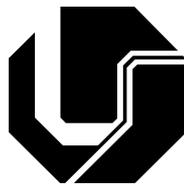


LUCAS FERNANDO RIBEIRO CHAVES

**ANÁLISE DE SENSIBILIDADE E PROPAGAÇÃO DE
INCERTEZAS EM EVAPORAÇÃO DE GOTAS**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

2021

LUCAS FERNANDO RIBEIRO CHAVES

**ANÁLISE DE SENSIBILIDADE E PROPAGAÇÃO DE INCERTEZAS
EM EVAPORAÇÃO DE GOTAS**

Dissertação apresentada ao Programa Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica de Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto

Co-orientador: Prof. Dr. Americo Barbosa da Cunha Junior

Uberlândia- MG

2021

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

C512 Chaves, Lucas Fernando Ribeiro, 1990-
2021 Análise de sensibilidade e propagação de incertezas em
evaporação de gotas [recurso eletrônico] / Lucas
Fernando Ribeiro Chaves. - 2021.

Orientador: João Marcelo Vedovotto.
Coorientador: Americo Barbosa da Cunha Junior.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de
Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica.
Modo de acesso: Internet.
Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2021.263>
Inclui bibliografia.
Inclui ilustrações.

1. Engenharia mecânica. I. Vedovotto, João Marcelo,
1981-, (Orient.). II. Cunha Junior, Americo Barbosa da ,
1984-, (Coorient.). III. Universidade Federal de
Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. IV.
Título.

CDU: 621

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34) 3239-4282 - www.posgrad.mecanica.ufu.br - secposmec@mecanica.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica				
Defesa de:	Dissertação de Mestrado Acadêmico, nº 585, COPEM				
Data:	28/05/2021	Hora de início:	09:15	Hora de encerramento:	12:20
Matrícula do Discente:	11912EMC014				
Nome do Discente:	Lucas Fernando Ribeiro Chaves				
Título do Trabalho:	Análise de sensibilidade e propagação de incertezas em evaporação de gotas				
Área de concentração:	Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos				
Linha de pesquisa:	Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor				
Projeto de Pesquisa de vinculação:					

Reuniu-se por meio de videoconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: Aldemir Aparecido Cavalini Júnior - FEMEC/UFU; Americo Barbosa da Cunha Junior - UERJ; Haroldo Fraga de Campos Velho - INPE e João Marcelo Vedovotto - FEMEC/UFU, orientador do candidato. Ressalta-se que os Prof. Aldemir Aparecido Cavalini Júnior, João Marcelo Vedovotto e o Discente participaram da defesa por meio de videoconferência desde a cidade de Uberlândia/MG, Prof. Americo Barbosa da Cunha Junior desde a cidade de Rio de Janeiro/RJ, e o Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho desde a cidade de São José dos Campos/SP em atendimento a Portaria nº 36, de 19 de março de 2020, da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa, Dr. João Marcelo Vedovotto, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **João Marcelo Vedovotto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 28/05/2021, às 12:21, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Aldemir Aparecido Cavalini Junior, Professor(a) do Magistério Superior**, em 28/05/2021, às 12:22, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Americo Barbosa da Cunha Junior, Usuário Externo**, em 28/05/2021, às 12:37, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Haroldo Fraga de Campos Velho, Usuário Externo**, em 28/05/2021, às 16:57, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **2794181** e o código CRC **636F3374**.

Dedico o presente trabalho aos meus amados pais, pelo apoio e incentivo conferido durante toda a minha trajetória acadêmica e principalmente de vida.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer a Deus, pelas inúmeras oportunidades de aprimoramento moral e intelectual que Ele tem frequentemente me ofertado nesta jornada humana em busca da evolução espiritual.

De forma especial gostaria de agradecer aos meus pais, Nahor e Edna, pela estabilidade financeira e sobre tudo afetiva, que durante todo o meu período de estudo foi essencial para que eu alcança-se (por meio de muito esforço) o sonhado título de mestre em engenharia.

Agradeço a todos os professores e amigos, que no decorrer do meu intercâmbio internacional na University of Wisconsin – ainda nos tempos de graduação – dedicaram-se a me ensinar tanto a língua inglesa como os conteúdos relacionados a engenharia; dentre estes amigos, gostaria de agradecer de forma especial a Juliet e David Tschida, que me receberam de maneira muito carinhosa em suas vidas, dando-me o apoio necessário durante todo o período o qual estive estudando nos Estados Unidos.

Adicionalmente agradeço ao professor Dr. Adilson J. de Assis, docente da Faculdade de Engenharia Química – UFU, que em meio a tempos conturbados no âmbito acadêmico me ensinou valiosas lições de cunho profissional e social, as quais levarei comigo por toda a vida.

Gostaria de agradecer ao meu primeiro orientador de iniciação científica Dr. Rodrigo Béttega (UFSCar) por ter me apresentado o maravilhoso e desafiador contexto científico da pesquisa em nosso país. Também gostaria de agradecer imensamente ao professor Dr. Aristeu da Silveira Neto (UFU), meu último orientador de iniciação científica, que de forma excepcional avolumou e consolidou meus conhecimentos em mecânica dos fluidos e em turbulência, confirmando assim seu protagonismo tanto no ensino como na pesquisa dos referidos temas.

Por fim, agradeço imensamente ao meu orientador Prof. Dr. João Marcelo Vedovotto (UFU) e ao meu co-orientador Prof. Dr. Americo Barbosa da Cunha Junior (Uerj), pela confiança e apoio na realização deste trabalho de mestrado, o qual me permitiu bem mais do que atingir o patamar de mestre, mas principalmente o de conhecer novas áreas profissionais e científicas.

“Hardships often prepare ordinary people for an extraordinary destiny.”

“Dificuldades frequentemente preparam pessoas comuns para destinos extraordinários.”

Clive Staples Lewis

Chaves, L. F. R. **Análise de sensibilidade e propagação de incertezas em evaporação de gotas**. 2021. 103 f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

O processo de evaporação de gotas, assim como o fenômeno da combustão, de acordo com dados históricos é um dos processos mais antigos da humanidade, por este motivo ambos são amplamente utilizados em aplicações cotidianas e industriais. Todavia, a antiguidade e utilização do processo não corresponde ao completo e efetivo entendimento do mesmo, haja visto que, o conhecimento puramente determinístico deste por vezes é carregado de erros e incertezas (aleatórias e epistêmicas). Neste contexto, o presente trabalho buscando incrementar o conhecimento e o domínio do processo de evaporação de gotas combustíveis, realizou a análise de sensibilidade global e a propagação das incertezas sobre o processo de evaporação de uma gota de n -heptano em meio inerte de nitrogênio. Sendo o referido sistema inicialmente avaliado por meio da perspectiva determinística, pela qual foi possível a implementação de um conjunto de equações relacionadas as variações térmicas e mássicas associadas aos números adimensionais de Nusselt e Sherwood, as equações NuSh-nat. Em etapa posterior o código computacional de evaporação de gotas foi associado as bibliotecas estocásticas Chaospy, Uncertainpy e SALib de forma que a análise de sensibilidade global foi realizada sob três sistemas distintos de evaporação de gotas, obtendo destas avaliações os termos de maior relevância ao processo de evaporação para que posteriormente, na etapa de propagação das incertezas, estas fossem propagadas à resposta final do problema avaliado. Obtendo, assim, ao fim das simulações estocásticas as bandas de confiança características ao processo e as temperaturas de evaporação da gota combustível de n -heptano avaliadas.

Palavras-chave: *Evaporação de gotas, Análise de sensibilidade global, Propagação de incertezas, Bandas de confiança.*

Chaves, L. F. R. **Sensitivity analysis and uncertainty propagation in droplet evaporation**. 2021. 103 f. Master Dissertation, Federal University of Uberlândia, Uberlândia.

ABSTRACT

The droplet evaporation process, as well as the phenomenon of combustion, according to historical data is one of the oldest mankind processes, therefore both are widely used in everyday and industrial applications. Nevertheless, the antiquity and use of the process do not correspond to a complete and effective understanding of it, since the purely deterministic knowledge of these is usually loaded with errors and uncertainties (random and epistemic). In this context, the present work, seeking to increase the knowledge and mastery of the evaporation process of fuel droplets, performed a global sensitivity analysis and uncertainty propagation on the evaporation process of a *n*-heptane droplet in an inert nitrogen medium. Being the referred system initially evaluated by a deterministic perspective, through which it was possible to implement a set of equations related to thermal and mass changes associated with the Nusselt and Sherwood dimensionless numbers, the NuSh-nat equations. In a later step, the computational code of droplet evaporation was associated with the stochastic libraries Chaospy, Uncertainpy, and SALib so that the global sensitivity analysis was performed under three different systems of droplet evaporation, extracting from these the most relevant terms to the evaporation process so that later, in the stage of uncertainty propagation, these could be propagated to the final problem evaluated answer. Thus obtaining, at the end of the stochastic simulation process the usual confidence bands to the evaporation process of the *n*-heptane combustible droplet.

