

# 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 . . . . .	6
2.2	Modelos de Evaporação e Condensação (MEC) . . . . .	8
2.2.1	Modelos com Interior de Gota Homogêneo . . . . .	8
2.2.2	Modelos para o Interior da Gota . . . . .	11
2.3	Modelos de Combustão Homogênea de Gota Isolada (MCGI) . . . . .	12
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 Excecução</b>	<b>16</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 [1]. Porém, combustíveis fósseis são extremamente difíceis de substituir em outros setores, especialmente os combustíveis líquidos. Estes possuem maior energia específica e densidade energética [2,3], assim adequados para aplicações de transporte, como no setor automotivo de cargas pesadas, naval e aeronáutico [1]. Combustíveis líquidos são importantes também para algumas indústrias como aço e cimento, para algumas termelétricas e até para máquinas de pequeno porte portáteis movidas a motor de combustão interna (MCI). Soma-se a isso uma análise histórica que indica que a transição para fontes renováveis se dará ao longo de décadas [1].

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) desenvolver novos combustíveis; (ii) desenvolver 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 e 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 transferência de calor e massa da gota (líquida) para a fase gasosa (HMT - *Heat and Mass Transfer*). Esse modelo rege, dentre outros aspectos, a taxa de vaporização do combustível das gotas do spray. É conhecido que essa modelagem tem enorme influência na chama [4], influenciando a

sua estrutura, temperatura, geometria e formação de poluentes.

Nesse sentido, revisando a literatura mais recente, nota-se a necessidade de maior desenvolvimento de 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, combustível de importância estratégica para o Brasil, 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**.

Em MECs, a evaporação da gota fornece vapor de combustível que alimenta a chama. Nessa abordagem, a chama não **está atrelada a nenhuma gota específica**, mas **queima** com o vapor fornecido pelo spray. Em contraste, é possível que as gotas entrem em combustão individualmente, com a evaporação de combustível alimentando uma frente de chama próxima e circundante à cada gota, a uma distância na mesma ordem de grandeza que o diâmetro da gota. Isso é chamado **combustão de gota isolada** e sua modelagem também constitui um modelo de HMT para as gotas. Revisando a literatura, constatou-se que não é muito claro quando a combustão de gota isolada ocorre [4, p. 8], nem o seu efeito **na chama em larga** escala. Sabe-se que a combustão de gota isolada é importante para a ignição do spray [5], mas não foram encontrados estudos sobre o seu impacto na estrutura da chama. Notou-se também a necessidade de desenvolver modelos de combustão de gota isolada (MCGI) capazes de representar corretamente diferentes combustíveis, ou seja, MCGIs com as mesmas capacidades que os MECs.

## 1.1 Objetivos

Com isso em vista, a presente tese visa estudar a viabilidade de 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. Gota com termodinâmica de mistura não-ideal;
3. Consideração dos feitos 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 a gota se encontra no cenário A ou B e escolher o modelo apropriado. 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. Os modelos desenvolvidos devem ser robustos e computacionalmente eficientes para aplicação em simulações CFD (*Computational Fluid Dynamics*). 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 [4]. 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 [4,6–9].

O foco deste trabalho é na modelagem das escalas da gota (escala micro), que será 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 transporte 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 em livro-texto, por exemplo [10–13].

Entretanto, utilizar essas equações dessa maneira 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 e à quantidade de gotas em um spray (na ordem de grandeza de milhares a milhões). 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 [14] é utilizado pelo grupo de pesquisa com esse propósito (por exemplo [15–19]). Utilizando a formulação **compressível** para baixos números de Mach, as equações de conservação de massa, espécie e entalpia em uma dimensão [15, 17, 20, 21] 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 sua velocidade de difusão,  $\dot{\omega}_i$  a sua 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.  $h_i$  é a entalpia absoluta da espécie  $i$ , cuja fração mássica é  $X_i$ , 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. É através desses termos que os efeitos das gotas, calculados usando os modelos de gota, são inseridos na fase gasosa.

