

# Investigações Multi-Escala para Escoamentos Multifásicos Dispersos Reativos

João Vinícius Hennings de Lara

Junho 2025

## Resumo

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum. Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Objetivos . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Fundamentação Teórica</b>	<b>3</b>
2.1	Combustão Turbulenta de Sprays . . . . .	3
2.1.1	Modelagem da Fase Contínua . . . . .	4
2.1.2	Modelagem Química . . . . .	6
2.1.3	Modelagem Da Fase Discreta . . . . .	7
2.2	Modelos de Evaporação e Condensação (MEC) . . . . .	8
2.2.1	Modelos com Interior de Gota Homogêneo . . . . .	9
2.2.2	Modelos para o Interior da Gota . . . . .	11
2.3	Modelos de Combustão Homogênea de Gota Isolada (MCGI) . . . . .	11
2.3.1	Modelos de Modo de Combustão de Gotas . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Materiais e Métodos</b>	<b>14</b>
<b>4</b>	<b>Plano de Trabalho e Cronograma de Execução</b>	<b>17</b>
<b>5</b>	<b>Forma de Análise dos Resultados</b>	<b>19</b>
	<b>Referências</b>	<b>III</b>

# 1 Introdução

A demanda pela transição energética e pela descarbonização da economia busca alternativas para substituição dos combustíveis fósseis nos setores de energia, transporte, indústria. Alguns setores, como o energético e o de transportes urbano de baixa carga, têm mostrado grande progresso no uso de energias renováveis e na eletrificação, respectivamente [18]. Porém, combustíveis fósseis são extremamente difíceis de substituir em outros setores, especialmente os combustíveis líquidos. São estes os que possuem maior energia específica e densidade energética [4,14], logo mais adequados para aplicações de transporte, como no setor automotivo de cargas pesadas, naval e aeronáutico [18]. Além do setor de transporte, combustíveis líquidos são importantes para algumas indústrias como aço e cimento, para algumas termoelétricas e até para máquinas de pequeno porte, portáteis, movidas a motor de combustão interna (MCI). Por fim, uma análise histórica indica que a transição para fontes renováveis se dará ao longo de décadas [18].

Nota-se que processos de combustão continuarão relevantes nas próximas décadas. Em especial, todas as aplicações mencionadas baseiam-se na combustão turbulenta de sprays líquidos. Assim, soluções devem ser procuradas para conciliar essa tecnologia com os esforços de transição energética e descarbonização da economia. A comunidade científica busca, então, três caminhos: **(i)** novos combustíveis; **(ii)** novas origens para os mesmos combustíveis; **(iii)** melhorar a eficiência dos motores a combustão e reduzir a formação de poluentes.

Independente da origem do combustível, o processo de combustão deve ser compreendido para que motores e queimadores eficientes e com baixa emissão de poluentes sejam desenvolvidos. Para tanto é necessário pesquisa em combustão, que pode ser estruturada em trabalhos experimentais ou trabalhos de modelagem. A modelagem da combustão turbulenta de sprays, foco desse trabalho, deve ser capaz de representar diferentes combustíveis líquidos, incluindo combustíveis oriundos das demandas (i) e (ii). Deve também representar os diferentes fenômenos envolvidos nesse processo, como ignição e formação de poluentes, para atender a demanda (iii). No âmbito da combustão turbulenta de sprays, é de extrema importância o modelo de trans-

ferência de calor e massa da gota (líquida) para a fase gasosa, ou seja, o modelo de evaporação e condensação das gotas do spray. É conhecido que essa modelagem tem enorme influência na chama [13], influenciando a sua estrutura, temperatura, geometria e, por consequência, formação de poluentes também.

Nesse sentido, revisando a literatura mais recente, nota-se a necessidade de maior desenvolvimento desses modelos de evaporação e condensação (MEC) para representar corretamente diferentes combustíveis. Por exemplo, modelos monocomponentes com equilíbrio termodinâmico não são capazes de representar todos os fenômenos associados, por exemplo, à combustão de etanol. Em especial, nota-se uma demanda pela aplicação de modelos complexos, desenvolvidos e testados na escala de uma única gota, em simulações de combustão de larga escala. Para representar combustíveis como o etanol, anidro ou hidratado, é necessário uma modelar a gota de forma **multicomponente**, considerando **termodinâmica de mistura não-ideal** e os efeitos de transferência de calor e massa no **interior da gota**.

No modelo descrito acima, a reação química é resolvida separadamente do modelo da gota. Isso corresponde a uma chama longe e não presa a gota, em que a chama é alimentada pelo vapor de combustível oriundo de várias gotas evaporando. Em contraste, é possível que ocorra a combustão de uma gota isolada, com uma frente de chama próxima e circundante à gota, a uma distância na mesma ordem de grandeza que o diâmetro da gota. Isso é chamado **combustão de gota isolada**. Revisando a literatura, constatou-se que não é muito claro quando a combustão de gota isolada ocorre [src], nem o seu efeito na chama em larga escala. Sabe-se que a combustão de gota isolada é importante para a ignição do spray [2], mas não foram encontrados estudos sobre o seu impacto na estrutura da chama.

## 1.1 Objetivos

Com isso em vista, a presente tese visa estudar e desenvolver modelos analíticos para a transferência de calor e massa em gotas em dois cenários:

**A.** Modelo de Evaporação e Condensação (MEC); e

## B. Modelo de Combustão de Gota Isolada (MCDI).

Esses modelos devem considerar os seguintes aspectos:

1. Descrição multicomponente da gota;
2. Mistura com termodinâmica não-ideal;
3. Efeitos de transferência de calor e massa no interior da gota.