Keywords: *Droplet evaporation, Global sensitivity analysis, Uncertainty propagation, Confidence bands.*

LISTA DE FIGURAS

1.1	Cenários de emissão de gases estufa e mudanças climáticas.	2
1.2	Simulação numérica tridimensional da progressão espacial de uma reação química. . .	4
1.3	Número de artigos e patentes disponíveis nas áreas de análise de incerteza (barras azuis) e em análise de incerteza associada a combustão (barras vermelhas) em cada quinquênio individualizado encontrados pelo autor em consultas recursivas no buscador google acadêmico.	6
1.4	Representação geométrica dos ângulos do cone do spray e das dimensões do bocal. . .	8
1.5	Simulação computacional de spray multifásico com evaporação de gotas.	8
1.6	Perfil estocástico para a resposta de um escoamento reativo com variação de temperatura em função da relação de r/D	9
1.7	Processo evaporativo de uma gota.	11
2.1	Ilustração egípcios descoberta pelo mineralogista Frédéric Cailliaud representando o processo de resfriamento de líquidos realizado a 2500 a.c.	15
2.2	Número acumulado de artigos e patentes disponíveis disponíveis para consulta até o ano de 2020 versando sobre evaporação de gotas (barras azuis), e o acumulado de artigos e livros publicados pela editora científica Elsevier também sobre o mesmo tema (barras vermelhas com o marcador em estrela).	16
2.3	Processo esquemático de atomização detalhando os principais processos físicos de formação dos sprays.	18

2.4	Representação esquemática da região de dinâmica molecular e da região hidrodinâmica de uma gota líquida.	19
2.5	Explosão de uma gota de éter em ebulição (superaquecida), imersa em glicerol a temperatura ambiente de 150°C a pressão de 3 bar.	21
2.6	Histórico de evaporação de uma gota combustível imersa em um ambiente controlado e completamente preenchido por oxidante.	22
2.7	Considerações complementares as simulações numéricas da gota combustível utilizando o t.q.e.	23
2.8	Processo esquemático de projeto contendo erros e incertezas.	26
2.9	Avaliação gráfica do mal da dimensionalidade relativa a metamodelagem usando o PCE.	30
3.1	Avaliação dos efeitos da redução e aumento do número de Spalding sobre a taxa de evaporação da gota líquida.	35
3.2	Representação das gotas de <i>n</i> -heptano em períodos distintos de evaporação com as respectivas camadas de mistura distorcidas.	40
3.3	Sistema esquemático ilustrando o processo de cálculo dos índices de Sobol.	42
3.4	Sistema esquemático ilustrando o processo propagação de incertezas via PCE.	43
4.1	Módulos determinístico da simulação numérica de evaporação.	46
4.2	Módulos da simulação numérica de evaporação.	47
4.3	Simulação estocástica do processo de evaporação.	49
4.4	Modelo de programação estruturada.	49
4.5	Função Python para o cálculo da pressão de vapor do <i>n</i> -heptano.	51
4.6	Modelo de programação orientada a objeto.	52
4.7	Função Python para o cálculo da probabilidade binomial.	53
4.8	Fluxograma do módulo determinístico.	55
4.9	Fluxograma de adaptação do sub-módulo <i>NuSh-nat</i>	57

4.10	Fluxograma do módulo estocástico	59
4.11	Estrutura de comunicação e armazenamento de dados da ferramenta Cantera.	61
4.12	Função de cálculo dos percentis da biblioteca Uncertainpy.	65
4.13	Função modificada para o cálculos dos percentis (inferior e superior) informados pelo usuário.	66
4.14	Comparação entre os diâmetros normalizados ao quadrado <i>versus</i> o tempo dividido pelo diâmetro inicial da gota de <i>n</i> -heptano utilizando os dados simulados e os dados interpolados.	67
5.1	Perfil comparativo de evaporação da gota de <i>n</i> -heptano em atmosfera de nitrogênio ($T_g = 471$ K a 741 K) e a gravidade reduzida para os casos simulados e experimentais.	72
5.2	Perfil comparativo de evaporação da gota de <i>n</i> -heptano em atmosfera de nitrogênio ($T_g = 473$ K a 748 K) e a gravidade padrão para os casos simulados e experimentais.	75
5.3	Registros reais de evaporação de uma gota de <i>n</i> -heptano em atmosfera de nitrogênio, $P_g = 1.00$ MPa, $T_g = 755$ K a gravidade padrão.	76
5.4	Comportamento do diâmetro normalizado (D_d^2/D_{do}^2) em função da variação do número de Grashoff (Gr).	78
5.5	Índices totais de Sobol para a simulação exploratória da gota de <i>n</i> -heptano.	81
5.6	Índices totais de Sobol para a simulação comparativa da gota de <i>n</i> -heptano contendo todas as variáveis térmicas e de massa referente ao presente processo de evaporação.	82
5.7	Índices totais de Sobol para a simulação comparativa da gota de <i>n</i> -heptano sem a participação do diâmetro inicial da gota.	83
5.8	Cálculo da qualidade de ajuste para os dados de formação do PCE associado ao respectivo grau do polinômio ortogonal, utilizando 50 amostras e 1000 simulações de treino do metamodelo gerado.	84

5.9	Cálculo da qualidade de ajuste para os dados de formação do PCE associado ao respectivo grau do polinômio ortogonal, utilizando 100 amostras e 1000 simulações de treino do metamodelo gerado.	85
5.10	Cálculo da qualidade de ajuste para os dados de formação do PCE associado ao respectivo grau do polinômio ortogonal, utilizando 500 amostras e 1000 simulações de treino do metamodelo gerado.	85
5.11	Perfil evaporativo médio contendo as bandas de confiança da gota de <i>n</i> -heptano em atmosfera inerte de nitrogênio a temperatura ambiente de 473 K (a) e 548 K (b).	86
5.12	Perfil evaporativo médio contendo as bandas de confiança da gota de <i>n</i> -heptano em atmosfera inerte de nitrogênio a temperatura ambiente de 623 K (a) e 748 K (b).	87

LISTA DE TABELAS

4.1	Etapas do código determinístico.	54
4.2	Algoritmo de adaptação do código <i>NuSh-nat</i>	56
4.3	Algoritmo do código estocástico.	58
4.4	Algoritmo do código estocástico.	64
4.5	Métricas e estatísticas fornecidas pela biblioteca <i>Uncertainpy</i>	65
5.1	Coeficientes das equações <i>NuSh-nat</i> para as simulações da gota de <i>n</i> -heptano.	70
5.2	Parâmetros de simulação do <i>n</i> -heptano.	71
5.3	Termos efetivamente utilizados no processo de análise de sensibilidade global das três principais simulações de evaporação da gota de <i>n</i> -heptano.	80

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURA

Siglas

aPCE	Expansão arbitrária em polinômio caos
ASG	Análise de sensibilidade global
ASM	Modelo de Abramzon-Sirignano
ASMm	Modelo de Abramzon-Sirignano modificado
CAPEOPEN	Computer Aided Process Engineering Open
CFD	Computational Fluid Dynamics
COCO	CAPE-OPEN to CAPE-OPEN simulator
cti	Cantera input
gPCE	Expansão generalizada em polinômio caos
ICTR	Industrial Combustion Technology Roadmap
JPDF	Distribuição de probabilidade conjunta
LES	Large Eddy Simulation
LHC	Hipercubo latino

MMC	Método de Monte Carlo
Mod.C	Modelo computacional
NaN	Não um número
NuSh-nat	Nusselt and Sherwood natural equations
PCE	Expansão em polinômio caos
POO	Programação orientada a objeto
Qols	Quantidades de interesse
S.P	Sistema projetado
S.R	Sistema real
SA	Análise de sensibilidade
T.Q.E	Teoria quase estacionária
UQ	Quantificação de Incertezas
V.A	Variável aleatória
WEO	World Energy Outlook
PRESScv	Soma dos quadrados dos erros de predição da validação cruzada

Número adimensionais

BM	Número de transferência de massa de Spalding
BT	Número de transferência de energia térmica de Spalding
Le	Número de Lewis

Nu	Número de Nusselt
Pr	Número de Prandtl
Re	Número de Reynolds da gota
Sc	Número de Schmidt
Sh	Número de Sherwood

Subscritos

aq	Aquecimento
atm	Atmosférica
aval	Propriedade arbitrária avaliada
c	Propriedade crítica
d	Gota
eq	Equilíbrio
evap	Evaporação
g	Propriedade do gás ambiente
hept	Heptano
l	Propriedade do líquido
m	Região de mistura gas-vapor
o	Inicial

s	Propriedades na superfície da gota
sat	Saturação
subs	Substância avaliada
u	Úmido
v	Vapor
vap	Vaporização

Letras Gregas

α	Ponderação para o cálculo das relações médias
ρ	Massa específica
ρ_Y	Função distribuição de probabilidade
m	Microns
\in	Pertence
ϕ	Representação arbitrária de uma propriedade
Δ	Variação
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Viscosidade cinemática

Letra latinas

C_i	Coeficientes das equações NuSh-nat na posição com $\in [1;5]$
-------	---

c_p	Calor específico
D_d	Diâmetro da gota
D_v	Coeficiente de difusão de vapor
dt	Passo de tempo
\mathbb{E}	Valor esperado ou momento de primeira ordem
FM	Fator de correção para espessura de filme difusional
FT	Fator de correção para espessura do filme térmico
G	Fator de correção para redução da transferência
G	de energia devido à evaporação
g	Aceleração gravitacional
K	Taxa de redução de área
k	Condutividade térmica
L_K	Espessura da camada de Knudsen
L_v	Calor latente específico de evaporação
m	Quantidade de variáveis incertas avaliadas
m	Metros
m_d	Massa
\dot{m}	Taxa de evaporação da gota
mm	Milímetro
\mathcal{M}	Modelo inicial

\mathcal{M}^{PCE}	Metamodelo obtido pelo PCE
N	Número de ciclos
P	Pressão
p	Grau máximo dos polinômios ortogonais
p_i	multiplicador do limite inferior igual a 0.9
p_s	multiplicador do limite superior igual a 1.1
Q_d	Energia efetivamente recebida na superfície da gota
Q_L	Calor latente de evaporação
Q_S	Calor sensível
$Q_{g,d}$	Energia total transferida do gás para a gota
$Q_{g,v}$	Energia transportada da gota pela difusão do vapor
Q_i	Variável aleatória
Q^2	Coefficiente de correlação de validação cruzada
R^2	Coefficiente de determinação
t	Tempo
T_b	Temperatura de ebulição
T_d	Temperatura da gota
T_{wb}	Termômetro de umidade
\mathbb{V}	Variância ou momento de segunda ordem
W	Peso molecular

x_i	Termos das equações NuSh-nat na posição com $i \in [1;5]$
Y_v	Fração de massa de vapor
Y	Conjunto resposta do modelo avaliado
y	Resposta unitária do modelo avaliado
\bar{y}	Média das resposta obtidas nas simulações numéricas