### 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, por 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 [22]. Em alguns trabalhos, como [15], 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 [23] e aprimorada nos artigos seguintes [24, 25] 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 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~~). O subscrito  $d$  se refere à gota (*droplet* em inglês). 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 [4]

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

$$\frac{dm_d}{dt} = \sum_{k=1}^{n-1} \dot{m}_{d,k} \quad (5)$$

$$m_d \sum_{k=1}^{n-1} Y_{L,k} c_{L,k} \frac{dT_d}{dt} = \dot{q}_d \quad (6)$$

em que  $f$  representa as forças resultantes da fase gasosa na gota,  $g$  é a constante da gravidade.  $\dot{m}_{d,k}$  é a taxa de variação de massa da espécie  $k$  na gota e  $\dot{q}_d$  a taxa líquida de transferência 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  $\mathbf{f}$ ,  $\dot{m}_{d,k}$  e  $\dot{q}_d$  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 (*vd.* [4, 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 combustão externa com frente de chama, onde as gotas evaporam e fornecem vapor combustível para frente de chama, que não está acoplada a nenhuma gota individualmente. Ao contrário, a chama pode estar circundando uma única gota, na chamada combustão de gota isolada. O HMT que modela esse modo de combustão de spray é o 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 de um 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. Em aplicações CFD, geralmente uma solução analítica é utilizada para a descrição espacial da fase gasosa, o que resulta nas taxas de transferência de calor massa para a gota, e as propriedades da gota são integradas no tempo. Isso reduz o custo computacional e viabiliza o uso do modelo em simulações CFD na escala da chama de spray.

Essa separação 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 desconsiderados 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, **monocomponentes**, com interior homogêneo, estacionárias em ambiente quiescente. Nessa Seção, uma curta revisão dos MEC monocomponentes é apresentada, seguida pela apresentação do

modelo multicomponente desenvolvido em [26]. A seção se encerra com alguns comentários sobre termodinâmica de mistura não ideal.

O primeiro MEC foi desenvolvido por Fuchs [27] na década de 1960 e é também chamado de modelo de Maxwell. 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-Maxwell [28]. 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 [29]. A adaptação dessas correlações para uma gota com escoamento de Stefan foi considerada no modelo de Abramzon-Sirignano [30], 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 [31]. Ambos modelos de Abramzon-Sirignano e Bellan-Harstad foram combinados em uma única formulação matemática por Miller et. al em [32].

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 [26] considera tanto a gota quanto os gases ambientes como multicomponentes, assim como a difusão diferencial das espécies e um comportamento de mistura não ideal. Nesse modelo, a taxa de transferência de calor e de massa

na interface da gota são dados por

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

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

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.  $L_k$  é 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,  $D_k$  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 energia 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 [30]. A correção para utilizar as correlações empíricas para esses adimensionais (*c.f.* [19, eqs. (8) e (9)]), representadas aqui nos símbolos  $\text{Nu}^0$  e  $\text{Sh}^0$ , são

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

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

No cálculo de  $B_{M,k}$ , é necessário conhecer a fração mássica do vapor da espécie  $k$  na superfície da gota. Para misturas ideais, isso é feito pela Lei de Raoult, que dita  $X_{k,s} = P_{k,s}^v / P_s$ , onde  $P_{k,s}^v$

é a pressão de vapor e  $X_{k,s}$  é a fração molar de vapor da espécie  $k$ , relacionada a fração mássica pelas massas molares dos componentes da mistura gasosa [33]. A pressão de vapor pode ser obtida pela equação de Clapeyron, pela equação de Wagner ou pela equação de Antoine. Uma comparação dos diferentes modelos para a pressão de vapor foi realizado por [16].

Já em uma **mistura não ideal**, há um desvio da Lei de Raoult. A fração molar de vapor deve ser calculada por uma equação de estado não ideal ou através do cálculo dos coeficientes de atividade de cada espécie, o que representa a sua fugacidade [29]. Sacomano et. al em [26] utilizaram os métodos de Raoult (ideal) e UNIFAC (não-ideal) para calcular os coeficientes de fugacidade, enquanto Sacomano et. al em [19] utilizaram o método de van Laar. Zanutto et. al [34] utilizaram o método UNIFAC para os coeficientes de atividade da fase líquida e a equação de estado real Virial para a fase gasosa.