O objetivo é desenvolver simulações de larga escala com ambos modelos, A e B, com a capacidade:

4. Determinação de quando ocorre a combustão de gota isolada;

ou seja, de determinar se utiliza modelo A ou o modelo B. Dessa forma, o autor visa investigar o efeito de considerar a combustão de gota isolada, e dos aspectos 1, 2 e 3, na estrutura da chama. A investigação da estrutura da chama inclui a investigação de aspectos como distribuição de temperatura e concentrações de espécies, o que é essencial para a determinação da ignição, da eficiência de combustão e das emissões de poluentes.

## 2 Fundamentação Teórica

### 2.1 Combustão Turbulenta de Sprays

A combustão turbulenta de sprays é caracterizada pela competição de vários processos físicos e químicos, fortemente acoplados e em diferentes escalas de tempo e comprimento. Na formação de um spray turbulento, um jato de combustível líquido se quebra devido às instabilidades hidrodinâmicas de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor, formando gotas que se dispersam, deformam e atomizam devido às forças aerodinâmicas superando as tensões superficiais da gota [13]. Isso forma o **regime denso** do spray, onde ocorrem também outros fenômenos como colisões,

coalescência e interferência por esteira aerodinâmica, por turbulência ou por alteração da concentração de vapor de combustível devido à evaporação. A medida que o jato se atomiza em gotas menores e dispersas, as gotas deixam de interferir umas nas outras e o regime é chamado de **disperso** ou **diluído**. Desde a sua formação, as gotas de combustível evaporam, fornecendo vapor combustível para a chama, que por sua vez influencia e é influenciada pelas próprias gotas e pela turbulência local. Revisões detalhadas e com mais referências para processos e interações na combustão turbulenta de sprays podem ser encontradas em [13, 17, 30, 39] [\[JiangX2010\]](#).

O foco deste trabalho é na modelagem das escalas da gota (escala micro), para que seja utilizada em simulações CFD do spray e da chama (escala macro), considerando apenas a região diluída de um spray de combustível líquido. Modelar a escala macro requer um modelo para a fase contínua, gasosa, um modelo para as reações químicas e um modelo para a fase dispersa, as gotas. A modelagem da fase gasosa é discutida na Seção 2.1.1 e um modelo, utilizado para simulações laminares reativas unidimensionais, é apresentado. Duas abordagens para tratar a modelagem das reações químicas são discutidas na Seção 2.1.2. As equações de evolução da gota são apresentadas na Seção 2.1.3 e os modelos de gota que preveem essa evolução são discutidos nas seções seguintes.

### 2.1.1 Modelagem da Fase Contínua

As equações que governam a fase contínua são as equações de conservação de espécie, quantidade de movimento e energia, junto com as condições de contorno para a interface gás-líquido e relações termodinâmicas necessárias para o fechamento do problema. Derivações desse conjunto de equações podem ser encontradas por exemplo nos livro-texto [10, 15, 16, 36].

Entretanto, utilizar essas equações requer resolver a interface das gotas, o que não é viável em simulações de chama de spray devido à diferença de escalas de comprimento entre as gotas e a chama. Assim, uma abordagem para a simulação CFD de combustão de spray é representar as gotas como pontos infinitamente pequenos, cuja evolução no tempo e no espaço é acompanhada ao longo da simulação, a partir dos modelos de gota implementados. Essa abordagem, de tratar a

fase gasosa como contínua e as gotas como elementos pontuais no tempo e no espaço é chamada de *Euler-Lagrange*.

A influência das gotas na fase contínua se dá, então, através de termos fonte, que inserem os efeitos do conjunto de gotas na célula em que elas estão inseridas, usando os modelos de gota. Essa abordagem é denominada PSIC - (*Particle Source in Cell*) e a aproximação de uma partícula por um ponto é chamada de *point particle approximation*.

Diferentes tratamentos matemáticos sobre as equações que descrevem a fase gasosa dão origem aos métodos DNS (*Direct Numerical Simulation*), LES (*Large Eddy Simulation*) e RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*). Cada um desses métodos aborda de maneira diferente a modelagem da turbulência e permite a simulação de escoamentos reativos turbulentos.

No que tange ao desenvolvimento de modelos para essas aplicações, é relevante testá-los em situações simplificadas, como em escoamentos reativos laminares primeiro. O software unidimensional de escoamentos reativos CHEM1D [32] é utilizado pelo grupo de pesquisa com esse propósito [23–25, 27, 29]. Utilizando a formulação compressível para baixos números de Mach, as equações de conservação de massa, espécie e entalpia em uma dimensão [23, 29, 34, 35] são

$$\frac{d\dot{m}}{dx} = \sum_k S_k, \quad (1)$$

$$\frac{d(\dot{m}Y_i)}{dx} - \frac{d}{dx}(\rho Y_i V_i) = \dot{\omega}_i + \delta_{ik} S_k, \quad (2)$$

$$\frac{d(\dot{m}h)}{dx} - \frac{d}{dx} \left( \lambda \frac{dT}{dx} \right) = \frac{d}{dx} \left[ \rho \sum_{i=1}^N Y_i h_i V_i - RT \sum_{i=1}^N \frac{D_i^T}{X_i M_i} \frac{dX_i}{dx} \right] + S_h^L. \quad (3)$$

Na primeira equação,  $\dot{m} = \rho u$  é o fluxo de massa da mistura,  $\rho$  a sua densidade e  $u$  a sua velocidade na direção  $x$ , a coordenada espacial e  $S_k$  é o termo de acoplamento de massa entre fases da espécie  $k$ . A segunda equação refere-se a espécie  $i$ :  $Y_i$  é a fração mássica da espécie,  $V_i$  a velocidade de difusão,  $\dot{\omega}_i$  a taxa de produção/consumo e  $\delta_{ik}$  o delta de Kronecker. A terceira equação é a da entalpia absoluta da mistura,  $h$ , em que  $\lambda$  é a condutividade térmica da mistura,

$T$  a sua temperatura.  $h_i$  e  $V_i$  são respectivamente a entalpia absoluta e a velocidade de difusão da espécie  $i$ , cuja fração mássica é  $X_i$ , a massa molar,  $M_i$ , e o coeficiente de difusão térmica,  $D_i^T$ .  $S_h$  é o termo de acoplamento entre fases da entalpia.