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	x
LISTA DE TABELAS	xiv
LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURA	xv
CAPÍTULO 1 – Introdução	1
1.1 Contexto histórico e dados estatísticos	1
1.1.1 Combustão	1
1.1.2 Análise de incertezas	5
1.2 Motivações	7
1.3 Objetivos	10
1.4 Metodologia	11
1.5 Escopo da dissertação	12
CAPÍTULO 2 – Revisão Bibliográfica	14
2.1 Evaporação de gotas	14
2.1.1 Sistema de evaporação de gotas	17
2.1.1.1 Modelo de evaporação reduzido	20
2.2 Quantificação de incertezas e análise de sensibilidade	24
2.2.1 Erro versus incerteza	25
2.2.2 Abordagens e métodos para a modelagem e propagação das incertezas	27

2.2.2.1	Método de Monte Carlo	28
2.2.2.2	Expansão em polinômio caos	29
2.2.2.3	Análise de sensibilidade	31
CAPÍTULO 3 – Modelo Matemático		33
3.1	Modelagem matemática para evaporação da gota de n -heptano	33
3.2	Modelagem matemática para os processos estocásticos	41
3.2.1	Formulação para a análise de sensibilidade	41
3.2.2	Formulação para a propagação de incertezas	42
CAPÍTULO 4 – Modelo Computacional		45
4.1	Módulos globais da simulação	46
4.2	Paradigmas de programação aplicados ao código	49
4.2.1	Programação estruturada	49
4.2.2	Programação orientada a objetos (POO)	51
4.3	Fluxogramas das simulações	53
4.3.1	Fluxograma do módulo determinístico	53
4.3.1.1	Fluxograma de adaptação do sub-módulo <i>NuSh-nat</i>	56
4.3.2	Fluxograma do módulo estocástico	58
4.4	Bibliotecas termofísicas	60
4.4.1	CAPE-OPEN e <i>thermo</i>	60
4.4.2	Cantera	61
4.5	Bibliotecas estocásticas	62
4.5.1	Chaospy	62
4.5.2	SALib	63
4.5.3	Uncertainpy	64
4.6	Método de integração das equações diferenciais ordinárias	67
CAPÍTULO 5 – Resultados e discussões		69
5.1	Validação e discussão dos resultados	70
5.1.1	Simulações a gravidade reduzida	71

5.1.2	Simulações a gravidade padrão	74
5.2	Evapora numérica do <i>n</i> -heptano	77
5.3	Avaliação estocásticas da evaporação do <i>n</i> -heptano	79
5.3.1	Análise de sensibilidade aplicada a evaporação da gota de <i>n</i> -heptano	79
5.3.2	Propagação das incertezas sobre o processo de evaporação da gota de <i>n</i> -heptano	84
CAPÍTULO 6 – Conclusões e Considerações Finais		88
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		91
Apêndice		100
Anexo		102

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

No presente capítulo será realizada uma breve introdução as áreas da combustão e análise de incertezas. Fatos atuais e históricos dos respectivos temas serão abordados, de modo a explicitar de forma resumida a correlação e a importância dos mesmos para o entendimento e, conseqüente, aprimoramento científico de relevantes processos utilizados na engenharia. Adicionalmente, as motivações seguidas pelo tema do trabalho e os objetivos gerais e específicos serão apresentados, assim como as subseqüentes etapas da presente dissertação.

1.1 Contexto histórico e dados estatísticos

1.1.1 Combustão

A combustão como fonte primária de energia é uma das mais antigas técnicas da humanidade ([WARNATZ et al., 2006](#)); considerando os registros arqueológicos de agrupamentos humanos do período paleolítico (2.6 milhões de anos atrás até 10.000 anos a.c) estimasse que a existência útil deste fenômeno esteja na ordem dos milhões de anos.

Todavia, o processo de combustão como fonte de riqueza foi consolidado apenas no entre período dos séculos XVIII e XIX com o surgimento da máquina a vapor e conseqüente mudança do sistema artesanal de produção ao sistema industrial de manufatura.

Desta maneira, e de acordo com [Turns \(2013\)](#), a combustão pode ser definida como um processo intrínseco a sociedade moderna, compondo, não apenas, mas principalmente o valor

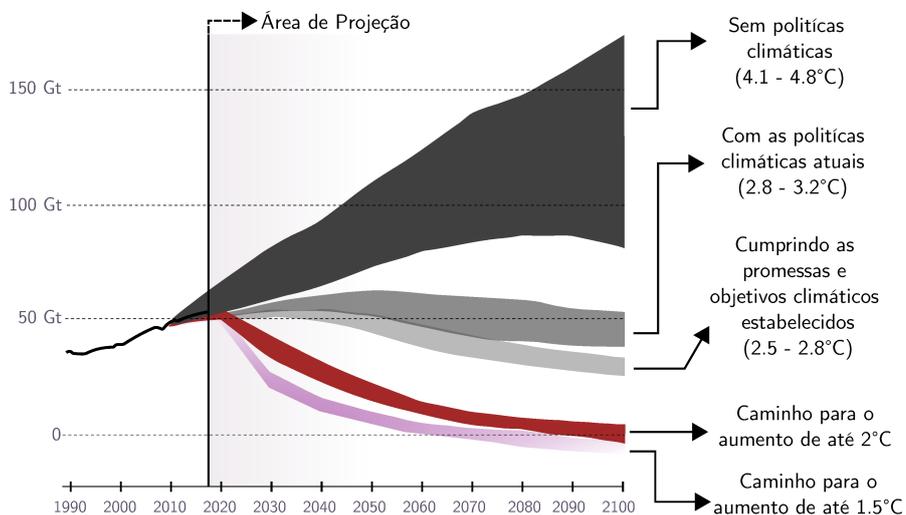
agregado de inúmeros bens de consumo e serviços, e por consequência determinando o potencial crescimento de diversos países; tais como o Brasil, que conforme dados obtidos da edição 2020 do Balanço Energético Nacional (BEN, 2010), converte aproximadamente 80% da matriz energética em processos envolvendo direta ou indiretamente a combustão.

No entanto, esse valor apesar de alto para o contexto brasileiro, representa apenas 4% em relação ao cenário mundial, o qual é liderado por países como Estados Unidos, China e Rússia, os quais em média apresentam uma taxa de conversão de 1.8 toneladas equivalentes de petróleo por habitante (tep/hab) ao ano.

Conforme dados da WEO (World Energy Outlook), em 2018 somente o setor industrial norte-americano atingiu a marca de 21 milhões de toneladas de petróleo consumidos via processo de combustão, gerando cerca de 10^6 tons (1 milhão de toneladas) de CO_2 como subproduto a ser liberado integral ou parcialmente ao meio ambiente.

Esses números, no entanto, sofrem variações frequentes à medida que novas agendas políticas e ambientais são estabelecidas por meio de acordos econômicos e climáticos. Tal como retratado na Fig. 1.1, na qual cinco cenários de emissão de gases estufa e mudanças climáticas são apresentados; variando estes, em função do comprometimento ambiental de cada nação do globo em cumprir acordos como o estabelecido em 2015 na cidade de Paris. No qual, os 195 países signatários se comprometeram com metas para manter o aquecimento global abaixo de 2°C .

Figura 1.1 – Cenários de emissão de gases estufa e mudanças climáticas. (RITCHIE; ROSER, 2017); Modificada.



Pela Fig. 1.1, verifica-se que todas as projeções climáticas até o ano de 2100 indicam um incremento mínimo 1.5°C na temperatura da terra em função da quantidade dos gases estufa liberados na atmosfera. Todavia, cenários mais alarmantes podem ser atingidos caso todos os compromissos ambientais estabelecidos no acordo de Paris sejam desrespeitados, provocando, assim, o incremento da temperatura mundial de 4.1 até 4.8°C.

Desta forma, e em função do presente e volúvel contexto de pressões geopolíticas e ambientais circundantes a combustão e a emissão de gases estufa, inúmeros trabalhos tem sido desenvolvidos visando a descrição e o aprimoramento do processo global de queima (MCCLARREN, 2018; MERKER; SCHWARZ; TEICHMANN, 2011; KEATING, 2007; SHI; GE; REITZ, 2011), bem como na proposição de mecanismos detalhados (WESTBROOK; DRYER, 1984; LAW *et al.*, 2003) e reduzidos (TANAKA; AYALA; KECK, 2003) da cinética química das reações envolvidas durante a combustão.

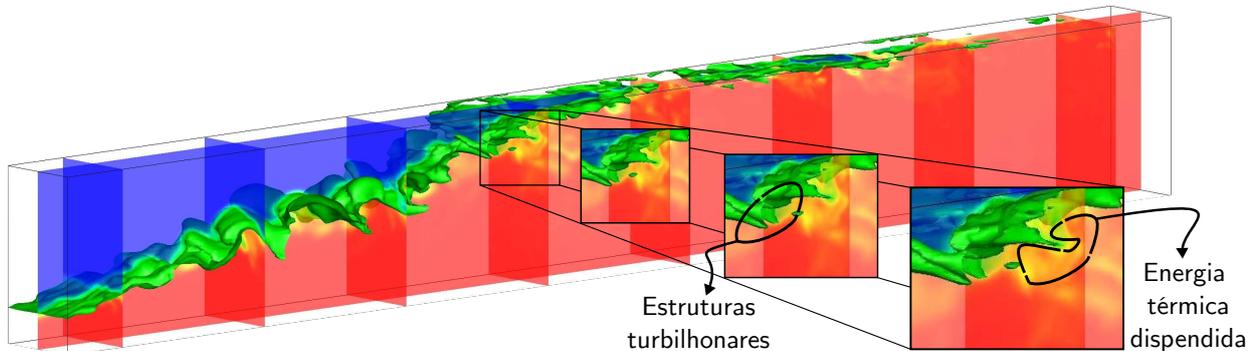
Pesquisas nas áreas de combustão de sprays também tem sido intensificadas, principalmente aquelas direcionadas a equipamentos industriais (BONEFAČIĆ; WOLF; BLECICH, 2017) e aos setores de transportes (BOILEAU *et al.*, 2008; KITANO *et al.*, 2014; PARK; LEE, 2013). As quais, buscam detalhar a combustão ainda nas fases iniciais do processo, de forma a otimizá-la durante a etapa de evaporação do combustível líquido (nuvem de gotas); minimizando, deste modo, perdas energéticas e reduzindo a geração de gases nocivos ao meio ambiente por meio do controle parcial do fluxo de massa e energia desprendida durante o processo de evaporação dos combustíveis.

