

Investigações Multi-Escala para Escoamentos Multifásicos Dispersos Reativos

João Vinícius Hennings de Lara

April 2025

Sumário

1	Introdução	3
1.1	Objetivos	5
2	Fundamentação Teórica	5
2.1	Combustão Turbulenta de Sprays	5
2.1.1	Modelagem da Fase Contínua	6
2.1.2	Modelagem Química	8
2.2	Modelos de Evaporação e Condensação (MEC)	10
2.2.1	Modelos com Interior de Gota Homogêneo	10
2.2.2	Modelos para o Interior da Gota	13
2.3	Modelos de Combustão Homogênea de Gota Isolada (MCGI)	13
2.3.1	Modelos de Modo de Combustão de Gotas	14
3	Materiais e Métodos	15
4	Plano de Trabalho	17
4.1	Cronograma de Execução	20
4.2	Disciplinas a serem cursadas	20
5	Forma de Análise dos Resultados	20
	Referências	21

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 [src]. 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 [Reviews de Al], sendo os mais adequados para aplicações de transporte, como no setor automotivo de cargas pesadas, naval e aeronáutico [15]. Além do setor de transporte, combustíveis líquidos são importantes para algumas indústrias como aço e cimento, para algumas termoeletricas 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 [15].

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,

de forma a atender a demanda (iii). No âmbito da combustão turbulenta de sprays, é de extrema importância o modelo de transferência 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 como um todo [11], 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 larga escala da chama como um todo. 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 HMT 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 hidrodinâmica de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor, formando gotas que se dispersam, deformam e atomizam devido às forças aerodinâmicas superando as tensões superficiais da gota [11]. 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. À 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 [11, 14, 27, 38] [JiangX2010].

O foco deste trabalho é na modelagem das escalas da gota (micro) e do spray e da chama (macro) na 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. Dois exemplos de modelos para a fase contínua e para a química, escolhidos por relevância e experiência no grupo de pesquisa, serão apresentadas nas próximas Subseções 2.1.1 e 2.1.2. Atenção especial será dada para a modelagem da gota, uma vez que o foco desse trabalho é desenvolver novos modelos para essa escala e investigar os efeitos na escala da chama. Modelos de transferência de calor e massa em gotas são discutidos nas Seções 2.2.

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 livros-texto [12, 13, 36].

Para as simulações na escala da chama de spray, em que não é viável resolver a interface das gotas, dado que elas estão em outra escala de comprimento, muito menor que a chama, as gotas são representadas como pontos infinitamente pequenos. A sua influência na fase contínua se dá, então, através de termos fonte obtidos a partir de modelos analíticos na escala da gota. Essa abordagem é denominada PSIC - (*Particle Source in Cell*) e a aproximação feita para uma partícula pontual é chamada de *point particle approximation*. As equações de transporte resultantes estão descritas abaixo, cf. [11].

$$\frac{\partial \rho Y^\beta}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y^\beta U_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_j^\beta}{\partial x_j} + S^\beta - \dot{\rho}^{\beta D} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho g \frac{\partial z}{\partial x_i} - \dot{M}_i^D - f_i^D \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho H U_j}{\partial x_j} = \frac{\partial J_j^h}{\partial x_j} + \rho U_i g \frac{\partial z}{\partial x_i} + Q - \dot{Q}^D - \dot{q}^D \quad (3)$$

Essas equações de transporte são respectivamente da fração mássica da espécie β , Y^β , da quantidade de momento na direção i , ρU_i e da energia $E = e + (1/2)U_i U_i + zg$. Os termos de interação entre fases são aqueles com o sobrescrito D (de *droplet* - gota). Com exceção dos termos, \dot{M}_i^D e f_i^D , que correspondem às trocas de momentum e força, os termos restantes, $\dot{\rho}^{\beta D}$, \dot{Q}^D e \dot{q}^D são oriundos dos modelos de transferência de calor e massa, detalhados na Seção 2.2 e 2.3.

O grupo de pesquisa tem experiência com simulações de largas escalas (LES - *Large Eddy Simulations*), nas quais as equações de transporte são decompostas entre sub-escala e escala, $\psi = \tilde{\psi} + \psi''$, e filtradas espacialmente e de forma ponderada com a densidade, $\tilde{\psi} = \overline{\rho \psi} / \bar{\rho}$, em que ψ corresponde a uma variável qualquer. Em uma formulação compressível para baixos números de Mach, as equações de continuidade e de quantidade de movimento são (cf. [25])

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \bar{S}_v \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2\bar{\mu} \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \bar{\rho} \tau_{ij}^{\text{sgs}} \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{p} g_i + \bar{S}_{u,i} \quad (5)$$

em que os termos \bar{S}_v e $\bar{S}_{u,i}$ são os termos de acoplamento de fase de massa e de momento. Essa formulação foi utilizada em [18, 23, 25] junto com a abordagem química FGM (*Flamelet Generated Manifold*), explicada na próxima Seção, no desenvolvimento de um método de espessamento de chama dinâmico (ATF - *Artificially Thickened Flame*).

