

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	9
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	14
2.3	Modelos de Combustão de Gota Isolada (MCGI)	14
2.3.1	Modelos de Modo de Combustão de Gotas	14
3	Metodologia	14
4	Plano de Trabalho	15
4.1	Cronograma de Excecução	16
4.2	Disciplinas a serem cursadas	16
5	Forma de Análise dos Resultados	16
	Referências	17

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 (MASRI, 2021). Além do setor de transporte, combustíveis líquidos são importantes para algumas indústrias como aço e cimento, para algumas termoelétricas e até para máquinas de pequeno porte, portáteis, movidas a motor de combustão interna (MCI). Por fim, uma análise histórica indica que a transição para fontes renováveis se dará ao longo de décadas (MASRI, 2021).

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 (JENNY; ROEKARTS; BEISHUIZEN, 2012), 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 simples 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 (AGGARWAL, 2014), 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 (JENNY; ROEKAERTS; BEISHUIZEN, 2012). 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 (JENNY; ROEKAERTS; BEISHUIZEN, 2012; MASRI, 2016; SANCHEZ; URZAY; LINAN, 2015; ZHOU et al., 2021).

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 con-

junto de equações podem ser encontradas por exemplo nos livro-texto (WILLIAMS, 1985; KUO, 2005; LAW, 2006).

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 a partícula é chamada de *point particle approximation*. As equações de transporte resultantes estão descritas abaixo.

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

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

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

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. A notação segue o padrão utilizado por (JENNY; ROEKAERTS; BEISHUIZEN, 2012), consulte-o para mais explicações.

O grupo de pesquisa tem experiência com simulações de vórtices de larga escala (LES - *Large Eddy Simulations*), nas quais as equações de transporte são decompostas entre sub-escala e escala, $\psi = \tilde{\psi} + \psi''$, e filtradas de acordo com $\tilde{\psi} = \overline{\rho\psi}/\bar{\rho}$, em que ψ corresponde a uma variável qualquer. Em uma formulação de densidade variável para números de Mach

baixos, as equações de continuidade e de quantidade de movimento são

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

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

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 (Sacomano Filho, 2017; Sacomano Filho et al., 2017; Sacomano Filho et al., 2020) 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*). **[TODO: Explicar o que cada um fez, baseado no áu**

Essas são as simulações mais completas de combustão turbulenta de sprays, que podem ser utilizadas em cenário reais, inclusive para simular cenários realizados também em experimentos, para validação [\[src\]](#). Entretanto, em alguns aspectos 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 (Sacomano Filho et al., 2018; Sacomano Filho et al., 2019) no software CHEM1D (SOMMERS, 1994). Nesse caso, as equações de conservação de massa, espécie e entalpia são (Sacomano Filho et al., 2018; Sacomano Filho et al., 2021; ??)

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

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

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

em que \dot{S}_V^L e \dot{S}_h^L são os termos de acoplamento de fase de massa e entalpia. Sacomano Filho et al. (2018) resolvem a química com o método FGM para explorar as capacidades e

limitações desse método. Id., 2019 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* (PETERS, 2000). Entretanto, em Sacomano Filho et al. (2018) usam três variáveis de controle, efeitos são considerados não adiabáticos na tabulação. São elas a fração de mistura z e a variável de progresso da reação Y_{RPV} , definida como $Y_{RPV} = Y_{CO_2}/M_{CO_2} + Y_{H_2O}/2.5M_{H_2O} + Y_{CO}/1.5M_{CO}$, e a entalpia h . As equações de transporte para as variáveis de controle tem a forma da equação abaixo, onde $\psi \in \{z, Y_{RPV}, h\}$.

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

Já nos trabalhos LES com espessamento artificial de chama (ATF), como (Sacomano Filho, 2017; Sacomano Filho et al., 2017; Sacomano Filho et al., 2020), o tabelamento FGM utiliza apenas duas variáveis de controle, z e Y_{RPV} . Além disso, a equação de transporte dessas variáveis é modificada para o espessamento da chama, tendo a forma dada pela

equação abaixo, com $\psi \in \{z, Y_{RPV}\}$.