Todavia, o incremento verificado nas pesquisas voltadas as áreas de conversão térmica só foram e ainda são possíveis devido ao rápido desenvolvimento computacional e a evolução das técnicas numéricas de simulação, que de acordo com Iaccarino (2014) tornaram-se nas últimas três décadas uma das ferramentas de projeto e análise de dados mais utilizadas, gerando resultados significativos em reduzidos períodos de tempo e, portanto, promovendo o entendimento de grande parte dos sistemas avaliados.

Mesmo com resultados mais detalhados provenientes da associação de sofisticadas e robustas técnicas numéricas à maior capacidade de processamento dos computadores atuais, o estudo da combustão ainda apresenta grandes desafios. Uma vez que, esse processo — tal como definido por Peters e Rogg (2008) e apresentado por Vedovotto (2011) — é transitório, tridimensional

e extremamente complexo, o qual necessita de simplificações que o tornem passível de análise teórica e numérica, sem no entanto, gerar restrições e distorções conceituais ao mesmo.

Figura 1.2 – Simulação numérica tridimensional da progressão espacial de uma reação química. (VEDOVOTTO, 2011); Modificada.



Na simulação numérica da Fig. 1.2 gerada por Vedovotto (2011), a complexidade do processo de combustão fica evidente, especialmente pelas interações entre as estruturas turbilhonares do escoamento e pelo processo reativo das espécies químicas envolvidas, as quais são parcialmente destacadas na seção ampliada da referida figura. De modo que, torna-se impraticável prever com exatidão as flutuações e o espectro completo de energia neste tipo de processo, bem como as consequentes perturbações desenvolvidas sobre e pelo escoamento reativo utilizando procedimentos determinísticos de caráter puramente computacional ou provenientes apenas de experimentos materiais¹.

Desta forma, e tal como enunciado por Cunha (2017), processos de alta complexidade (e.g., como a combustão) frequentemente utilizam a combinação dos experimentos materiais e numéricos com o objetivo de investigar as características físicas dos sistemas de interesse. Contudo, tais processos experimentais, apesar de confiáveis e necessários, apresentam limitações na descrição/representação do comportamento físico ou das respostas geradas; isto, em função das incertezas relacionadas a falta de conhecimento integral dos sistemas reais modelados (incerteza epistemológica) e pela relativa ineficiência dos equipamentos de medição frente a inerente variabilidade dos processos de experimentação material (incerteza aleatória).

Sob tal perspectiva e objetivando maior credibilidade nas previsões/estimativas computacionais e materiais, em especial as envolvendo o processo evaporativo de gotas combustíveis, é

¹ Segundo Silveira Neto (2020), processo experimental é um termo apropriado tanto aos sistemas de testes físicos quanto numéricos.

imprescindível que as incertezas presentes nos sistemas físicos e em seus parâmetros sejam avaliadas, e por meio de técnicas apropriadas estas sejam propagadas sob as respostas finais das variáveis de interesse (KHALIL; NAJM, 2018).

Assim, a quantificação de incertezas (UQ - Uncertainty Quantification) torna-se ferramenta indispensável para a evolução das pesquisas envolvendo a grande área da combustão e dos processos evaporativos.

1.1.2 *Análise de incertezas*

Apesar da acentuada relevância da quantificação/análise de incerteza, essa ainda é uma área recente no contexto tecnológico da atualidade. Acredita-se que tanto o termo quanto a descrição matemática, e portanto formal, tenham surgido apenas na segunda metade do século XIX, consolidando-se nos primórdios do século XX.

De acordo com Booker e Ross (2011), esta consolidação tardia deu-se primordialmente em função do pensamento determinístico que permeou o século XIX, o qual foi estimulado pela objetividade do cálculo diferencial, e pelas inúmeras e, até então, inovadoras descobertas da mecânica clássica de Newton.

Contudo, tais conceitos determinísticos, os quais guiaram de forma unânime e indiscutível o pensamento científico do mundo por aproximadamente um século, foram incapazes de explicar satisfatoriamente manifestações microscópicas e problemas a nível molecular – abaixo da escala do contínuo – os quais emergiram principalmente durante a primeira e segunda guerra mundial, associados (frequentemente) à combustão e as questões nucleares.

Assim, as teorias estatísticas e de probabilidade se incumbiram de preencher as lacunas deixadas pelo pensamento newtoniano; como resultado, a Mecânica Estatística (ME) surgiu, estabelecendo a multiplicidade de respostas (respostas probabilísticas) aos sistemas sub-atômicos.

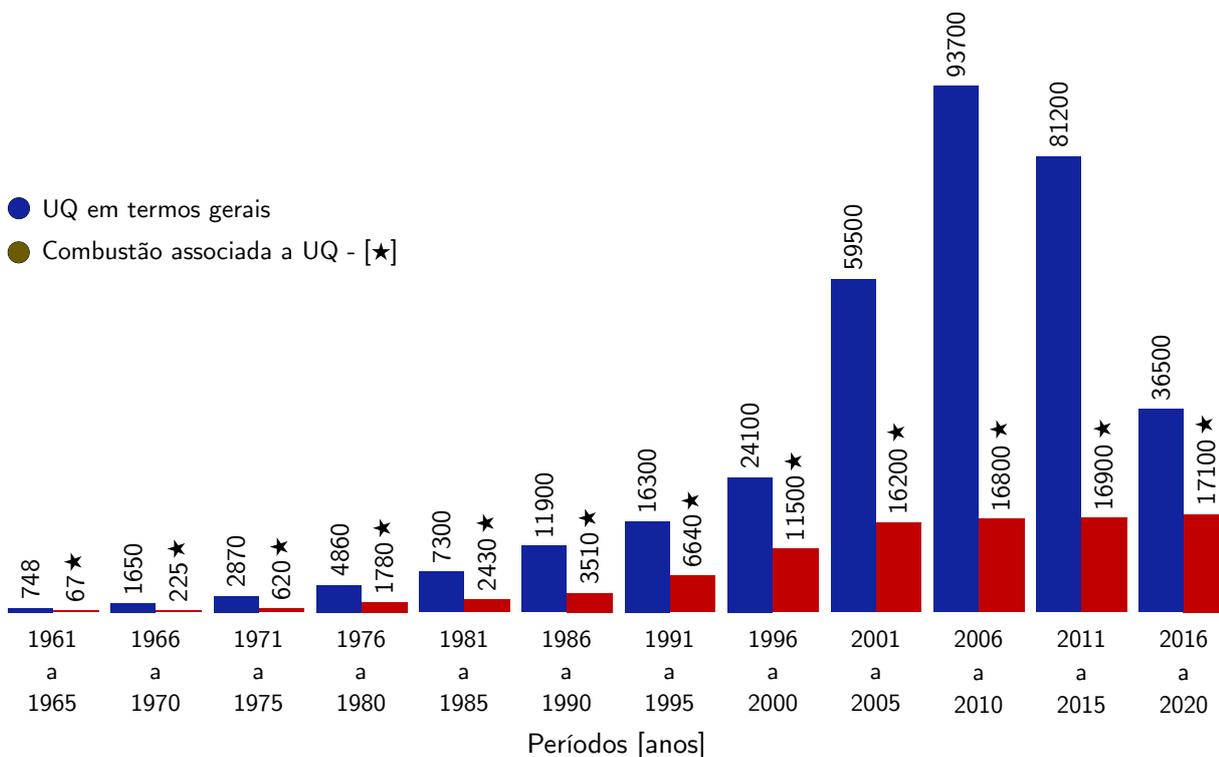
Esta nova área da ciência, a ME, impulsionou e foi impulsionada pelo conceito de incerteza, o qual passou do campo filosófico e linguístico a uma das mais importantes áreas de estudo e aplicações da atualidade, na medida em que seguiu o rigor matemático e os difundidos conceitos de metodologia científica.

Atualmente, estima-se que aproximadamente 342 mil trabalhos utilizando as técnicas de análise de incerteza já tenham sido publicados e/ou patentados no mundo desde de 1901. Da

mesma forma, estimativas também extraídas do buscador google acadêmico utilizando a associação dos termos *análise/quantificação de incerteza e combustão*, mostram que 94 mil trabalhos científica já foram publicados na referida área.

Neste contexto, a Fig. 1.3 apresenta em termos gerais a evolução científica da área de avaliação de incertezas (barras azuis) e da área de combustão associada a avaliação de incertezas (barras vermelhas). Ambas classificadas por meio do número de artigos e livros disponíveis para consulta especificamente e de forma individual em cada quinquênio entre os anos de 1961 a 2020.

Figura 1.3 – Número de artigos e patentes disponíveis nas áreas de análise de incerteza (barras azuis) e em análise de incerteza associada a combustão (barras vermelhas) em cada quinquênio individualizado encontrados pelo autor em consultas recursivas no buscador google acadêmico. (O autor, 2021)



Desta forma, dois aspectos ficam evidentes em relação ao apresentado na figura anterior (Fig. 1.3). O primeiro e mais relevante, aponta o tema de análise de incertezas aplicado a combustão como parcela considerável do valor acumulado no campo de estudo da UQ no período avaliado, algo em torno de 28%. Já o segundo fator, apresenta a dinâmica temporal das pesquisas envolvendo a quantificação de incertezas. Que em geral tiveram e ainda têm grande evolução em tempos de disputas/conflitos internacionais, como por exemplo durante a crise dos mísseis em Cuba no ano de 1962, na corrida espacial entre Estados Unidos e União Soviética (1947-1991)

com maior notoriedade em 1964, durante a crise do petróleo em 1974 e, por fim, durante a guerra do Golfo em 1991.