Os termos de acoplamento de fases  $S_k$  e  $S_h$  são termos fonte de massa de vapor da espécie  $k$  e de entalpia, respectivamente. Esses termos utilizam os modelos de gota, expostos nas Seções 2.2 e 2.3.

### 2.1.2 Modelagem Química

A modelagem química de maior fidelidade é chamada de química detalhada (DC - *Detailed Chemistry*). Essa abordagem utiliza um mecanismo químico com várias espécies e reações elementares, cada uma com uma taxa de reação modelada, por exemplo, com uma equação de Arrhenius, para calcular as taxas de consumo ou produção das espécies principais e a formação de poluentes. Os mecanismos podem ter dezenas de espécies e centenas de reações, o que torna esse método caro computacionalmente.

Uma alternativa para reduzir o custo computacional é o método FGM (*Flamelet Generated Manifold*). Nesse método, a química detalhada é calculada previamente em vários cenários diferentes e uma biblioteca é construída, a qual conecta uma situação inicial, determinada por variáveis de controle, a uma situação final, pós combustão. Tradicionalmente, duas variáveis de acesso são necessárias para determinar o espaço de variáveis (*manifold*) do FGM, a fração de mistura e uma variável de progresso da reação [20]. Em alguns trabalhos, como Sacomano et. al (2018) [29], a consideração de efeitos não adiabáticos força o uso da entalpia  $h$  como uma terceira variável de acesso.

Outra estratégia para reduzir o custo computacional é o espessamento artificial de chama (ATF - *Artificially Thickened Flame*), utilizada em simulações LES para reduzir o refino de malha necessário na frente de chama. Essa metodologia foi desenvolvida em [21] e aprimorada nos artigos seguintes [26, 28] para incluir o espessamento dinâmico, um efeito de interação chama-turbulência e a ampliação da taxa de evaporação de gotas atravessando a frente de



chama.

### 2.1.3 Modelagem Da Fase Discreta

A evolução das gotas na abordagem Euler-Lagrange com aproximação de gotas pontuais (*point-particle approximation*) é regida por equações diferenciais ordinárias (EDOs) no tempo para a posição da gota, a sua massa e a sua entalpia ou temperatura.

Considere uma única gota dentro do spray, composta por  $k = 1, \dots, n - 1$  espécies (componentes). Sua posição é dada pelo seu centro de massa  $\mathbf{X}_d$ , sua massa por  $m_d = \sum_{i=1}^{n-1} m_i^k$  e sua temperatura, assumida uniforme em seu interior, por  $T_d$ . A evolução da gota  $k$  é então regida pelas EDOs [13]

$$\frac{d^2 \mathbf{X}^k}{dt^2} = \frac{\mathbf{f}_k}{m_{d,k}} - g \frac{\partial z}{\partial \mathbf{x}} \quad (4)$$

$$\frac{dm_d}{dt} = \sum_k \dot{m}_{d,k} \quad (5)$$

$$m_i^k c_{L,k} \frac{dT_d}{dt} = \dot{q}_d \quad (6)$$

em que  $f^k$  representa as forças resultantes da fase gasosa na gota  $k$ ,  $g$  é a constante da gravidade e  $\dot{m}_{d,k}$  a taxa de variação de massa da espécie  $k$  na gota  $n$  e o  $\dot{q}_d$  fluxo líquido de calor para a gota.  $m_d \sum_k Y_{L,k} c_{L,k}$  é a capacidade térmica da gota, em que  $Y_{L,k}$  e  $C_{L,k}$  são a fração mássica e o calor específico da espécie  $i$  na fase líquida. Os termos  $f_k$ ,  $\dot{m}_{d,k}$  e  $\dot{q}$  são termos de acoplamento entre as fases na escala da gota, ou seja, representam a interação entre as fases líquida e gasosa na interface da gota. Enquanto o primeiro termo é geralmente substituído por uma expressão semi-empírica para o arrasto e o segundo por um termo de flutuação (*c.f.* [13, p. 16]), os dois últimos precisam de um modelo de transferência de calor e massa (HMT - *Heat and Mass Transfer*).

O modelo HMT pode descrever, por exemplo, a evaporação do combustível líquido e vapor de combustível, que é então queimado utilizando um dos modelos de química como DC ou FGM. O mesmo modelo pode descrever também, a condensação de uma espécie de volta para

a gota, como o próprio combustível ou a água, no caso de combustíveis hidrofílicos como os álcoois (e.g. metanol e etanol). Nesse cenário, o modelo HMT é denominado de Modelo de Evaporação e Condensação (MEC).

O uso de um MEC junto de um modelo de combustão gasosa como DC ou FGM representa uma chama de spray no modo de combustão de grupo externa ou interna ou combustão externa em lâmina (tradução livre de *external sheet combustion*), de acordo com a classificação de Chiu [Chiu1977, Chiu1982]. Entretanto, não representa a combustão de gota isolada, já que, nesse cenário, a combustão ocorre na mesma escala que a gota. Para modelar a combustão de gota isolada, é necessário um novo modelo HMT para a gota, que inclua uma frente de chama envolvendo a gota, denominado Modelo de Combustão de Gota Isolada (MCGI).

## 2.2 Modelos de Evaporação e Condensação (MEC)

Na escala de uma gota, o problema pode ser dividido em duas regiões segregadas: a gota, líquida; e o gás ambiente circundante. Cada região é governada por um conjunto de equações. Ambas regiões podem ser resolvidas numericamente (simuladas) ou representadas por um resultado analítico do modelo, com diferentes graus de fidelidade. Trabalhos que resolvem numericamente tanto o interior quanto o exterior da gota são capazes de simular muitos efeitos físicos a um elevado custo computacional. Mais comuns são modelos que usam um modelo analítico em uma região e simulam a outra, reduzindo o custo computacional e viabilizando o uso em simulações na escala da chama de spray. Geralmente, uma solução analítica é utilizada para a descrição espacial da fase gasosa e as propriedades da gota são integradas no tempo.