Essas são as simulações mais completas de combustão turbulenta de sprays, que podem ser utilizadas em cenário reais. Entretanto, também é relevante realizar simulações laminares em configurações mais simples, canônicas, para investigar alguns aspectos da modelagem individualmente. Para isso, a configuração de chama de propagação livre laminar em uma névoa de gotas foi simulada pelo grupo de pesquisa em [24, 26] no software CHEM1D [30]. Nesse caso, as equações de conservação de massa, espécie e entalpia escritas também em uma formulação compressível para baixos números de Mach, são [20, 26, 33, 34]

$$\frac{d\dot{m}}{ds} = \dot{S}_V^L \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\dot{m}Y_i)}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{\text{Le}_i c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial s} \right) = \dot{\omega}_i + \delta_{ik} S_V^L \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\dot{m}h)}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial s} \right) = \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{c_p} \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{1}{\text{Le}_i} - 1 \right) h_i \frac{\partial Y_i}{\partial s} \right) + S_h^L \quad (8)$$

em que \dot{S}_V^L e S_h^L são os termos de acoplamento de fase de massa e entalpia. Em 2018, Sacomano et. al [26] resolvem a química com o método FGM para explorar as capacidades e limitações desse método. Em 2019, [24], os autores utilizam química detalhada para mostrar que é possível representar a mistura gasosa com um subconjunto reduzido de espécies.

2.1.2 Modelagem Química

A modelagem química de maior fidelidade é chamada de química detalhada. 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. Ambos os métodos mencionados são oriundos da combustão gasosa, de forma que dois parâmetros de controle são necessários para descrever completamente o *manifold* [17]. Entretanto, Sacomano et. al em 2018 [26], usam três variáveis de controle, pois o efeito não adiabáticos são considerados na tabulação. Assim, além da fração de mistura z e da variável de progresso da reação Y_{RPV} , definida como uma combinação linear de Y_{CO_2} , Y_{H_2O} e Y_{CO} , é utilizado também a entalpia h como variável de acesso. As equações de transporte para as variáveis de controle tem a forma da equação abaixo, onde $\psi \in \{z, Y_{RPV}, h\}$ (cf. [26]).

$$\frac{\partial \rho \psi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \psi}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} \left(\Gamma_\psi \frac{\partial \psi}{\partial s} \right) + \dot{\omega}_\psi + S_h^L \quad (9)$$

Outro esforço 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 [18] e aprimorada nos artigos seguintes [23, 25]. Em [25], inclui-se o espessamento baseado nas propriedades da mistura e uma correção para a taxa de evaporação de gota durante atravessia da frente chama. Já em [23], inclui-se o cálculo dinâmico de um termo para a interação chama turbulência. Nesses trabalhos, o tabelamento FGM é considerado adiabático e utiliza apenas duas variáveis de controle: z e Y_{RPV} . A equação de transporte dessas variáveis é modificada para o espessamento da chama, tendo a forma dada pela equação abaixo, com $\psi \in \{z, Y_{RPV}\}$, (veja e.g. [25] para mais detalhes).

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi} \bar{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(FE \frac{\bar{\mu}}{Sc_\psi} + (1 - \Omega) \frac{\mu_t}{Sc_{t,\psi}} \right) \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x_j} \right] + \frac{E}{F} \tilde{\dot{\omega}}_\psi + \bar{S}_{\psi,\nu'}^{Eul} \quad (10)$$

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. Ambas regiões podem ser modeladas 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. Por viabilizar o uso em simulações na escala da chama de spray, mais comuns são modelos que usam um modelo analítico em uma região e simulam a outra. Geralmente, uma solução analítica é utilizada para a descrição espacial da fase gasosa e as propriedades da gota são integradas no tempo.