Neste sentido, e tendo como foco o processo de combustão e suas particularidades, a quantificação de incertezas além de conferir confiabilidade aos processos experimentais – se adequadamente associada à técnica de análise de sensibilidade e simulações CFD – também torna-se uma poderosa ferramenta na análise de viabilidade e verificação de experimentos, uma vez que, as simulações numéricas e os experimentos materiais de escoamentos reativos envolvem mecanismos e reações químicas de grande complexidade e extremamente extensos, as quais muitas das vezes são impraticáveis do ponto de vista técnico e econômico.

1.2 Motivações

O presente trabalho foi realizado tendo por incentivo a perpétua e crescente necessidade de aprimoramento tecnológico dos equipamentos e processos relacionados a evaporação e combustão de sprays, tal como aqueles diretamente ligados aos setores industriais. Vislumbrando, deste modo, o melhor aproveitamento da energia concebida pelo fenômeno da combustão e reduzindo os impactos gerados pelos resíduos sólidos e gasosos provenientes do referido processo de conversão térmica.

Sob a mesma motivação, o escritório de tecnologias industriais ligado ao departamento de energia dos EUA criou o *“Industrial Combustion Technology Roadmap - ICTR”* (Roteiro de Tecnologias para Combustão Industrial). Iniciativa a qual, de acordo com [Jr, Gershtein e Li \(2000\)](#), deveria realizar o monitoramento, divulgação e incentivar as pesquisas e avanços em escala mundial nas áreas dos queimadores e combustores industriais em um período de aproximadamente 20 anos, com início em 1999.

Todavia, a iniciativa ICTR apesar de bem sucedida ao propor o planejamento e a padronização dos queimadores e outros equipamentos industriais, tornou-se falha a medida que as lacunas de informação associadas ao próprio conceito de mapeamento não evoluíram; negligenciando assim, importantes dados e conceitos a respeito de resultados e procedimentos técnicos referentes aos projetos de tais equipamentos. De modo que, apenas com a atualização e surgimento de novas literaturas especializadas ([JR; GERSHTEIN; LI, 2000; DUDLEY; GENTY; COEN, 2006](#) e

JR, 2018) o efetivo progresso e os desafios da área da combustão industrial começaram a ser realmente difundidos para os mais diversos centros de pesquisas, e conseqüentemente absorvidos por inúmeros campos científicos. Os quais converteram os desafios e objetivos restritos a combustão industrial ao contexto global dos sistemas térmicos.

Assim, a combustão passou a receber afluentes de conhecimento vindos dos mais diversos seguimentos de pesquisas, como os relacionados aos projetos de atomizadores e *sprays*, representados a seguir pelas Fig. 1.4 e 1.5. Nas quais, os sistemas de atomização são retratados de forma genérica pela representação paramétrica da Fig. 1.4, e os *sprays* pela simulação numérica da Fig. 1.5.

Figura 1.4 – Representação geométrica dos ângulos do cone do spray e das dimensões do bocal. (O autor, 2021)

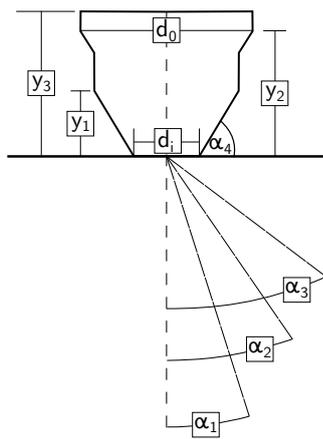
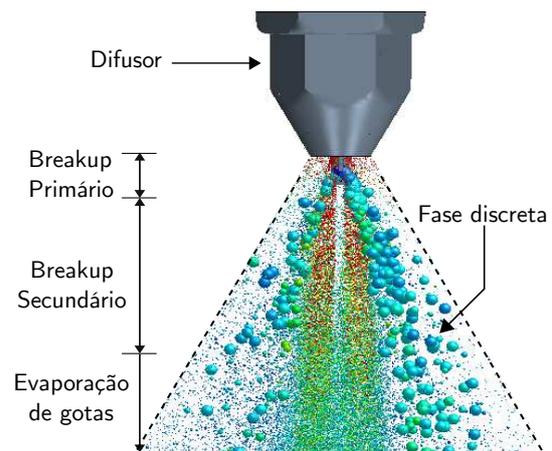


Figura 1.5 – Simulação computacional de spray multifásico com evaporação de gotas. (PERSSON, 2013); Modificada.



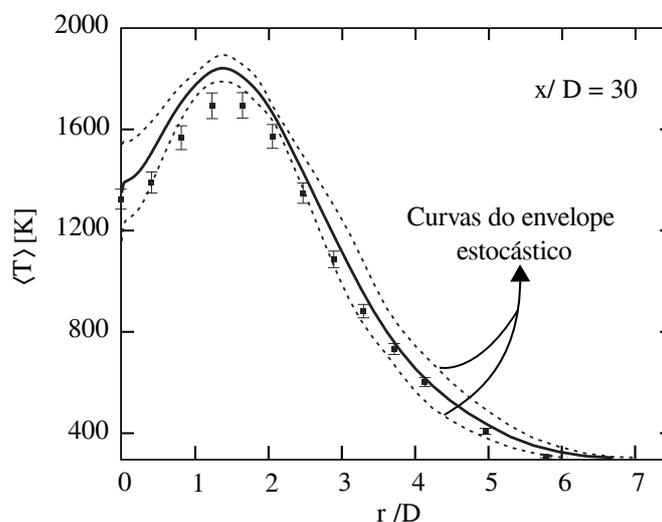
Outras áreas, como as de cinética química, fluidos e análise de incerteza, também motivaram e impulsionaram significativamente o entendimento da combustão e, portanto, os conceitos de geração e controle dos gases e partículas nocivas ao meio ambiente. Nesses seguimentos de pesquisas, trabalhos como os publicados por Najm (2009) e Iaccarino (2009) descrevem de maneira precisa o contexto e importância dos processos estocásticos para a real compreensão dos escoamentos reativos e não-reativos, bem como para a comprovação da efetiva qualidade dos modelos utilizados.

Neste contexto, inúmeros pesquisadores como Wang e Sheen (2015), Mueller, Iaccarino e Pitsch (2013) passaram a investigar o comportamento e as propriedades dos escoamentos reativos, bem como a qualidade dos modelos de combustão, aplicando técnicas de quantificação

de incertezas. De maneira específica, os autores [Mueller, Iaccarino e Pitsch \(2013\)](#) utilizaram o método de monte carlo para a propagação das incertezas em simulações CFD do tipo LES (“*Large Eddy Simulation*” ou Simulação de Grandes Escalas) associadas ao tipo de chama *flamelet* para a avaliação do escoamento reativo de uma chama turbulenta em jato, rica em metano e ar na região central e circunscrita por uma chama empobrecida de acetileno, hidrogênio e ar.

Na figura a seguir, Fig. 1.6, o resultado probabilístico do processo de combustão mencionado acima é apresentado; neste, verifica-se o perfil da temperatura média ($\langle T \rangle$) das chamas concêntricas, além das curvas do envelope estocástico (95% de confiança) na posição x/D igual a 30 com as equivalentes variações radiais (r) no eixo r/D . Sendo, o fator de Arrhenius (A) das reações químicas envolvidas a única variável incerta propagada na referida simulação, e os marcadores quadrados ilustrando (na figura) os dados provenientes dos experimentos materiais utilizados para validação dos modelos implementados.

Figura 1.6 – Perfil estocástico para a resposta de um escoamento reativo com variação de temperatura em função da relação de r/D . (WANG; SHEEN, 2015); Modificada.



Assim, o resultado ilustrado pela figura anterior representa um caso prático no qual o processo de propagação de incertezas auxilia o desenvolvimento da área de combustão numérica. Uma vez que, o mesmo demonstra estatisticamente que os modelos de combustão, redução de cinética química e de modelagem da turbulência utilizados na simulação do referido processo não foram capazes de prever com no mínimo de 95% de confiança a temperatura média do processo, já que, os dados do experimento material na região r/D do intervalo de 1 até 2.5 encontram-se fora do envelope estocástico. Sugerindo, desta forma, que os modelos utilizados venham a ser

modificados ou substituídos.

Neste contexto, e verificando que a evolução dos processos de combustão, sejam eles industriais ou não, depende massivamente de análises cada vez mais detalhadas dos processos reacionais (e.g., WANG; SHEEN, 2015) e das simulações CFD (e.g., VEDOVOTTO, 2011); então, é inequívoca a junção dos temas de evaporação de gotas combustíveis, propagação de incerteza e análise de sensibilidade realizada nessa dissertação. Uma vez que, os mesmos impactam diretamente no processo de aprimoramento da combustão, a medida que possibilitam a compreensão das por menoridades e das respectivas oscilações sentidas pela gota combustível imediatamente antes do processo de combustão, durante o mesmo e na efetiva transição de fase da gota passando do estado líquido ao vapor de combustível.