Isso é possível devido a hipótese de que a escala de tempo dos efeitos de transporte na região gasosa é muito mais rápida que a escala de tempo da mudança de temperatura da partícula. Assim, efeitos transitórios na fase gasosa são desprezados e a evolução temporal da temperatura da partícula é desacoplada da transitóriedade da fase gasosa, que atinge estado permanente a cada instante da partícula. Essa é a hipótese de regime quasi-estacionário. Dessa forma, a fase gasosa pode ser resolvida analiticamente e a evolução da gota integrada no tempo.

No que tange a região líquida, do interior da gota, geralmente assumida esférica, a hipótese mais simples é assumir uma distribuição homogênea de temperatura e espécie no interior da gota e negligenciar recirculação. Isso elimina a necessidade de modelar o interior da gota. Vale ressaltar que essas duas hipóteses, a de regime quasi-estacionário e a de interior de gota homogêneo, já foram utilizadas nas Equações (5) e (6).

Essa é a base para os modelos apresentados na Seção 2.2.1. Diferentes abordagem existem para considerar o interior da partícula; algumas são discutidas na Seção 2.2.2.

### 2.2.1 Modelos com Interior de Gota Homogêneo

Naturalmente, os primeiros MECs a serem desenvolvidos consideravam gotas esféricas, **mono-componentes**, com interior homogêneo, estacionárias em ambiente quiescente. Nessa Seção, uma curta revisão dos MEC monocomponentes é apresentada brevemente, seguida pela apresentação do modelo multicomponente desenvolvido em [22]. A seção se encerra com alguns comentários sobre termodinâmica de mistura não ideal.

O primeiro MEC foi desenvolvido por Fuchs [9] na década de 1960. Esse modelo considera apenas o transporte por difusão e assume que temperatura da gota já está na sua temperatura de equilíbrio de regime quasi-estacionário. Assim, esse modelo não é capaz de representar o período de aquecimento da gota e gravemente subestima a taxa de variação de massa por considerar apenas o transporte por difusão.

A consideração do transporte por convecção em MECs, chamado de escoamento de Stefan (*Stefan flow*), leva ao modelo de Stefan-Fuchs [31]. A taxa de variação de massa da partícula nesse modelo pode ser dada tanto a partir do transporte de massa, quanto do transporte de energia, de usando os chamados número de transporte de Spalding. Esse modelo também faz a hipótese de que a gota está na sua temperatura de equilíbrio no regime quasi-estacionário, não havendo modelo para o fluxo líquido de calor para a gota.

A hipótese de ambiente quiescente pode ser relaxada utilizando correlações experimentais para os números de Nusselt e de Sherwood, como as relações de Ranz-Marshall e Froessling

[6]. A adaptação dessas correlações para uma gota com escoamento de Stefan foi considerada no modelo de Abramzon-Sirignano [1], que também modelou o período de aquecimento da partícula, desfazendo-se da hipótese de temperatura de equilíbrio quasi-estacionária.

Uma hipótese realizada em todos os modelos supracitados é a de equilíbrio termodinâmico na interface líquido-vapor. O relaxamento dessa hipótese deu origem ao modelo de Bellan-Harstad [3]. Ambos modelos foram combinados em uma única formulação matemática por Miller et. al em [19].

Fugindo da metodologia da mecânica do contínuo, o modelo de Hertz-Knudsen-Langmuir [Langmuir] modela a taxa de variação da massa da gota baseada em cinética das partículas.

Os MECs **multicomponente** são naturalmente baseados nos MEC monocomponentes. O modelo desenvolvido por Sacomano et. al em 2022 [22] considera tanto a gota quanto os gases ambientes como componentes, considera também a difusão diferencial das espécies, uma mistura não ideal e a condição de não equilíbrio termodinâmico na interface líquido-vapor. Nesse modelo, o fluxo de calor e de massa na interface da gota são dados por

$$\dot{q}_d = 4\pi R\lambda \frac{\text{Nu}}{2}(T_\infty - T_s) + \sum_k \dot{m}_{d,k} L_k \quad (7)$$

$$\dot{m}_d = -4\pi R\rho \mathcal{D}_k \frac{\text{Sh}_K}{2} B_{M,k} \quad (8)$$

em que  $R$  é o raio da gota,  $\lambda$  a condutividade térmica do gás ao redor da gota,  $T_\infty$  a temperatura ambiente e  $T_s$  a temperatura da superfície da gota. O subscrito  $d$  se refere à gota (*droplet* em inglês) e  $k$  à espécie, sendo  $\dot{m}_{d,k}$  a taxa de variação de massa da espécie  $k$  na gota e  $L_k$  o calor latente de vaporização da espécie  $k$ .  $\rho$  é a densidade do gas circundante, Nu e Sh são os número de Nusselt e Sherwood, respectivamente,  $\mathcal{D}_k$  é o coeficiente de difusão multicomponente da espécie  $k$  e  $B_{M,k}$  é o número de transferência de Spalding de massa para a espécie  $k$ . Os

números de transferência de Spalding de temperatura e de massa nesse cenário são dados por

$$B_T = \frac{(T_\infty - T_s) \sum_k c_{p,k} \dot{m}_{d,k}}{\dot{q}_d - \sum_k \dot{m}_{d,k} L_k} \quad (9)$$

$$B_{M,k} = \frac{\dot{m}_D Y_{k,s} - \dot{m}_d Y_{k,\infty}}{\dot{m}_{d,k} - \dot{m}_d Y_{k,s}} \quad (10)$$