No que tange a região líquida, do interior da gota, 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. Para a região gasosa, é comum assumir que a escala de tempo dos efeitos de transporte nessa região é muito mais rápida que a escala de tempo da mudança de temperatura da partícula, ou seja, efeitos transitórios na fase gasosa não são considerados relevantes e o problema é quasi-estacionário. Dessa forma, a fase gasosa pode ser resolvida analiticamente e a evolução da gota integrada no tempo. Essa é a base para os modelos apresentados na Seção 2.2.1.

Diferentes abordagens existem para considerar o interior da partícula. Algumas são discutidas na Seção 2.2.2.

2.2.1 Modelos com Interior de Gota Homogêneo

O primeiro MEC foi desenvolvido por Fuchs [7] na década de 1960. Esse modelo considera apenas a difusão de massa de e para a gota, representando assim evaporação e condensação, obtendo uma taxa de variação mássica linearmente dependente da diferença de fração de combustível na superfície da gota e no ambiente [8].

Porém, o fluxo de massa provocado pelo fenômeno de evaporação torna relevante o transporte de massa por convecção, chamado de *Stefan flow* nesse contexto. Assim, o modelo de Stefan-Fuchs considera os transportes por condução e convecção para/da gota e por isso é muito mais utilizado que o modelo de Fuchs. O fluxo de massa nesse caso tem uma dependência logarítmica com a diferença de fração mássica do combustível [8, 32]. Esse modelo usa o chamado número de transporte de Spalding, introduzido em [29], que pode ser derivado da equação de temperatura ou de espécie, originando B_T e B_M .

Além das hipóteses já mencionadas de gota homogênea, esférica e regime quasi-estacionário, ambos modelos de Fuchs e de Stefan-Fuchs assumem também um ambiente quiescente e desconsideram a inércia térmica da gota. A hipótese de ambiente quiescente pode ser relaxada para ambientes levemente convectivos utilizando correlações experimentais, como as de Froessling e a de Ranz-Marshall. O efeito do *Stefan flow* nas correlações experimentais para o fluxo de calor e massa para é partícula é considerado no modelo de Abramzon-Sirignano [1] utilizando correções advindas da teoria de filme (*film theory*). Eles também relaxam a hipótese de número de Lewis unitário e de inércia térmica desprezível, fornecendo uma metodologia para calcular a fase transiente de aquecimento da gota.

Todos os modelos apresentados até agora são baseados na hipótese de equilíbrio termodinâmico na interface líquido-gás. Por outro lado, dois anos antes da correção de Abramzon e Sirignano, Bellan e Harstad [3] desenvolveram o modelo que inclui a condição de não equilíbrio termodinâmico na interface.

Miller, Harstad and Bellan [16] compararam os modelos de Abramzon-Sirignano e Bellan-Harstad e combinaram-os em uma única representação matemática. Por isso, é um dos modelos mais utilizados para a simulação turbulenta de sprays. [TODO: A sua comparação mostrou ...]

Todos os modelos apresentados até agora assumem que a fase líquida e a fase gasosa podem ser tratadas como contínuas. Desfazendo-se dessa hipótese, o modelo de Hertz-Knudsen-Langmuir [Langmuir] propõe uma formula para a taxa de variação da massa da gota baseada em cinética.

Sazhin [28] comparou o modelo Stefan-Fuchs (chamado de clássico) com o modelo de Abramzon-Sirignano e com correlações experimentais desenvolvidas para hidrocarbonetos alcanos. Ele obteve que o modelo de Stefan-Fuchs obtém as maiores taxas de evaporação, enquanto as correlações obtém as taxas mais conservadoras; o modelo de Abramzon-Sirignano obtendo valores intermediários, mais próximos das correlações experimentais que do modelo clássico.

Sacomano et. al [24] comparou os modelos de Abramzon-Sirignano e Bellan-Harstad usando a formulação de [16] em uma simulação com química detalhada no CHEM1D [30]. [TODO: *Resultado para modelo de evap.*] Também comparou diferentes modelos de pressão de vapor de combustível na superfície da gota. [TODO: *Mencionar necessidade de CC/Raul*] [TODO: *e resultado da comparação*].

A modelagem de MEC **multicomponente** está intrinsicamente ligada ao tópico da difusão diferencial. Essa modelagem vem sendo desenvolvida pelo grupo de pesquisa nos últimos anos.

Sacomano et. al [20] estuda a influência da difusão diferencial gasosa na oxi-combustão de metano diluído em vapor d'água. Foram comparados três modelos diferentes para o fluxo de calor e de espécie. O combustível nesse caso é gasoso, porém o vapor d'água pode se condensar em zonas frias ou evaporar em zonas quentes, constituindo uma fase dispersa. Para esta fase foi utilizado o modelo de Abramzon-Sirignano [1] na formulação de Miller [16].