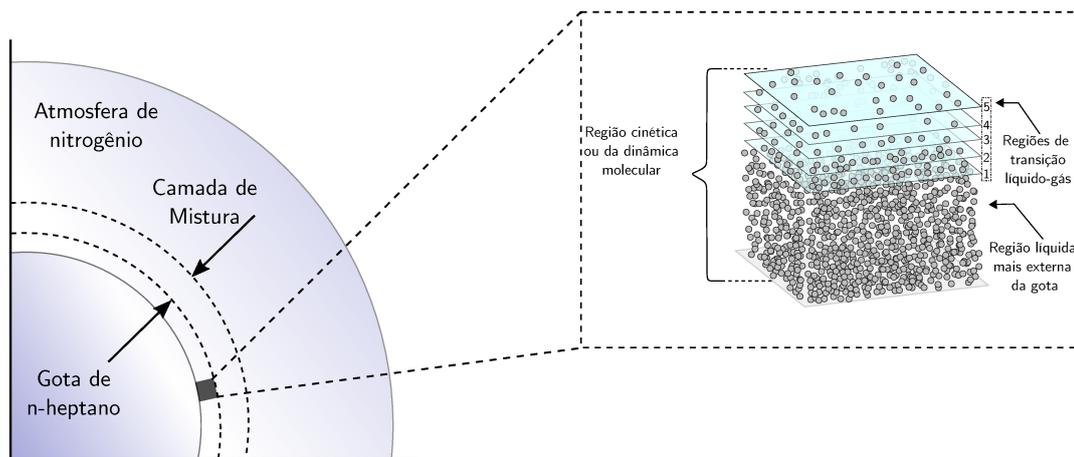
1.3 Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo principal analisar e quantificar as incertezas envolvidas no processo de evaporação de gotas. Com foco, na evaporação de uma gota combustível de *n*-heptano (Fig. 1.7), na qual os parâmetros iniciais pela inerente variabilidade e falta de informações precisas quanto ao sistema físico modelado possam gerar flutuações relevantes sobre a resposta final do problema. Neste contexto, os objetivos específicos são:

- Apresentar resumidamente o conteúdo teórico referente ao processo de evaporação de gotas;
- Descrever a expansão em polinômio caos (PCE) e o processo de análise de sensibilidade via índices de Sobol sob a perspectiva funcional do “black-box” (caixa preta);
- Apresentar as modificações feitas na correlação Ranz-Marshall para os cálculos de Nusselt e Sherwood;
- Descrever de forma clara e esquemática os procedimentos e técnicas utilizadas no desenvolvimento do código utilizado nas simulações de evaporação. De modo que, os resultados obtidos possam ser integralmente reproduzidos;
- Validar o código computacional de evaporação da gota combustível utilizando dados experimentais provenientes de literaturas especializadas;

- Apresentar os parâmetros incertos do processo de evaporação da gota combustível de *n*-heptano;
- Realizar a análise de sensibilidade e a propagação de incertezas sob os parâmetros mais relevantes ao processo aqui avaliado.

Figura 1.7 – Processo evaporativo de uma gota. (O autor, 2021);



1.4 Metodologia

O estudo e compreensão do processo de evaporação de gotas combustíveis, assim como para a avaliação e entendimento do contexto global da combustão, deve passar por no mínimo quatro etapas distintas de avaliação, as quais são: revisão bibliográfica, construção do modelo computacional, verificação e validação do modelo proposto. Para que assim, tenha-se ao fim do estudo de casos uma réplica ou modelo capaz de gerar resultados materiais e/ou computacionais tão próximos quanto possível daqueles obtidos nos sistemas reais em operação.

No presente trabalho, no entanto, as etapas mínimas de avaliação foram expandidas. Adicionando ao conjunto os conceitos de análise de sensibilidade e de propagação de incertezas, de modo que, os parâmetros mais influentes do modelo computacional criado fossem identificados e os efeitos dos mesmos propagados até as respostas finais obtidas por meio das simulações numéricas.

Neste sentido, os experimentos computacionais realizados neste trabalho são resultado de uma intensa e contínua revisão bibliográfica. A qual passou do entendimento etimológico de alguns dos termos mais recorrentes nos temas estudados (**e.g.**, incerteza e evaporação) até

o processo de modelagem matemática do fenômeno de evaporação estocástica, de modo que, o equacionalmente matemático foi verificado de forma periódica durante toda a produção do trabalho e esteve em constante desenvolvimento.

Já a implementação do código computacional, deu-se de forma progressiva utilizando a linguagem de programação Python e tendo como base a codificação realizada por [Pinheiro et al. \(2018\)](#) no software CFD desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia em parceria com a PETROBRAS, o MFsim. O qual é majoritariamente escrito em linguagem de programação Fortran e estendido por módulos em linguagem C/C++, tendo o mesmo surgido do trabalho de [Villar et al. \(2007\)](#) e utilizado nas mais diversas pesquisas envolvendo análise numérica de escoamento reativos e não-reativos ([DAMASCENO; SANTOS; VEDOVOTO, 2018](#) e [DUARTE et al., 2018](#)).

De forma subsequente, os resultados gerados durante a fase determinística das simulações foram validados com dados de experimentos materiais disponíveis em literaturas especializadas, sendo a análise de sensibilidade dos parâmetros mais influentes e a propagação das incertezas avaliados em fase posterior, chamada de etapa estocástica das simulações.

1.5 Escopo da dissertação

A presente dissertação encontra-se dividida em 6 capítulos, 1 apêndice e 1 anexo, incluindo o atual (Capítulo 1), no qual os temas de incerteza, combustão e evaporação de gotas são introduzidos por meio de fatos históricos e dados estatísticos pertinentes aos mesmos. Adicionalmente, o presente capítulo descreve as motivações, objetivos e metodologias associados ao desenvolvimento da dissertação. No Capítulo 2 o processo de evaporação de gotas é por menorizado sob a perspectiva aplicada e teórica, assim como os temas de análise de sensibilidade e propagação de incertezas, os quais fecham o referido capítulo de revisão bibliográfica. No Capítulo 3, denominado por “Modelo Matemático” toda a modelagem pertinente a compreensão dos temas de evaporação de gotas, análise de sensibilidade global e propagação de incertezas são descritos, sendo os temas de cunho estocástico apresentados sob a concepção de um “framework” estatístico. No Capítulo 4, o modelo computacional é apresentado, neste toda a estrutura numérica é descrita e concatenada de modo que é possível compreender o mesmo como um pacote computacional escrito em

linguagem de programação Python voltado especificamente à processos de evaporação de gotas combustíveis. No Capítulo 5, os resultados e discussões a respeito do processo de evaporação da gota combustível de n -heptano são apresentados, tanto os de característica determinística como os de perfil estocástica. Por fim, as conclusões obtidas com o presente trabalho são apresentadas e associadas a descrição global da dissertação, por meio da qual as considerações finais são apresentadas.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

No presente capítulo serão apresentados os conceitos fundamentais a respeito dos temas de evaporação de gotas combustíveis, análise de sensibilidade e propagação de incertezas. Utilizando para tal finalidade, as definições presentes nas principais literaturas das respectivas áreas e em trabalhos nos quais os temas supramencionados sejam abordados de forma simplificada e complementar às simulações computacionais de evaporação de gotas combustíveis e que possam corroborar às avaliações dos resultados obtidos.

A disposição dos temas seguirá predominantemente dois formatos visando a concisão do texto e o fluxo de conhecimento. Sendo o primeiro formato, referente as seções que descrevem o processo evaporativo, as quais foram estruturadas de forma similar ao apresentado por [Sazhin \(2014\)](#) e [Lefebvre e McDonell \(2017\)](#). E o segundo, seguindo a estrutura utilizada por [Cunha \(2017\)](#) e [Soize \(2017\)](#) para a apresentação das seções versando sobre o processo estocástico.

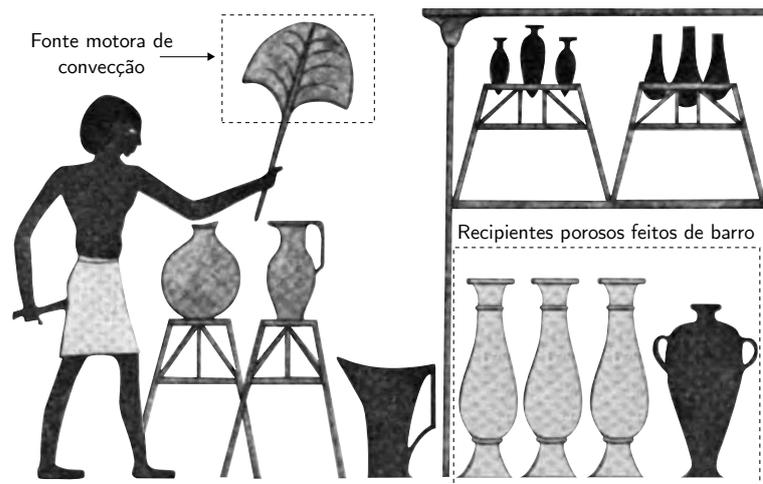
Por fim, o que pretende-se estabelecer neste capítulo são os princípios teóricos e, por vezes, históricos que apoiarão o desenvolvimento do trabalho, sem, no entanto, esgotar a literatura vigente das respectivas áreas.

2.1 Evaporação de gotas

A evaporação enquanto um processo físico e parcialmente controlado, segundo [Minton \(1986\)](#), é considerada uma das técnicas de operações unitárias mais antigas do mundo. De

acordo Gantz (2015), registros históricos datados de 2500 a.c comprovam a existência e efetiva aplicação do referido procedimento pela sociedade egípcia antiga, a qual, utilizava a técnica de evaporação de gotas como mecanismo de resfriamento dos líquidos armazenados em recipientes porosos produzidos a partir do barro, tal como apresentado na figura a seguir.

Figura 2.1 – Ilustração egípcios descoberta pelo mineralogista Frédéric Cailliaud representando o processo de resfriamento de líquidos realizado a 2500 a.c. (A.S.R.E, 1932); Modificada.



Na técnica ilustrada pela figura anterior, Fig. 2.1, o processo de resfriamento ocorre primordialmente pela associação dos fenômenos de evaporação e condução térmica. Sendo este último, o responsável pelo direcionamento do calor proveniente do líquido a ser resfriado até as gotículas de água presentes na superfície dos reservatórios porosos; assim, a estrutura permeável dos recipientes além de desempenhar a função de barreira física entre o líquido armazenado e o ambiente externo também atua como fonte condutora do fluxo térmico envolvido no mesmo.