onde, novamente os subíndices  $s$  e  $\infty$  se referem à superfície da gota e ao ambiente,  $Y$  refere-se à fração mássica e, agora,  $c_{p,k}$  refere-se ao calor específico a pressão constante da espécie  $k$  na fase gasosa. Nas equações (7) e (8), os números de Nusselt e Sherwood podem ser utilizados para representar os efeitos de ambientes convectivos. Porém, o fluxo de Stefan altera a troca de calor e massa da partícula, de modo que as correlações experimentais para gotas não evaporantes precisam ser adaptadas, como mostraram Abramzon e Sirignano [1]. A correção para utilizar as correlações empíricas para esses adimensionais (*c.f.* [24, eqs. (8) e (9)]), representadas aqui nos símbolos  $Nu^0$  e  $Sh^0$ , são

$$Nu = \frac{\ln |B_T + 1|}{B_T} \quad (11)$$

$$Sh = \frac{\ln |B_{M,k} + 1|}{B_{M,k}}. \quad (12)$$

Quanto ao aspecto **não ideal da mistura**, [22] usou os métodos

### 2.2.2 Modelos para o Interior da Gota

[*ChenL2016IJHMT, ZanuttoC2019, MacquaC2008* ]

## 2.3 Modelos de Combustão Homogênea de Gota Isolada (MCGI)

Em MCGI, as hipóteses de combustão homogênea em fase gasosa, com uma reação infinitamente rápida em uma única etapa, removem o problema da cinética química e permite que a chama seja controlada apenas pela difusão do combustível – da gota para a chama – e do oxidante – do ambiente para a chama. Dessa forma, a chama se ocorre onde o fluxo de massa do combustível

está em proporção estequiométrica com o fluxo de oxidante, vindo de sentido contrário. Os fluxos de combustível e de oxidante, por sua vez, vem de MECs. Portanto, os MCGIs se baseiam nos modelos de evaporação e condensação já desenvolvidos.

Assim, as mesmas hipóteses realizadas para MECs são utilizadas em MCGIs também, como regime quasi-estacionário e interior de gota homogêneo. Também os mesmos problemas e aprimoramentos já mencionados se fazem necessários em MCGIs, como descrição multicomponente, comportamento não ideal de mistura, condição de não equilíbrio termodinâmico na interface líquido-vapor, além de uma descrição dos efeitos oriundos do interior da gota.

Entretanto, devido à maior complexidade analítica dos modelos de combustão homogênea de gota isolada, os modelos analíticos para essa situação consideram muito menos efeitos que os MECs.

O modelo clássico foi desenvolvido por Godsave-Spalding, baseado no MEC de Stefan-Fuchs [10, 16, 33]. Nesse modelo, a taxa de variação de massa é dada por

$$\dot{m}_{d,f} = A_d \frac{\text{Sh}}{2R} \rho D \ln(1 + B) \quad (13)$$

em que  $m_{d,f}$  é a massa de combustível (assumido o único componente) na gota,  $A_d$  é a área da gota e  $\rho D$  pode ser substituído por  $\lambda/c_p$  devido à hipótese de  $\text{Le} = 1$ . Nos modelos MCGI existem três números de transferência de Spalding  $B$ , devido à resolução de três equações de transporte—de energia, de massa do combustível e do combustível—acopladas dois a dois. Os números  $B$  são

$$B_{f-T} = \frac{c_p(T_\infty - T_s) - Y_{f,s}h_C}{h_C(Y_{f,s} - 1) + L_v - \dot{q}_{\text{net}}/\dot{m}_{d,f}} \quad (14)$$

$$B_{ox-T} = \frac{c_p(T_\infty - T_s) + \nu Y_{ox,\infty}h_C}{L_v - \dot{q}_{\text{net}}/\dot{m}_{d,f}} \quad (15)$$

$$B_{f-ox} = \frac{\nu Y_{o,\infty} + Y_{f,s}}{1 - Y_{f,s}} \quad (16)$$

em que  $nu$  é a razão ar-combustível em massa,  $h_C = h_{F,f}^0 + \nu h_{F,ox}^0 - (1 + \nu)h_{F,pr}^0$  é a entalpia

liberada pela combustão, saldo das entalpias de formação dos reagentes menos a dos produtos. Qualquer um dos números de transferência pode ser utilizado para calcular a taxa de variação de massa da gota.

Entretanto,  $B_{f-T}$  e  $B_{ox-T}$  possuem o termo ainda desconhecido  $\dot{q}_{net}$ , que é a taxa líquida de calor que provoca o aquecimento da gota. Esse termo é negligenciado por alguns livros-texto [10,36], o que corresponde a assumir que a gota tem inércia térmica desprezível [33]. Esses modelos que não incluem, portanto, a capacidade de representar o período de aquecimento da gota. Outros, sugerem modelos conceituais como o modelo de "pele de cebola" [33, cpt. 10], porém o autor dessa proposta mostrou em [12] que esse modelo superestima absurdamente o período de aquecimento da gota. No mesmo trabalho, o autor propõe utilizar  $\dot{q}_{net}$  como o saldo do calor trocado com a chama menos o calor perdido pela evaporação, com bons resultados.

Essa abordagem acopla a solução da evaporação ao saldo do fluxo de calor para a gota, resolvendo aos dois juntos, como sugerido por Abramzon e Sirignano [1], e feito pelo modelo de Sacomano et. al [22] na equação (9) (vide o termo  $\dot{q}_d$ ) para o caso de MECs. Turns [33] chama essa abordagem de *slumped parameter*.

Uma perspectiva histórica dos esforço para relaxar as hipóteses realizadas no modelo de Godsave-Spalding pode ser encontrada em [8], assim como um modelo considerando a dependência da temperatura nos coeficientes de transporte e número de Lewis não unitário. Um exemplo desse esforço é [Ulzama2006], que relaxou a hipótese de regime quasi-estacionário na fase gasosa e criou um modelo misto quasi-estacionário-transiente com resultados semelhantes ao modelo clássico.

