Berkeley.
- [4] J. G. M. Schoenmakers, A. W. Heemink, K. Ponnambalam, P. E. Kloeden. Variance reduction for Monte Carlo simulation of stochastic environmental models. *Applied Mathematical Modelling* 26 (2002) 785-795.
- [5] Nakama, C. S. M., Siqueira, A. F., Jr., A. S. V., 2017. Stochastic axial dispersion model for tubular equipment. *Chem. Eng. Sci.* 171, 131-138.
- [6] Danckwerts, P., 1953. Continuous flow systems. *Chem. Eng. Sci.* 2(1), 1-13.
- [7] Kamrani, M., Hosseini, S.M., 2010. The role of coefficients of a general SPDE on the stability and convergence of a finite difference method. *J. Comput. Appl. Math.* 234 (2010) 1426-1434.
- [8] Kroese, D. P., Rubinstein, R. Y. Monte Carlo methods. *WIREs Comp Stat* 2012, 4:48–58. doi: 10.1002/wics.194.
- [9] Ferrari, P. A., Galves, A. Acoplamento em Processos Estocásticos e Aplicações, XXI Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, 1997.
- [10] Gardiner, C. W. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. 2. ed. [S.I.]: Springer, 1997.
- [11] Gaines, J. G. Numerical Experiments with SPDE's. In: *London Mathematical Society Lecture Note Series*. [S.I.]: Cambridge University Press, 1995. p. 55-71.
- [12] Jr, A. S. V., Nichele, J. Modeling an annular flow tubular reactor. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 65, n. 14, p. 4261-4270, 2010.
- [13] Bolfarine, H., Sandoval, M. C. *Introdução à Inferência Estatística*. 2. ed. SBM, 2010.

ANEXO A – MÉTODO DE MONTE CARLO

O procedimento desenvolvido para determinação das regiões de confiança na parte de resultados é uma forma simplificada dos métodos clássicos de simulação Monte Carlo, nos quais se geram inúmeras variáveis aleatórias identicamente distribuídas e independentes, obtendo-se um valor médio a partir dos dados simulados e um intervalo de confiança para a média da variável $y(t)$.

Sejam $Y_1(t)$, $Y_2(t)$, ..., $Y_n(t)$ variáveis aleatórias, independentes e identicamente distribuídas, com média y_t e variância σ_t^2 , oriundas de n simulações para $y(t)$. Para cada tempo t o valor médio esperado das simulações é definido como:

$$\bar{Y}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i(t) \quad (\text{A.1})$$

e a variância amostral como:

$$S(t)^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (Y_i(t) - \bar{Y}(t))^2 \quad (\text{A.2})$$

Pelo Teorema Central do Limite, $\bar{Y} \sim \mathbf{N}\left(y_t, \frac{\sigma_t^2}{n}\right)$, para $n \rightarrow \infty$, de modo que é possível construir intervalos de confiança para y_t [13]:

- Em caso de a variância σ_t^2 não ser conhecida, o intervalo de confiança para y_t a um nível de confiança $1 - \alpha$ é:

$$\text{IC}(y_t; \alpha) = \left[\bar{Y}(t) - t_{\alpha/2} \frac{S(t)}{\sqrt{n}}, \bar{Y}(t) + t_{\alpha/2} \frac{S(t)}{\sqrt{n}} \right] \quad (\text{A.3})$$

em que $t_{\alpha/2}$ é tal que $P[T \leq t_{\alpha/2}] = 1 - \alpha/2$, com $T \sim t_{n-1}$ é a distribuição t-*Student* com $n - 1$ graus de liberdade.

- Em caso de a variância σ_t^2 ser conhecida, o intervalo de confiança para y_t a um nível de confiança $1 - \alpha$ é:

$$\text{IC}(y_t; \alpha) = \left[\bar{Y}(t) - z_{\alpha/2} \frac{\sigma_t}{\sqrt{n}}, \bar{Y}(t) + z_{\alpha/2} \frac{\sigma_t}{\sqrt{n}} \right] \quad (\text{A.4})$$

em que $z_{\alpha/2}$ é tal que $P[Z \leq z_{\alpha/2}] = 1 - \alpha/2$, $Z \sim \mathbf{N}(0, 1)$.

Em ambos os casos, a probabilidade de $y_t \in \text{IC}(y_t; \alpha)$ é de $1 - \alpha$. O algoritmo de Monte Carlo pode ser enunciado do seguinte modo [8]:

Algoritmo 1. (Algoritmo de Monte Carlo)

- Gerar $Y_1(t), Y_2(t), \dots, Y_n(t)$ identicamente distribuídas e independentes com média y_t e variância σ_t^2 .
- Calcular o valor médio $\bar{Y}(t)$ e o intervalo de confiança $\text{IC}(y_t; \alpha)$.