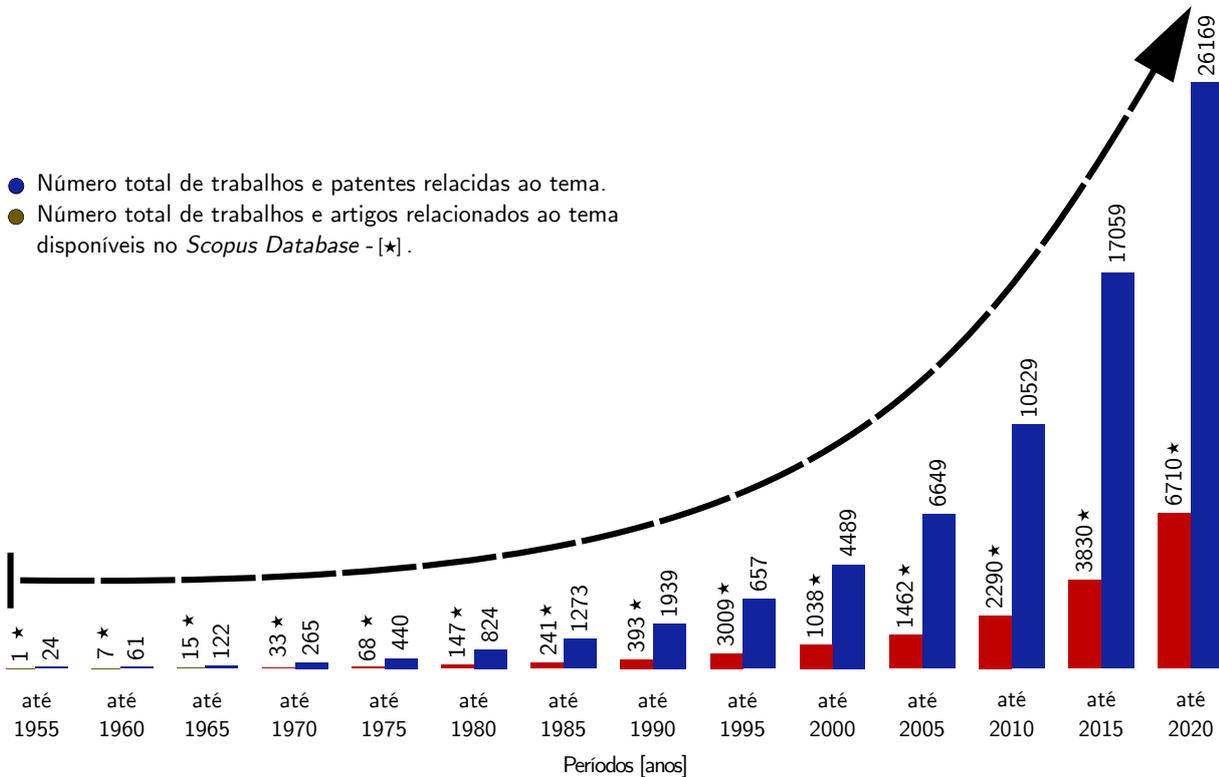
Deste modo, a energia necessária ao processo de evaporação das gotículas de água presentes sob a superfície dos reservatórios é proveniente em quase sua totalidade por meio do calor desprendido do líquido armazenado, viabilizando desta forma, o processo de resfriamento utilizado pelos egípcios da antiguidade e ainda hoje por muito grupos nômades.

De maneira complementar ao fluxo térmico induzido pela evaporação, a fonte motora de convecção destacada na Fig. 2.1 promove a importante função de (re)circulação do ar ambiente para que o processo de mudança de fase das gotas ocorra de forma mais rápida, ou seja, reduzindo o tempo necessário ao resfriamento do volume de líquido armazenado. Assim, tal processo conhecido também por convecção forçada promove o arrasto e expulsão das camadas de vapor recém

formadas nas proximidades do sistema evaporativo, permitindo que o processo de evaporação continue a ocorrer com a maior taxa de conversão mássica e térmica possível.

Neste sentido, e sob a mesma perspectiva científica de troca térmica adota pela sociedade egípcia antiga frente a técnica de evaporação de gotas, diversos processos industriais e cotidianos da atualidade beneficiam-se do macro processo de transformação de fase das gotas líquidas em vapor e gás. Sendo estes verificados de forma direta ou indireta em sistemas de geração de energia (usinas termoelétricas e termonucleares), na produção de fármacos, em processos envolvendo a combustão, na indústria alimentícia, em sistemas modernos de refrigeração e em sistemas de termo-regulação e processamento biológico. De modo que, os mesmos são representados a seguir (Fig. 2.2) pelo número de publicações em base cumulativa.

Figura 2.2 – Número acumulado de artigos e patentes disponíveis para consulta até o ano de 2020 versando sobre evaporação de gotas (barras azuis), e o acumulado de artigos e livros publicados pela editora científica Elsevier também sobre o mesmo tema (barras vermelhas com o marcador em estrela). (O autor, 2021)



Assim, por meio dos valores² descritos na Fig. 2.2, verificasse que nem mesmo a lacuna secular de 4450 anos entre os primeiros registros catalogados do processo de evaporação de gotas

² Valores obtidos em consultas aos bancos de dados da editora científica Elsevier e pelo mecanismo de busca google acadêmico utilizando o termo “*droplet evaporation*” (evaporação de gotas).

até as primeiras publicações formais sobre o referido tema, realizadas entre os anos de 1950 a 1955, foi suficiente para atenuar a necessidade e importância da técnica de evaporação de gotas, ou até mesmo, para que outros processos substitutos fossem criados de modo a atender as demandas tecnológicas da sociedade moderna. Fato este, que fica evidente pelo comportamento exponencial dos dados da figura anterior, que representam a quantificação e o desenvolvimento técnico das áreas industriais e cotidianas associadas ao processo de evaporação de gotas, os quais apresentaram crescimento médio superior a 60% nos ciclos quinquenais (de cinco anos) avaliados. Tornando, desta forma, evidente a latência e principalmente a importância do respectivo campo de pesquisa.

Neste contexto, torna-se essencial a compreensão dos fatores que governam o referido processo de mudança de fase, bem como das questões e propriedades que acarretam incertezas ao processo de evaporação de gotas; em especial ao processo de evaporação de gotas combustíveis. O qual, segundo [Sazhin \(2014\)](#), pode ser compreendido sob duas perspectiva distintas, a da teoria hidrodinâmica e da teoria cinética, tal como será apresentado na seção a seguir.

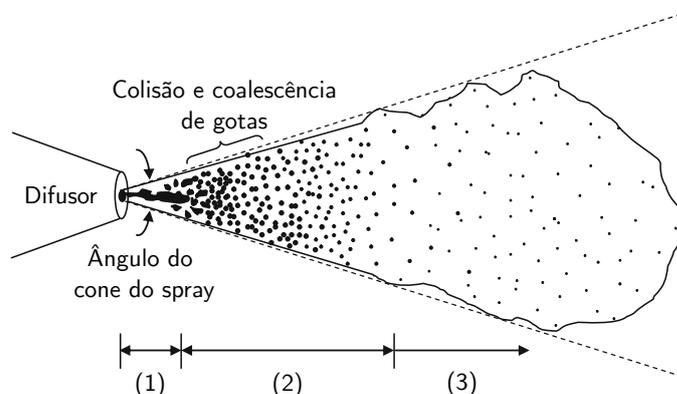
2.1.1 Sistema de evaporação de gotas

De acordo com [Gerasimov e Yurin \(2018\)](#), toda substância é provida de moléculas as quais coexistem em quantidades e formas bem definidas, formando os três estados clássicos da matéria. Todavia, interações pontuais no que refere-se a transitoriedade dos processos frequentemente possibilitam o surgimento de padrões intermediários e fenômenos associados aos estados sólido, líquido e gasoso. Os quais, apesar de não serem caracterizados formalmente ou pertencerem exclusivamente a uma das fases canônicas da matéria, têm influência preponderante no comportamento global dos sistemas nos quais os mesmos estão envolvidos. De modo que, tais estruturas e fenômenos, podem ser exemplificados por processos como os da convecção natural, do equilíbrio líquido-vapor e pelas estruturas coalescentes encontradas durante o processo de atomização em jatos líquidos.

Assim, em engenharia bem como em muito outros campos de pesquisas, tais padrões intermediários e ou efeitos representam um relevante vazio de informação que frequentemente resultam em divergências consideráveis entre os processos reais e os dados obtidos pelos experimentos laboratoriais.

De modo que, os sistemas de formação de sprays (Fig. 2.3) classificados por Lefebvre e McDonell (2017) como processos de elevada importância para os setores industriais, da agricultura e para o amplo campo da medicina, os quais são caracterizados pela aleatoriedade de formação de suas estruturas; tornam-se, assim, sistemas de referência para a compreensão dos já mencionados fenômenos. Uma vez que, durante as etapas físicas de formação dos sprays diversas interações mássicas e térmicas ainda pouco compreendidas em virtude da magnitude do processo desenvolvem-se, em especial, aquelas associadas a etapa de evaporação de gotas.

Figura 2.3 – Processo esquemático de atomização detalhando os principais processos físicos de formação dos sprays. (MCALLISTER; CHEN; FERNANDEZ-PELLO, 2011); Modificada.