MCGIs também são estudados para a combustão de pós metálicos que queimam em combustão homogênea, como o alumínio [5, p. 7]. Alguns trabalhos nessa área se destacam pela sua descrição multicomponente. Zhang et. al [37, 38], por exemplo, obtiveram uma solução analítica para um modelo estendido de Godsave-Spalding, incluindo um produto da reação de fase gasosa. Esse produto, alumina ( $Al_2O_3$ ) no trabalho deles, é produzido na frente de chama e pode ser transportado tanto para a partícula quanto para o ambiente. Um desenvolvimento

semelhante foi realizado por DesJardin et. al [7]. Isso é relevante para o etanol por exemplo, cuja combustão produz vapor que pode voltar a se condensar sobre a gota. A diferença é que o alumínio e o seu óxido, ambos em estado líquido, são insolúveis, enquanto a água e o álcool são infinitamente solúveis. [src].

### 2.3.1 Modelos de Modo de Combustão de Gotas

Mencionar relevância para ignição de sprays e [2]. [UmemuraA1994] com asymptotic theory. [BorghesiG2013CF] com DNS para detectar.

## 3 Materiais e Métodos

A presente proposta trata de desenvolver modelos para os cenários A e B (MEC e MCGI), com as capacidades 1, 2 e 3 (multi-componente, mistura não ideal e interior da gota), e incluí-los em simulações CFD incluindo a capacidade 4 (escolher quando usar MEC ou MCGI), conforme exposto nos Objetivos.

Como apresentado nas Seções 2.2 e 2.3, algumas dessas capacidades já existem na literatura, inclusive com contribuições do presente grupo de pesquisa. O desenvolvimento de um modelo com as capacidades desejadas tomará como base os modelos já existentes na literatura e se dará de forma gradual e incremental. O desenvolvimento se dará por meio dos seguintes métodos.

**Revisão de literatura.** A revisão de literatura visa encontrar e compreender os modelos já existentes de evaporação e condensação e de combustão de gota isolada, assim como o dos aspectos multicomponente, de mistura não ideal e de interior da gota, assim como do estudo quando ocorre a combustão de gota isolada. Vários modelos nos diferentes temas compreendidos por essa proposta já foram apresentados na Seção 2.1. Eles abrangem diferentes aspectos e abordagens para a modelagem dos problemas propostos e constituem uma boa base inicial para essa pesquisa.

**Desenvolvimento de modelos analíticos.** Após a revisão de literatura sobre um ou



mais temas, deverá ser analisada a viabilidade de construção de um novo modelo, tomando como base os modelos pré-existentes. Por exemplo, constatou-se que os MECs incluem muito mais fenômenos físicos do que o MCGIs encontrados. Assim, será analisada, como exemplo, a viabilidade de incorporar a formulação de Miller [19] no modelo de Godsave-Spalding de combustão de gota isolada [31], o que dará origem a um novo modelo de combustão de gota isolada. Para tanto, é necessário primeiro, o bom entendimento das hipóteses e derivações de ambos modelos, o que virá da revisão de literatura.

Nessa etapa, será importante a experiência do grupo de pesquisa com MEC multicomponente, incluindo descrição de mistura não ideal, e discretização do interior da gota. Também é relevante a experiência do aluno com modelagem de transferência de calor e massa em gotas [12], o qual já tem familiaridade com os modelos monocomponente Stefan-Fuchs [10] e Abramzon-Sirignano [1] e Godsave-Spalding [31].

**Teste do modelo isolado.** Caso haja o desenvolvimento de um novo modelo, as suas capacidades e limitações devem ser testadas através da simulação deste modelo isoladamente, isto é, da simulação de uma única gota. Esse teste é essencial para compreender as capacidades preditivas do modelo, o que já possui valor científico, assim como para avaliar a robustez e eficiência do modelo desenvolvido, tendo em vista a sua aplicação em simulações CFD de grandes escalas. A consequente avaliação dos resultados permite que eventuais erros de implementação do modelo sejam identificados e corrigidos logo no início do processo de desenvolvimento. [TODO:

*Mencionar ser simulação 0D de evolução temporal.*]

O ambiente de programação Python foi selecionado para essa etapa, devido à experiência prévia do autor da proposta com a linguagem e inclusive com simulação de gota isolada nessa linguagem [12]. Ademais, a simplicidade da linguagem facilita a implementação em código e a correção de *bugs*, o que facilita a implementação do modelo em outras linguagens.

**Uso do modelo em simulação de chama canônica laminar.** Com o modelo validado em simulações de gota isolada, é de interesse conhecer a influência do MEC/MCGI desenvolvido em uma chama canônica laminar utilizando química detalhada. Para tanto, o modelo será

implementado no software CHEM1D [32], onde já existe uma infraestrutura para simulações 1D laminares de spray [23, 29, 32, 34, 35] e com o qual o grupo de pesquisa já tem experiência [23–25, 27, 29].

Isso permitirá, por exemplo, a simulação de uma chama 1D laminar em uma névoa de spray utilizando o novo modelo. Assim, o efeito do MEC/MCGI desenvolvido sobre a chama será investigado. Os resultados obtidos desse empreendimento serão de grande valor científico. [**Q:**

*Da para tirar que informações?*]

**Uso do modelo em simulação tridimensional turbulenta** O próximo passo é o uso do MEC/MCGI desenvolvido em simulações tridimensionais de chama turbulenta em grandes escalas. Isso será feito no software OpenFOAM [src], onde o grupo de pesquisa já tem experiência e infraestrutura para realizar simulações de grande escala (LES) com métodos FGM para química e ATF para a frente de chama, respectivamente [21, 26, 28]. Para essa etapa, será necessário estudar C++ e desenvolvimento de software no OpenFOAM, para implementar os modelos desenvolvidos.

Essa capacidade de simulação de grande escala permitirá investigar o efeito do modelo desenvolvido na estrutura da chama, o que possui grande valor científico. Utilizando um MCGI, essa Investigação mostrará o efeito da combustão de uma gota isolada na estrutura da chama, um dos objetivos desta proposta.