### 2.2.2 Modelos para o Interior da Gota

Em todos os modelos apresentados até agora, a temperatura e composição do interior da gota foram considerados ou (1) uniforme e contante (modelos que não representam o período de aquecimento da gota); (2) uniforme e variando no tempo (modelos com condutividade térmica e difusividade mássica da fase líquida infinitas). Esses são os dois primeiros graus de complexidade da representação do interior da gota. Os próximos são: (3) modelos com difusividade térmica e mássica finitas, mas sem recirculação; (4) modelos que consideram a recirculação em um fator de correção para as difusividades térmica e mássica (chamados modelos de condutividade/difusividade efetiva); (5) modelos que descrevem a recirculação dentro da gota usando dinâmica de vórtices (modelos de vórtice); (6) modelos que resolvem o interior da gota (Navier-Stokes completo, i.e. DNS). [35]

As abordagens (1)-(4) são as mais usadas para aplicação CFD por serem robustas e computacionalmente baratas. A abordagem (5) é por vezes utilizada para desenvolver um modelo de condutividade/difusividade efetiva, como fizeram Abramzon e Sirignano em [30]. Já a abordagem (6) só é viável computacionalmente na escala de uma (ou poucas) gotas, de modo que é relevante para estudar a modelagem de diferentes fenômenos físicos, assim como para fornecer material para a validação de modelos de gotas mais simples.

## 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~~ permitem 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 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 e 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 encontrados na literatura consideram muito menos efeitos que os MECs.

O modelo clássico foi desenvolvido por Godsave-Spalding, baseado no MEC de Stefan-Maxwell (exemplo, livros-texto [12, 13, 36]). 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  $\dot{m}_{d,f}$  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 oxidante – 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, e  $\dot{q}_{\text{net}}$  é a taxa líquida de calor que provoca o aquecimento da gota. 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  $\dot{q}_{\text{net}}$ . Esse termo é negligenciado por alguns livro-texto [10, 13], o que a assumir que a gota tem temperatura constante. Essa temperatura é a temperatura de equilíbrio quasi-estacionário, de modo que negligenciar a fase de aquecimento da partícula equivale a assumir que esta possui inércia térmica desprezível (exemplo [13, 36]). Esses modelos que não incluem, portanto, a capacidade de representar o período de aquecimento da gota. Outros, sugerem modelos conceituais como o modelo de "casca de cebola" (exemplo [36, p. 385]), porém o autor dessa proposta mostrou em [37] que esse modelo superestima absurdamente o período de aquecimento da gota. No mesmo trabalho, o autor propõe utilizar  $\dot{q}_{\text{net}}$  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 [30], e feito pelo modelo de Sacomano et. al [26] na equação (9) (vide o termo  $\dot{q}_d$ ) para o caso de MECs. Turns [36] 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 [38], que também desenvolveu um modelo considerando a dependência da temperatura nos coeficientes de transporte e número de Lewis não unitário. Um exemplo desse esforço é [39], 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 [40, p. 7]. Alguns trabalhos nessa área se destacam pela sua descrição multicomponente. Zhang et. al [41, 42], por exemplo, obtiveram uma solução analítica para um modelo extedido de Godsave-Spalding, incluindo um produto da reação de fase gasosa. Esse produto, alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) 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 [43]. Isso é relevante para o etanol por exemplo, cuja combustão produz vapor que pode voltar a se condensar sobre a gota.

### 2.3.1 Modelos de Modo de Combustão de Gotas

Já foram discutidos, até o momento, a combustão de spray no modo externo, usando um MEC, e a combustão de gota isolada, usando um MCGI. Existem, entretanto, outros modos de combustão de spray. Não há consenso na literatura sobre como classificar os diferentes comportamentos, nem como prevê-los. Um modelo bem recebido é o modelo de Chiu e Liu [44,45], que cria o parâmetro de combustão de grupo  $G \propto N^{(2/3)}S^{-1}$ , em que  $N$  é o número de gotas e  $S \propto l/D$  é o espaçamento médio normalizado pelo o diâmetro médio das gotas. Com  $G$ , os autores delimitam os diferentes modos de combustão: combustão de gota isolada, combustão de grupo interna, combustão de grupo externa e combustão em frente externa.

Diferentes modos de combustão de spray, incluindo a combustão de gota isolada, já foram observados em experimentos (e.g. [46–49]) e em simulações na escala da chama DNS (e.g. [50]) e LES (e.g. [51]). Revisões sobre combustão em grupo podem ser encontradas em [52,53].