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

2.2 Modelos de Evaporação e Condensação (MEC)

Na escala 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 modeladas com um resultado analítico. 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 (veja [Resolved evap small scale.]). 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, 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 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 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

O primeiro MEC foi desenvolvido por Fuchs (1959) na década de 1960. Esse modelo considera apenas a difusão de massa de e para a gota, representando assim evaporação e condensação. Por considerar apenas o transporte por difusão, a taxa de variação da massa de da gota,

desse modelo depende linearmente da diferença de fração mássica da espécie na superfície e no ambiente.

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. (GLASSMAN; YETTER, 2008; TURNS, 2000) Esse modelo usa o chamado número de transporte de Spalding, introduzido por [Spalding], que pode ser derivado da equação de temperatura ou de espécie, originando B_T e B_M .

Ambos modelos de Fuchs e de Stefan-Fuchs assumem gotas esféricas, num ambiente quiescente, em regime quasi-estacionário, considerando o interior da gota com temperatura e concentração uniforme e desconsiderando a inércia térmica da gota. A hipótese quiescente pode ser relaxada para ambientes levemente convectivos utilizando correlações experimentais, como as de Froessling e a de Ranz-Marshall. A última hipótese, por sua vez, significa que a parte térmica do modelo não é capaz de prever o período de aquecimento da gota, antes da evaporação. Isso altera significativamente a chama em larga escala, já que, dependendo do combustível e do tamanho da partícula, o período de aquecimento da gota pode ser comparável ao tempo de combustão [source?] [Q: burn time = tempo de combustão?]

Por esse motivo, Ambrazon e Sirignano (ABRAMZON; SIRIGNANO, 1989) melhoraram o modelo corrigindo o número de transporte de temperatura de Spalding com o fluxo líquido de calor para a gota, permitindo simular o período de aquecimento da gota. Atualizaram também a correlação entre os números de transporte de Spalding para incluir números de Lewis não unitários. Também utilizam a teoria de filme (*film theory*) para considerar os efeitos do *Stefan flow* na camada limite da partícula, corrigindo o uso das expressões experimentais para um ambiente convectivo.

Todos os modelos apresentados até agora são baseados na hipótese de equilíbrio termo-

dinâmico na interface líquido-gás. Por outro lado, dois anos antes, Bellan e Harstad (BELLAN; HARSTAD, 1987) desenvolveram o modelo que inclui a condição de não equilíbrio termodinâmico na interface.

Miller, Harstad e Bellan (1998) compararam os modelos de Abramzon-Sirignano e Bellan-Harstad e combinou-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 (2006) 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 Filho et al. (2019) comparou os modelos de AS e Miller usando a formulação de Miller1999 [TODO: *na situação ...*]. Também comparou diferentes modelos de pressão de vapor de combustível na superfície da gota. [TODO: *Ele encontrou ...*]

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 Filho et al. (2021) estuda a influência da difusão diferencial gasosa na oxidação 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 (ABRAMZON;

SIRIGNANO, 1989) na formulação de Miller (MILLER; HARSTAD; BELLAN, 1998).

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 (Sacomano Filho et al., 2022). 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 (TONINI; COSSALI, 2015; ZHANG; KONG, 2012).

Esse modelo foi testado em (Sacomano Filho et al., 2024) para a combustão de névoa quiescente de etanol anidro em atmosfera úmida, formando uma chama lisa e laminar, no CHEM1D (SOMMERS, 1994). 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 (Sacomano Filho et al., 2025), o modelo completo, chamado "Full-DD" (DD - *differential diffusion*), foi comparado com um modelo intermediário desenvolvido por Wang (WANG et al., 2013), 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 (Carvalho Santos; Sacomano Filho; VIÉ, 2024) 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 (TONINI; COSSALI, 2015).

Por uma outra perspectiva, foco exclusivo foi dado em (Carvalho Santos; Sacomano Filho; VIE, 2023) 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**, Sacomano Filho et al. (2022) usou os métodos [TODO: ...]

[WangW2024] e [ZanuttoC2019].