Os métodos apresentados nessa seção para a elaboração do trabalho dessa tese referem-se ao desenvolvimento analítico e numérico de MECs e MCGI, tomando como base modelos pré-existentes na literatura e as experiências prévias do grupo de pesquisa e do aluno. A aplicação desses métodos para os modelos e capacidades no escopo dessa tese dá origem ao plano de trabalho, organizado em tarefas e em um cronograma de execução e detalhado na próxima Seção.

## 4 Plano de Trabalho e Cronograma de Execução

Assim, são determinadas as seguintes tarefas para essa proposta:

- T1** Estudo aprofundado sobre MEC e MCGI monocomponentes pré-existentes na literatura.
- T2** Modelagem analítica de combustão de gota isolada monocomponente com modelo avançado de evaporação.
- T3** Estudo de modelos pre-existentes para a modelagem analítica de discretização do interior de gota monocomponente.
- T4** Avaliação da viabilidade de acoplamento de modelos monocomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota.
- T5** Estudo de modelos MEC e MCGI multicomponente pre-existentes na literatura.
- T6** Modelagem analítica de combustão de gota isolada multicomponente com modelo avançado de evaporação.
- T7** Estudo de modelos pre-existentes para a modelagem analítica de discretização do interior de gota multicomponente.
- T8** Avaliação da viabilidade de acoplamento de modelos multicomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota.
- T9** Estudo de modelos de determinação de probabilidade de gotas entrarem no modo de combustão isolada.
- T10** Desenvolvimento de modelo analítico para escolha entre MEC e MCGI, baseado na pesquisa do item anterior.
- T11** Implementação do modelo de escolha no CHEM1D, após T13 e T16.

- T12** Implementação do modelo de escolha no OF, após T14 e T17.
- T13** Aprender como usar e implementar no CHEM1D.
- T14** Aprender C++ visando implementação no OpenFOAM.
- T15** Implementação de MEC/MCGI em Python.
- T16** Implementação de MEC/MCGI no CHEM1D.
- T17** Implementação de MEC/MCGI no OpenFOAM.
- T18** Simulação da evolução temporal 0D de gota isolada em Python.
- T19** Simulação de combustão laminar de névoa quiescente de spray no CHEM1D.
- T20** Simulação de chama turbulenta 3D nas grandes escalas com FGM e ATF.
- T21** Disciplinas de pós-graduação.
- T22** Escrever a dissertação.

O cronograma de execução para essas tarefas ao longo do Doutorado pode ser encontrado na Figura 1. Apesar de não estar discriminado nas tarefas acima, as atividades de simulação incluem a análise dos resultados. As ferramentas utilizadas para a análise dos resultados em cada uma das atividades de simulação são discutidas na Seção 5 Com relação às disciplinas, é necessário cursar 9. Algumas chamaram a atenção devido a sua relevância para o tópico deste projeto: Fundamentos de Combustão I (PME5228), Fundamentos de Escoamentos Turbulentos Reativos (PME5411), Sistemas Particulados (PQI5848), Termodinâmica Avançada I (PME5014), Introdução à Mecânica dos Meios Contínuos (PME5011) e Modelagem de Turbulência para CFD (PME5418).

Figura 1: Cronograma de execução.

			2025	2026		2027		2028		2029
			2025.2	2026.1	2026.2	2027.1	2027.2	2028.1	2028.2	2029.1
Mono-comp.	T1	MEC e MCGI existentes								
	T2	MCGI + MEC avançado								
	T3	MInt existentes								
	T4	MCGI + MInt								
Multi-comp.	T5	MEC e MCGI existentes								
	T6	MCGI + MEC avançado								
	T7	MInt existentes								
	T8	MCGI + MInt								
Modo Comb.	T9	Modos comb. existentes								
	T10	Modelo escolha MEC/MCGI								
	T11	Implementação no CHEM1D								
	T12	Implementação no OF								
Program.	T13	Aprender CHEM1D								
	T14	Aprender C++								
Código	T15	Implementação em python								
	T16	Implementação no CHEM1D								
	T17	Implementação no OF								
Simul. e Análises	T18	Gota isolada								
	T19	Névoa de spray								
	T20	Chama turbulenta 3D								
POLI	T21	Disciplina								
	T21	Disciplina								
	T22	Escrever Tese								
Total			6	8	7	7	6	6	7	2

## 5 Forma de Análise dos Resultados

Comparação com experimentais [\[src\]](#) e casos resolveram a gota [\[src\]](#).

[11]

## Referências

- [1] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9):1605–1618, 1989.
- [2] Suresh K. Aggarwal. Single droplet ignition: Theoretical analyses and experimental findings. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45:79–107, 2014.
- [3] J. Bellan and K. Harstad. Analysis of the convective evaporation of nondilute clusters of drops. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(1):125–136, 1987.
- [4] Jeffrey M. Bergthorson, Yinon Yavor, Jan Palecka, William Georges, Michael Soo, James Vickery, Samuel Goroshin, David L. Frost, and Andrew J. Higgins. Metal-water combustion for clean propulsion and power generation. *Applied Energy*, 186:13–27, 2017.
- [5] J.M. Bergthorson, S. Goroshin, M.J. Soo, P. Julien, J. Palecka, D.L. Frost, and D.J. Jarvis. Direct combustion of recyclable metal fuels for zero-carbon heat and power. *Applied Energy*, 160:368–382, 2015.
- [6] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. J. Wiley, 2002.
- [7] Paul E. DesJardin, James D. Felske, and Mark D. Carrara. Mechanistic model for aluminum particle ignition and combustion in air. *Journal of Propulsion and Power*, 21(3):478–485, 2005.
- [8] Fernando FACHINI FILHO. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. *Combustion and Flame*, 116(1):302–306, 1999.
- [9] N.A. Fuchs. *Evaporation and Droplet Growth in Gaseous Media*. Pergamon Press, 1959.
- [10] I. Glassman and R.A. Yetter. *Combustion*. Chemical, Petrochemical & Process. Elsevier Science, 2008.