Como mencionado também, a combustão de gota isolada está relacionada ao fenômeno de ignição de sprays [5]. Dessa forma, trabalhos sobre esse tema são relevantes para identificar modelos de modos de combustão de gotas. Por exemplo a revisão [54] e os modelos [55,56].

## 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 com 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 novos modelos 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, consideração do interior da gota e o estudo de quando ocorre a combustão de gota isolada. Vários modelos nos diferentes temas compreendidos por essa proposta já foram apresentados nas Seções 2.2 e 2.3. 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, por exemplo, a viabilidade de transformar MECs analíticos em MCGIs com as mesmas capacidades. Para tanto, é necessário primeiro, o bom entendimento das hipóteses e derivações dos modelos já existentes, 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 [37] e com modelagem de fenômenos de transporte [57–60].

**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 da evolução temporal de uma única gota. Esse teste é essencial para compreender as capacidades preditivas do modelo e já possui valor científico. Também é necessário 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 ou de modelo sejam identificados e corrigidos logo no início do processo de desenvolvimento.

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 [37]. Ademais, a simplicidade da linguagem facilita a implementação em código e a correção de erros, o que facilita a implementação posterior 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 [14], onde já existe uma infraestrutura para simulações 1D laminares de spray (v. [14, 15, 17, 20, 21]) e com o qual o grupo de pesquisa já tem experiência (v. [15–19]).

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.

**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 [61], 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 [23–25]. 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-existent 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

O cronograma de execução para essas tarefas ao longo do Doutorado pode ser encontrado na Figura 1. As tarefas são explicadas a seguir.

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

As tarefas para essa proposta são:

- 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 modos de combustão de gotas de spray, focando 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.

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).

## 5 Forma de Análise dos Resultados

A forma de análise de resultados naturalmente será diferente para cada etapa de trabalho apresentada na Seção 3. Considerando apenas os resultados numéricos, i.e. das de simulações, os primeiros resultados serão obtidos após o teste do modelo isolado em ambiente Python.

A simulação da evolução temporal de um modelo de gota, MEC ou MCGI, e a análise desses resultados é uma área que o autor da proposta já tem experiência [37]. Nessa análise, são relevantes parâmetros como o tempo de vida gota, a dependência dos resultados das condições iniciais da gota e do ambiente e a dependência dos submodelos utilizados, como o de pressão de vapor ou de fração molar de vapor.

No contexto de avaliação isolada de MECs e MCGIs, é de extrema relevância a comparação tanto com resultados experimentais quanto como modelos resolvidos. Para MECs, coletou-se, por exemplo, os trabalhos experimentais [62–66], focados principalmente na influência da turbulência na evaporação. Para MCGIs, coletou-se os trabalhos experimentais na escala da gota [46, 47, 67–71] e os trabalhos que resolvem o modelo da gota [67, 70, 72–75].

Já nas simulações no CHEM1D, a análise dos resultados se dará baseada na experiência do grupo de pesquisa, assim como na comparação com MECs já desenvolvidos pelo grupo e testados nesse ambiente [15–19]. Nessas simulações, são relevantes novamente a influência das condições iniciais e ambientais na frente de chama, em particular na velocidade de chama laminar.

Nas simulações de larga, também será valiosa a experiência e os resultados anteriores do

grupo de pesquisa [24, 25]. Nessas simulações, é relevante estudar a influência do modo de combustão de gota isolada na estrutura da chama, como proposto nos objetivos do trabalho.

## Referências

- [1] A.R. Masri. Challenges for turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(1):121–155, 2021.
- [2] 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.
- [3] Philippe Julien and Jeffrey M. Bergthorson. Enabling the metal fuel economy: green recycling of metal fuels. *Sustainable Energy Fuels*, 1:615–625, 2017.
- [4] Patrick Jenny, Dirk Roekaerts, and Nijso Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(6):846–887, 2012.
- [5] Suresh K. Aggarwal. Single droplet ignition: Theoretical analyses and experimental findings. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45:79–107, 2014.
- [6] A. R. Masri. Turbulent combustion of sprays: From dilute to dense. *Combustion Science and Technology*, 188(10):1619–1639, 2016.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] X. Jiang, G.A. Siamas, K. Jagus, and T.G. Karayiannis. Physical modelling and advanced simulations of gas-liquid two-phase jet flows in atomization and sprays. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(2):131–167, 2010.
- [10] F. A. Williams. *Combustion Theory*. CRC Press, 1985.
- [11] K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. Wiley, 2005.