2.2.2 Modelos para o Interior da Gota

2.3 Modelos de Combustão de Gota Isolada (MCGI)

2.3.1 Modelos de Modo de Combustão de Gotas

3 Metodologia

No contexto de desenvolvimento de modelos analíticos de HMT, o projeto visa incluir os seguintes aspectos: (i) modelo de combustão de gota isolada; (ii) aspecto multicomponente; (iii) modelagem do interior da gota. Para atingir esse objetivo, o desenvolvimento será gradual e dividido em etapas. Cada modelo analítico será desenvolvido sozinho, em seguida integrado com as outras capacidades. Para cada um dos três aspectos listados acima, serão realizadas as seguintes etapas:

- A. Busca e análise de modelos já existentes na literatura;
- B. Desenvolvimento analítico do novo modelo;
- C. Implementação do novo modelo no CHEM1D;
- D. Simulação e análise dos resultados, incluindo avaliação de desempenho do modelo.

A cada nova capacidade adicionada ao modelo, as anteriores serão mantidas, de modo que este se torna cada vez mais complexo e abrangente. Após desenvolver, implementar e testar os modelos no CHEM1D, prevê-se a implementação do modelo no OpenFOAM. Desse modo, faz-se necessárias as seguintes etapas:

- E. Estudar como implementar modelos no CHEM1D;

F. Estudar C++;

G. Estudar como implementar modelos no OpenFOAM;

4 Plano de Trabalho

Assim, podem ser determinadas as seguintes etapas do projeto:

1. Modelagem analítica de combustão de gota isolada monocomponente com modelo avançado de evaporação;
2. Modelagem analítica de discretização do interior de gota monocomponente;
3. Acoplamento de modelos monocomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota;
4. Modelagem analítica de combustão de gota isolada multicomponente com modelo avançado de evaporação;

Nota: Deve-se diferenciar aqui diferentes possibilidades: como gota bicomponente sendo apenas um o combustível, exemplo etanol anidro, e gota bi- ou multicomponente com mais de um componente volátil e combustível.

Adendo: Essa etapa pode eventualmente ser dividida em mais de uma etapa, devido aos diferentes cenários possíveis.

5. Modelagem analítica de discretização do interior de gota multicomponente;
6. Acoplamento de modelos multicomponente de combustão de gota isolada com discretização no interior da gota;
7. Estudar modelos de determinação de probabilidade de gotas entrarem no modo de combustão isolada;

8. Implementar novos modelos no CHEM1D;
9. Implementar novos modelos no OpenFOAM;
10. Estudar como novo modelo se encaixa no contexto de interação gota-chama;
11. Estudo de chamas turbulentas com todos novos modelos acoplados.

4.1 Cronograma de Execução

Tabela com cronograma.

4.2 Disciplinas a serem cursadas

5 Forma de Análise dos Resultados

Referências

ABRAMZON, B.; SIRIGNANO, W. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 32, n. 9, p. 1605–1618, 1989. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931089900434>.

AGGARWAL, S. K. Single droplet ignition: Theoretical analyses and experimental findings. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 45, p. 79–107, 2014. ISSN 0360-1285. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128514000276>.

BELLAN, J.; HARSTAD, K. Analysis of the convective evaporation of nondilute clusters of drops. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 30, n. 1, p. 125–136, 1987. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0017931087900652>.

Carvalho Santos, A.; Sacomano Filho, F. L.; VIE, A. 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*, v. 210, p. 124172, 2023. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931023003253>.

Carvalho Santos, A.; Sacomano Filho, F. L.; VIÉ, A. A reference formulation for computing mass transfer rates of multi-component droplets undergoing general phase-change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 222, p. 125185, 2024. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931024000176>.

FUCHS, N. *Evaporation and Droplet Growth in Gaseous Media*. Pergamon Press, 1959. ISBN 9780080092416. Disponível em: <https://books.google.de/books?id=fxvQAAAAMAAJ>.

GLASSMAN, I.; YETTER, R. *Combustion*. Elsevier Science, 2008. (Chemical, Petrochemical & Process). ISBN 9780120885732. Disponível em: <https://books.google.de/books?id=XGILM-Q2JdsC>.

JENNY, P.; ROEKAERTS, D.; BEISHUIZEN, N. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 38, n. 6, p. 846–887, 2012. ISSN 0360-1285. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128512000445>.

KUO, K. *Principles of Combustion*. Wiley, 2005. ISBN 9780471046899. Disponível em: <https://books.google.de/books?id=jAYoAQAAMAAJ>.

LAW, C. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2006. ISBN 9780511573590. Disponível em: <https://books.google.de/books?id=BljdsWEACAAJ>.