No ano seguinte, uma formulação rigorosa e robusta para a troca de calor e massa em gotas multicomponente foi derivada a partir das equações fundamentais em [19]. Essa formulação inclui efeitos de difusão diferencial de forma detalhada, ao custo de exigir um solver iterativo para resolver um conjunto de equações não linear para o MEC. Incluiu também efeitos de mistura não ideal, utilizando modelos como [TODO: *modelos não ideal*]. O aspecto da difusão diferencial modelo baseou-se em trabalhos como [31,37].

Esse modelo foi testado em [22] para a combustão de névoa quiescente de etanol anidro em atmosfera úmida, formando uma chama lisa e laminar, no CHEM1D [30]. A consideração

dos efeitos inclusos nesse modelo se mostrou relevante até para o etanol anidro, já que o ar úmido pode condensar na gota de etanol.

Em [21], o modelo completo, chamado "Full-DD" (DD - *differential diffusion*), foi comparado com um modelo intermediário desenvolvido por Wang [35], chamado "Partial-DD" e com o modelo clássico de Stefan-Fuchs, para avaliar o compromisso fidelidade versus custo computacional. [TODO: *Encontrou-se*].

O modelo completo foi estendido mais ainda por [5] utilizando a equação de Maxwell-Stefan para a difusão, ao invés da difusão de Fick utilizada em todos os outros trabalhos mencionados até agora. Esse modelo baseou-se por exemplo em [31].

Por uma outra perspectiva, foco exclusivo foi dado em [4] para a equação da temperatura durante o processo de evaporação e condensação. Nesse trabalho, os autores mostram que a equação de temperatura é independente do modelo utilizado para a transferência de massa, podendo estes serem modelados de desacoplada. Constatou-se também que efeitos multicomponentes, enquanto mais complicados na transferência de massa por causa da difusão diferencial, na transferência de calor podem ser considerados diretamente por meio de calores específicos adequados.

Quanto ao aspecto **não ideal da mistura**, [19] 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 em uma única etapa, e infinitamente rápida, removem o problema da cinética 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 forma 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 multi-componente, 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 da 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, [TODO: ...] Uma perspectiva histórica dos esforço para relaxar as hipóteses realizadas no modelo inicial pode ser encontrada em [6], assim como um modelo considerando [TODO: ...]. 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.

O autor dessa proposta tem experiência com MCGI devido ao seu trabalho em combustão de partículas de pó de alumínio [meu MT]. Acredita-se que partículas de alumínio queimem em combustão homogênea gasosa, com metal vaporizado da gota de alumínio líquido [src]. Portanto, considerando apenas a etapa de combustão homegênea, o processo é essencialmente o mesmo que em gotas de combustível líquido.

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 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 [16] no modelo de Godsave-Spalding de combustão de gota isolada [29], 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 [HenningsJ2024MT], o qual já tem familiaridade com os modelos monocomponente Stefan-Fuchs [8] e Abramzon-Sirignano [1] e Godsave-Spalding [29].

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 que é 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 [10]. 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 [30], no qual já existe uma infraestrutura para simulações 1D laminares de spray [20, 26, 30, 33, 34] e com o qual o grupo de pesquisa já tem experiência [20–22, 24, 26].

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 pra 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 [18, 23, 25]. Para esse 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

Assim, são determinadas as seguintes tarefas para essa proposta:

No que tange ao aspecto multicomponente nas modelagens MEC/MCGI, delimitam-se as seguintes tarefas:

- T1** Estudo aprofundado sobre MEC e MCGI monocomponentes pré-existentes na literatura. Sobre o MEC, estão incluídos o estudo da derivação dos modelos de Abramzon-Sirignano [1], a formulação de Miller [16], [TODO: ...], No que tange a MCGIs, revisar o modelo de Godsave-Spalding [10, 29], estudar o artigo do Fachini [6], suas referências e citações, [TODO: ...]
- T2** Modelagem analítica de combustão de gota isolada monocomponente com modelo

avanzado de evaporação. Essa tarefa baseia-se na incorporação do modelo de Abramzon-Sirignano [1] ou da formulação de Miller [16] no modelo de Godsave-Spalding [29].