- [12] C.K. Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2006.
- [13] I. Glassman and R.A. Yetter. *Combustion*. Chemical, Petrochemical & Process. Elsevier Science, 2008.
- [14] L.M.T. Sommers. *The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 1994.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.



- [21] J.A. van Oijen, A. Donini, R.J.M. Bastiaans, J.H.M. ten Thijsse Boonkcamp, 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.
- [22] Norbert Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 2000.
- [23] Fernando Luiz Sacomano Filho. *Novel approach toward the consistent simulation of turbulent spray flames using tabulated chemistry*. PhD thesis, Technische Universität Darmstadt, 2017.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] N.A. Fuchs. *Evaporation and Droplet Growth in Gaseous Media*. Pergamon Press, 1959.
- [28] 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.
- [29] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. J. Wiley, 2002.

- [30] 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.
- [31] 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.
- [32] 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.
- [33] Norbert Peters. Combustion theory. CEFRC Summer School, 07 2010.
- [34] C.P. Zanutto, E.E. Paladino, and T.C. Nazareth. Heating and evaporation of ethanol/isooctane droplets considering non-ideal mixtures and finite rate transfer. *Fuel*, 256:115811, 2019.
- [35] Sergei S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2):162–214, 2006.
- [36] S.R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. Number v. 1 in *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill, 2000.
- [37] 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.
- [38] Fernando FACHINI FILHO. An analytical solution for the quasi-steady droplet combustion. *Combustion and Flame*, 116(1):302–306, 1999.
- [39] S. Ulzama and E. Specht. An analytical study of droplet combustion under microgravity: Quasi-steady transient approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2):2301–2308, 2007.
- [40] 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.

- [41] 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.
- [42] 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.
- [43] 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.
- [44] H. H. CHIU and T. M. LIU and. Group combustion of liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 17(3-4):127–142, 1977.
- [45] H.H. Chiu, H.Y. Kim, and E.J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. *Symposium (International) on Combustion*, 19(1):971–980, 1982. Nineteenth Symposium (International) on Combustion.
- [46] Gung Chen and Alessandro Gomez. Dilute laminar spray diffusion flames near the transition from group combustion to individual droplet burning. *Combustion and Flame*, 110(3):392–404, 1997.
- [47] Sebastien Candel, Francois Lacas, Nasser Darabiha, and Juan-Carlos Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Science and Technology*, 11(1):1–18, 1999.
- [48] G. Singh, M. Juddoo, A. Kourmatzis, M.J. Dunn, and A.R. Masri. Heat release zones in turbulent, moderately dense spray flames of ethanol and biodiesel. *Combustion and Flame*, 220:298–311, 2020.
- [49] Hengyi Zhou, Xingxian Li, and Yu Cheng Liu. A laminar spray group combustion experiment (lsgce) with in situ image diagnostic methods and image analysis algorithms. *Review of Scientific Instruments*, 95(8):085107, 08 2024.

- [50] Giulio Borghesi, Epaminondas Mastorakos, and R. Stewart Cant. Complex chemistry dns of n-heptane spray autoignition at high pressure and intermediate temperature conditions. *Combustion and Flame*, 160(7):1254–1275, 2013.
- [51] Damien Paulhiac, Bénédicte Cuenot, Eleonore Riber, Lucas Esclapez, and Stéphane Richard. Analysis of the spray flame structure in a lab-scale burner using large eddy simulation and discrete particle simulation. *Combustion and Flame*, 212:25–38, 2020.
- [52] Kalyan Annamalai and William Ryan. Interactive processes in gasification and combustion. part i: Liquid drop arrays and clouds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 18(3):221–295, 1992.
- [53] William A. Sirignano. Advances in droplet array combustion theory and modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 42:54–86, 2014.
- [54] Yu Zhang, Qianchen Peng, Chunmei Wang, Yuhang Huang, Pei Zhou, Yejian Qian, Bin Ye, T.M. Indra Mahlia, and Hwai Chyuan Ong. State-of-the-art modeling of two-stage auto-ignition: Turbulence, evaporation and chemistry effects. *Energy Conversion and Management*, 291:117269, 2023.
- [55] Hengyi Zhou, Wenyi Zhang, and Yu Cheng Liu. A cell model analysis for droplets inside non-dilute n-heptane droplet clouds near autoignition limit. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 175:121189, 2021.
- [56] Hengyi Zhou and Yu Cheng Liu. External group combustion of droplet clouds under two-stage autoignition conditions. *Combustion and Flame*, 234:111689, 2021.
- [57] João Vinícius Hennings de Lara. Resolvent analysis of the couette-poiseuille flow. Bachelor’s thesis, Technische Universität Darmstadt, 2023.
- [58] 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.