MASRI, A. Challenges for turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 38, n. 1, p. 121–155, 2021. ISSN 1540-7489. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748920306350>.

MASRI, A. R. Turbulent combustion of sprays: From dilute to dense. *Combustion Science and Technology*, Taylor & Francis, v. 188, n. 10, p. 1619–1639, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/00102202.2016.1198788>.

MILLER, R.; HARSTAD, K.; BELLAN, J. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 24, n. 6, p. 1025–1055, 1998. ISSN 0301-9322. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932298000287>.

PETERS, N. *Turbulent Combustion*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. (Cambridge Monographs on Mechanics).

Sacomano Filho, F. L. *Novel approach toward the consistent simulation of turbulent spray flames using tabulated chemistry*. Tese (Doutorado) — Technische Universität Darmstadt, 2017.

Sacomano Filho, F. L. et al. A new robust modeling strategy for multi-component droplet heat and mass transfer in general ambient conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 194, p. 123102, 2022. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931022005749>.

Sacomano Filho, F. L. et al. Impact of multi-component description of hydrophilic fuel droplets in propagating spray flames. *Combustion and Flame*, v. 263, p. 113415, 2024. ISSN 0010-2180. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001021802400124X>.

Sacomano Filho, F. L. et al. Investigations of the differential diffusion modeling for hydrophilic fuel vapor in propagating spray flames. *Fuel*, v. 379, p. 133056, 2025. ISSN 0016-2361. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236124022051>.

Sacomano Filho, F. L. et al. On the interaction between turbulence and ethanol spray combustion using a dynamic wrinkling model coupled with tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, v. 215, p. 203–220, 2020. ISSN 0010-2180. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001021802030050X>.

Sacomano Filho, F. L. et al. A novel strategy to accurately represent the carrier gas properties of droplets evaporating in a combustion environment. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 137, p. 1141–1153, 2019. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931018357776>.

Sacomano Filho, F. L. et al. 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*, v. 184, p. 68–89, 2017. ISSN 0010-2180. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218017302067>.

Sacomano Filho, F. L. et al. Effects of reaction mechanisms and differential diffusion in oxy-fuel combustion including liquid water dilution. *Fluids*, v. 6, n. 2, 2021. ISSN 2311-5521. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2311-5521/6/2/47>.

Sacomano Filho, F. L. et al. Numerical analyses of laminar flames propagating in droplet mists using detailed and tabulated chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, Taylor & Francis, v. 22, n. 5, p. 998–1032, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/13647830.2018.1470332>.

SANCHEZ, A. L.; URZAY, J.; LINAN, A. The role of separation of scales in the description of spray combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. 35, n. 2, p. 1549–1577, 2015. ISSN 1540-7489. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748914004027>.

SAZHIN, S. S. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 32, n. 2, p. 162–214, 2006. ISSN 0360-1285. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128505000535>.

SOMMERS, L. *The simulation of flat flames with detailed and reduced chemical models*. Tese (Doutorado) — Technische Universitt Eindhoven, 1994. Disponível em: <https://pure.tue.nl/ws/portalfiles/portal/1568899/420430.pdf>.

TONINI, S.; COSSALI, G. A novel formulation of multi-component drop evaporation models for spray applications. *International Journal of Thermal Sciences*, v. 89, p. 245–253, 2015. ISSN 1290-0729. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1290072914003007>.

URNS, S. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill, 2000. (An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, v. 1). ISBN 9780072300987. Disponível em: <https://books.google.de/books?id=TxMoAQAAMAAJ>.

WANG, C. et al. The effects of multicomponent fuel droplet evaporation on the kinetics of strained opposed-flow diffusion flames. *Combustion and Flame*, v. 160, n. 2, p. 265–275, 2013. ISSN 0010-2180. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010218012003008>.

WILLIAMS, F. A. *Combustion Theory*. [S.l.]: CRC Press, 1985. ISBN 9780429494055.

ZHANG, L.; KONG, S.-C. Multicomponent vaporization modeling of bio-oil and its mixtures with other fuels. *Fuel*, v. 95, p. 471–480, 2012. ISSN 0016-2361. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236111007630>.

ZHOU, L. et al. Spray-turbulence-chemistry interactions under engine-like conditions. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 86, p. 100939, 2021. ISSN 0360-1285. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S036012852100037X>.