- [11] João Vinícius Hennings de Lara. Resolvent analysis of the couette-poiseuille flow. Bachelor's thesis, Technische Universität Darmstadt, 2023.
- [12] João Vinícius Hennings de Lara. Towards high-fidelity cfd simulations of aluminum particle combustion in steam for future energy systems. Master's thesis, Technische Universität Darmstadt, 2024.
- [13] Patrick Jenny, Dirk Roekaerts, and Nijso Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(6):846–887, 2012.
- [14] Philippe Julien and Jeffrey M. Bergthorson. Enabling the metal fuel economy: green recycling of metal fuels. *Sustainable Energy Fuels*, 1:615–625, 2017.
- [15] K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley, 2005.
- [16] C.K. Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2006.
- [17] A. R. Masri. Turbulent combustion of sprays: From dilute to dense. *Combustion Science and Technology*, 188(10):1619–1639, 2016.
- [18] A.R. Masri. Challenges for turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(1):121–155, 2021.
- [19] R.S. Miller, K. Harstad, and J. Bellan. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(6):1025–1055, 1998.
- [20] Norbert Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 2000.
- [21] Fernando Luiz Sacomano Filho. *Novel approach toward the consistent simulation of turbulent spray flames using tabulated chemistry*. PhD thesis, Technische Universität Darmstadt, 2017.

- [22] Fernando Luiz Sacomano Filho, Artur Carvalho Santos, Aymeric Vié, and Guenther Carlos Krieger Filho. A new robust modeling strategy for multi-component droplet heat and mass transfer in general ambient conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 194:123102, 2022.
- [23] Fernando Luiz Sacomano Filho, Luis Eduardo de Albuquerque Paixão e Freire de Carvalho, Jeroen Adrianus van Oijen, and Guenther Carlos Krieger Filho. Effects of reaction mechanisms and differential diffusion in oxy-fuel combustion including liquid water dilution. *Fluids*, 6(2), 2021.
- [24] Fernando Luiz Sacomano Filho, Luís Eduardo de Albuquerque Paixão e Freire de Carvalho, Artur Carvalho Santos, and Aymeric Vié. Investigations of the differential diffusion modeling for hydrophilic fuel vapor in propagating spray flames. *Fuel*, 379:133056, 2025.
- [25] Fernando Luiz Sacomano Filho, Luís Eduardo de Albuquerque Paixão e Freire de Carvalho, Artur Carvalho Santos, Aymeric Vié, and Jeroen Adrianus van Oijen. Impact of multi-component description of hydrophilic fuel droplets in propagating spray flames. *Combustion and Flame*, 263:113415, 2024.
- [26] Fernando Luiz Sacomano Filho, Arash Hosseinzadeh, Amsini Sadiki, and Johannes Janicka. On the interaction between turbulence and ethanol spray combustion using a dynamic wrinkling model coupled with tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 215:203–220, 2020.
- [27] Fernando Luiz Sacomano Filho, Guenther Carlos Krieger Filho, Jeroen Adrianus van Oijen, Amsini Sadiki, and Johannes Janicka. A novel strategy to accurately represent the carrier gas properties of droplets evaporating in a combustion environment. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 137:1141–1153, 2019.
- [28] Fernando Luiz Sacomano Filho, Guido Kuenne, Mouldi Chrigui, Amsini Sadiki, and Johannes Janicka. A consistent artificially thickened flame approach for spray combustion using



- les and the fgm chemistry reduction method: Validation in lean partially pre-vaporized flames. *Combustion and Flame*, 184:68–89, 2017.
- [29] Fernando Luiz Sacomano Filho, Nico Speelman, Jeroen Adrianus van Oijen, Laurentius Philippus Hendrika de Goey, Amsini Sadiki, and Johannes Janicka and. Numerical analyses of laminar flames propagating in droplet mists using detailed and tabulated chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, 22(5):998–1032, 2018.
- [30] Antonio L. Sanchez, Javier Urzay, and Amable Linan. The role of separation of scales in the description of spray combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2):1549–1577, 2015.
- [31] W. A. SIRIGNANO and C. K. LAW. *Transient Heating and Liquid-Phase Mass Diffusion in Fuel Droplet Vaporization*, volume 166 of *Advances in Chemistry*, pages 3–26. AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 06 1978. 0.
- [32] L.M.T. Sommers. *The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 1994.
- [33] S.R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. Number v. 1 in *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill, 2000.
- [34] J.A. van Oijen and L. P. H. de Goey. Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method. *Combustion Theory and Modelling*, 6(3):463–478, 2002.
- [35] J.A. van Oijen, A. Donini, R.J.M. Bastiaans, J.H.M. ten Thijs Boonkamp, and L.P.H. de Goey. State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 57:30–74, 2016.
- [36] F. A. Williams. *Combustion Theory*. CRC Press, 1985.

- [37] Jiarui Zhang, Zhixun Xia, Likun Ma, Oliver T. Stein, Yunchao Feng, Tien D. Luu, and Andreas Kronenburg. Sensitivity of flame structure and flame speed in numerical simulations of laminar aluminum dust counterflow flames. *Combustion and Flame*, 245:112363, 2022.
- [38] Jiarui Zhang, Zhixun Xia, Oliver T. Stein, Likun Ma, Fei Li, Yunchao Feng, Zihao Zhang, and Andreas Kronenburg. Combustion characteristics of aluminum particle jet flames in a hot co-flow. *Chemical Engineering Journal*, 442:135876, 2022.
- [39] Lei Zhou, Wanhui Zhao, Kai Hong Luo, Ming jia, Haiqiao Wei, and Maozhao Xie. Spray-turbulence-chemistry interactions under engine-like conditions. *Progress in Energy and Combustion Science*, 86:100939, 2021.