- [59] S. Tonini and G.E. Cossali. A multi-component drop evaporation model based on analytical solution of stefan-maxwell equations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 92:184–189, 2016.
- [60] L. De Broeck, S. Görtz, P. Alter, J.V. Hennings de Lara, and M. Oberlack. Instability damping and amplification of compressible boundary layers via acoustic wall impedance. *Journal of Fluid Mechanics*, 1007:A46, 2025.
- [61] H. Jasak. *Error Analysis And Estimation For The Finite Volume Method With Applications To Fluid Flows*. PhD thesis, University of London and Imperial College, 1996.
- [62] Madjid Birouk and Iskender Gökalp. Current status of droplet evaporation in turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(4):408–423, 2006.
- [63] Ujas Patel and Srikrishna Sahu. Effect of air turbulence and fuel composition on bi-component droplet evaporation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 141:757–768, 2019.
- [64] Deniz Kaya Eyice, Mehmet Karaca, Fabien Halter, İskender Gökalp, and Christian Chauveau. Effect of flame characteristics on an isolated ethanol droplet evaporating through stagnation methane/air flames: An experimental and numerical study. *Combustion and Flame*, 265:113465, 2024.
- [65] Arash Arabkhalaj, Cameron Verwey, and Madjid Birouk. Background vapor effect on droplet evaporation in a turbulent flow at elevated pressure. *Proceedings of the Combustion Institute*, 40(1):105523, 2024.
- [66] C. Maqua, G. Castanet, and F. Lemoine. Bicomponent droplets evaporation: Temperature measurements and modelling. *Fuel*, 87(13):2932–2942, 2008.
- [67] S.Y. Cho, M.Y. Choi, and F.L. Dryer. Extinction of a free methanol droplet in microgravity. *Symposium (International) on Combustion*, 23(1):1611–1617, 1991. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion.

- [68] Guangwen Xu, Masiki Ikegami, Senji Honma, Kouji Ikeda, Xiaoxun Ma, Hiroshi Nagaishi, Daniel L. Dietrich, and Peter M. Struk. Inverse influence of initial diameter on droplet burning rate in cold and hot ambiances: a thermal action of flame in balance with heat loss. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(7):1155–1169, 2003.
- [69] Madjid Birouk, Christian Chauveau, and Iskender Gökalp. Turbulence effects on the combustion of single hydrocarbon droplets. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1):1015–1021, 2000.
- [70] A. Cuoci, M. Mehl, G. Buzzi-Ferraris, T. Faravelli, D. Manca, and E. Ranzi. Autoignition and burning rates of fuel droplets under microgravity. *Combustion and Flame*, 143(3):211–226, 2005.
- [71] Hendrix Y. Setyawan, Mingming Zhu, Zhezi Zhang, and Dongke Zhang. An experimental study of effect of water on ignition and combustion characteristics of single droplets of glycerol. *Energy Procedia*, 75:578–583, 2015. Clean, Efficient and Affordable Energy for a Sustainable Future: The 7th International Conference on Applied Energy (ICAE2015).
- [72] R. Stauch, S. Lipp, and U. Maas. Detailed numerical simulations of the autoignition of single n-heptane droplets in air. *Combustion and Flame*, 145(3):533–542, 2006.
- [73] Andrei Kazakov, Jordan Conley, and Frederick L. Dryer. Detailed modeling of an isolated, ethanol droplet combustion under microgravity conditions. *Combustion and Flame*, 134(4):301–314, 2003.
- [74] Anthony J Marchese and Frederick L Dryer. The effect of liquid mass transport on the combustion and extinction of bicomponent droplets of methanol and water. *Combustion and Flame*, 105(1):104–122, 1996.
- [75] Weiye Wang and F.N. Egolfopoulos. Preferential vaporization effects on the ignition of multi-component droplets. *Proceedings of the Combustion Institute*, 40(1):105639, 2024.