- T3** Estudo de modelos pre-existentes para a modelagem analítica de discretização do interior de gota monocomponente. São exemplos de literatura relevante para essa tarefa [\[src\]](#).
- T4** Avaliação da viabilidade de acoplamento de modelos monocomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota. Como os modelos de discretização de interior de gota podem envolver soluções numéricas, se será possível desenvolver uma solução analítica para esse problema. Uma solução acoplada numérica-analítica, interna e externamente gota, respectivamente, precisa ser robusta e computacionalmente eficiente para servir em aplicações CFD.
- T5** Estudo de modelos MEC e MCGI multicomponente pre-existentes na literatura. Exemplos de trabalhos relevantes de MEC multicomponente incluem [\[src\]](#).
- T6** Modelagem analítica de combustão de gota isolada multicomponente com modelo avançado de evaporação. Essa tarefa baseia-se na incorporação dos modelos de Sacomano [19] ou de Wang [\[WangC2012\]](#) no modelo de Godsave-Spalding [29].
- T7** Estudo de modelos pre-existentes para a modelagem analítica de discretização do interior de gota multicomponente. São exemplos de literatura relevante para essa tarefa [\[src\]](#).
- 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. São exemplos de literatura relevante para essa tarefa [2], [\[src\]](#).

- 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. No programa de Doutorado Direto do PPGEM na POLI-USP, é necessário cursar 9 Disciplinas, cada valendo 8 créditos. Como não é recomendado cursar mais de duas disciplinas por oferecimento, o qual é quadrimestral, as disciplinas serão cursadas ao longo de 5 quadrimestres, aproximadamente 2 anos. Algumas das disciplinas a serem cursadas já foram escolhidas e estão dispostas na Seção 4.2.
- T22** Escrever a dissertação. Estimou-se iniciar a escrita da dissertação nos últimos três semestres.

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

4.1 Cronograma de Execução

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

4.2 Disciplinas a serem cursadas

5 Forma de Análise dos Resultados

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

[9]

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] Artur Carvalho Santos, Fernando Luiz Sacomano Filho, and Aymeric Vie. The general formulation of the energy equation and the impact of enthalpy diffusion on multi-component droplet heat and mass transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 210:124172, 2023.
- [5] Artur Carvalho Santos, Fernando Luiz Sacomano Filho, and Aymeric Vié. A reference formulation for computing mass transfer rates of multi-component droplets undergoing general phase-change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 222:125185, 2024.
- [6] Fernando FACHINI FILHO. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. *Combustion and Flame*, 116(1):302–306, 1999.
- [7] N.A. Fuchs. *Evaporation and Droplet Growth in Gaseous Media*. Pergamon Press, 1959.
- [8] I. Glassman and R.A. Yetter. *Combustion*. Chemical, Petrochemical & Process. Elsevier Science, 2008.
- [9] João Vinícius Hennings de Lara. Resolvent analysis of the couette-poiseuille flow. Bachelor’s thesis, Technische Universität Darmstadt, 2023.

- [10] 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.
- [11] Patrick Jenny, Dirk Roekaerts, and Nijso Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(6):846–887, 2012.
- [12] K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley, 2005.
- [13] C.K. Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2006.
- [14] A. R. Masri. Turbulent combustion of sprays: From dilute to dense. *Combustion Science and Technology*, 188(10):1619–1639, 2016.
- [15] A.R. Masri. Challenges for turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(1):121–155, 2021.
- [16] 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.
- [17] Norbert Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 2000.
- [18] Fernando Luiz Sacomano Filho. *Novel approach toward the consistent simulation of turbulent spray flames using tabulated chemistry*. PhD thesis, Technische Universität Darmstadt, 2017.
- [19] 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.

- [20] 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.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] 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.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] 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.
- [28] Sergei S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2):162–214, 2006.
- [29] 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.
- [30] L.M.T. Sommers. *The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 1994.
- [31] S. Tonini and G.E. Cossali. A novel formulation of multi-component drop evaporation models for spray applications. *International Journal of Thermal Sciences*, 89:245–253, 2015.
- [32] S.R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. Number v. 1 in *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill, 2000.
- [33] 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.
- [34] J.A. van Oijen, A. Donini, R.J.M. Bastiaans, J.H.M. ten Thijsse 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.

- [35] Chenguang Wang, Anthony M. Dean, Huayang Zhu, and Robert J. Kee. The effects of multicomponent fuel droplet evaporation on the kinetics of strained opposed-flow diffusion flames. *Combustion and Flame*, 160(2):265–275, 2013.
- [36] F. A. Williams. *Combustion Theory*. CRC Press, 1985.
- [37] Lei Zhang and Song-Charng Kong. Multicomponent vaporization modeling of bio-oil and its mixtures with other fuels. *Fuel*, 95:471–480, 2012.
- [38] 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.