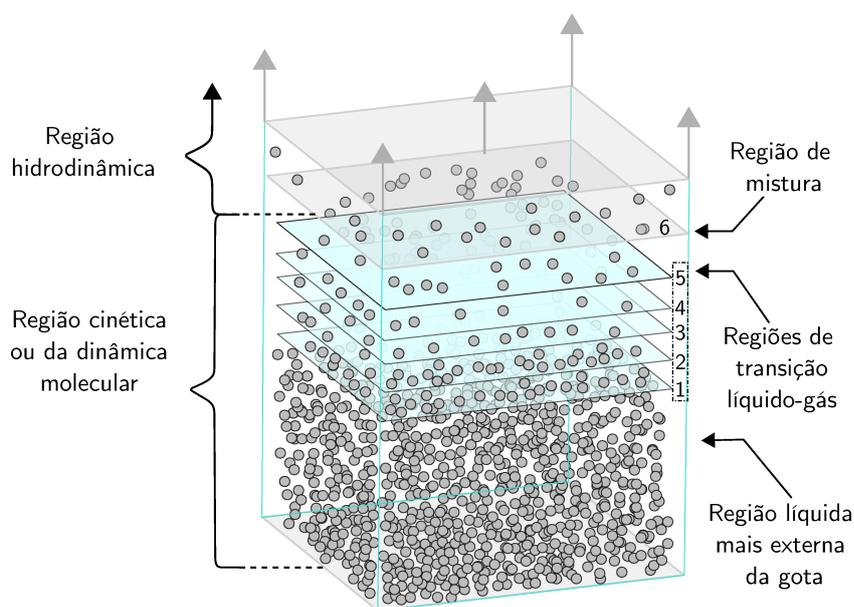
Sob tal perspectiva, a Fig. 2.3 apresenta de forma esquemática um spray de diesel, no qual as três principais etapas de formação deste sistema são enumeradas. Sendo as mesmas, segundo Lefebvre e McDonell (2017), denotadas por: breakup primário (1), breakup secundário (2) e o processo de evaporação de gotas (3). Das quais, apenas a etapa (3) é detalhada neste trabalho, de modo que, o autor sugere como fonte de estudo/consulta às etapas (1) e (2) da Fig. 2.3 os trabalhos publicados por Ashgriz (2011), Lefebvre e McDonell (2017) e Yarin, Roisman e Tropea (2017).

Neste contexto, e de acordo com Sazhin (2014), a descrição da técnica de evaporação de gotas passa, do ponto de vista global do processo, por dois caminhos ou regiões de transformação. Sendo a primeira, referente a movimentação molecular entre as camadas mais externas da gota líquida e o sistema gasoso circundante. Tal como é apresentado na Fig. 2.4 inspirada na representação proposta por Gerasimov e Yurin (2018).

Na Fig. 2.4, o aglomerado de moléculas abaixo da primeira camada representa o sistema molecular da gota líquida com maior probabilidade de mudança de fase, e portanto, o qual mantém

o maior contato com o ambiente gasoso externo sem que alterações na estrutura molecular da fase líquida sejam verificadas. Ao passo que, os níveis de 1 a 5 representam a variação energética intermolecular característica da transição bi-direcional líquido-vapor. De modo que, quanto mais afastado do primeiro nível, menos aderente são as forças entre as moléculas da fase líquida, estando essas completamente livres após o nível/camada 6 (região de mistura).

Figura 2.4 – Representação esquemática da região de dinâmica molecular e da região hidrodinâmica de uma gota líquida. (O autor, 2021)



Tal descrição, de acordo com Sazhin (2014) é dentre as mencionadas, a qual apresenta maior dificuldade técnica tanto em relação a descrição matemática como no que refere-se ao detalhamento físico do processo de deslocamento, e por vezes, dos choques mecânicos entre as partículas da região analisada (GERASIMOV; YURIN, 2018), sendo, por este motivo, descrita pelo modelo nomeado de cinético (ou da dinâmica molecular), uma vez que a mesma associa a movimentação caótica das moléculas à maior probabilidade de transição de fase. Já a segunda região envolvida no processo de evaporação de gotas, conhecida como região hidrodinâmica, descreve a difusão das moléculas do líquido após a sexta camada da Fig. 2.4; ou seja, no conceito de difusão do vapor desprendido da gota líquida em direção ao gás ambiente das vizinhas.

Assim, em linhas gerais, o modelo hidrodinâmico utilizado na presente dissertação, estabelece como ponto principal a definição de que o vapor sob a superfície da gota líquida encontra-se sempre saturado (SAZHIN, 2014), ou seja, assume-se que a taxa de evaporação seja equivalente a quantidade de vapor difundido ao meio gasoso circundante. Adicionalmente, o modelo quase-

estacionário é utilizado de modo a estabelecer limites ao processo da difusão do vapor ao meio gasoso, tal como será apresentado a seguir.

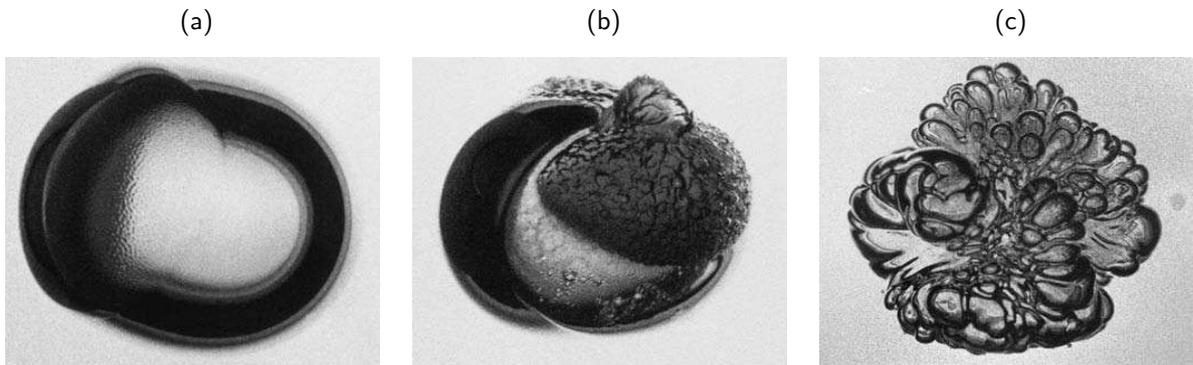
2.1.1.1 Modelo de evaporação reduzido

Os modelos reduzidos empregados nas análises de evaporação sob a região hidrodinâmica das gotas, assim como visto anteriormente, representam simplificações físicas e matemáticas ao complexo sistema de mudança de fase destas estruturas. Tais simplificações, todavia, não possibilitam apenas a redução de dificuldade em quantificar os sistemas unitários representados pelas gotas, mas também estende tal característica ao comportamento conjugado das múltiplas gotas (nuvens de gotas) evaporando em sistemas reativos e não-reativos.

De acordo com [Sirignano \(2010\)](#), para o caso individual dos sprays, ou seja, sem a ocorrência da combustão, diversos avanços já foram atingidos via modelos reduzidos. Destacando-se, aqueles relacionados ao comportamento global dos sprays, os quais são verificados por meio de simulações CFD da fase contínua. Todavia, as características dinâmicas da fase dispersa ainda representa grandes desafios nas avaliações destes sistemas. Visto que, mesmo com os avanços das técnicas numéricas de simulação e dos processos não intrusivos de diagnóstico a laser, os quais possibilitam a captura de dados em escalas menores que $100 \mu\text{m}$, ainda sim, fatores como a alta taxa de evaporação impossibilitam previsões confiáveis a respeito da transição de fase em sprays. Tal característica, segundo [Sirignano \(2010\)](#), está associada ao caráter dinâmico e transitório do sistema, o qual desenvolve forte integração entre as fases contínua e dispersa, incorporando, deste modo, as flutuações abruptas às características do sistema final à medida que o tempo de evaporação da fase dispersa reduz.

Deste modo, compreender as possíveis variações do processo de evaporação de gotas apresenta-se como medida indispensável a evolução dos sprays. A Fig. 2.5, a qual representa um processo de evaporação catastrófica por nucleação de bolhas no interior de uma gota, apesar de afastar-se do caso exemplificado por [Sirignano](#) em função dos limites de criticidade do fenômeno, confere uma boa representação visual dos possíveis efeitos deflagrados em função da alta taxa de evaporação em sistemas operando abaixo da temperatura crítica.

Figura 2.5 – Explosão de uma gota de éter em ebulição (superaquecida), imersa em glicerol a temperatura ambiente de 150°C a pressão de 3 bar. (FROST, 1989)

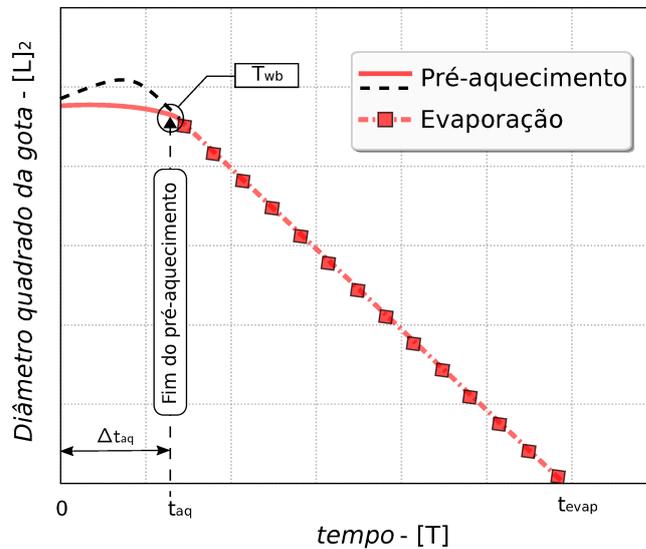


Pelas imagens da explosão da gota de éter (Fig. 2.5), é possível inferir que processos similares ao apresentado desenvolvem-se em sistemas diversos de evaporação, principalmente aqueles realizados a altas taxas e na presença do fenômeno de convecção natural (e.g., combustão de gotas); isto pois, as flutuações geradas sob as gotas por questões de assimetria ou pelo processo conhecido por “*sweeling*” (inchaço por expansão térmica do líquido), provocam o aparecimento de micro-escoamentos sob as regiões periféricas das mesmas; os quais, impelem na maior parte dos casos o deslocamento das camadas de vapor recém formadas em direção as referidas distorções, intensificando, desta forma, o processo oscilatório associado a evaporação até os limites da ruptura catastrófica da estrutura das gotas.

Neste sentido, e em face do desafiador contexto no qual a evaporação de gotas esta inserida. A utilização dos modelos simplificados, ao contrário do que é difundido pelo senso comum, representa um significativo avanço em direção a criação de novas e robustas técnicas, as quais demandem de menor carga computacional e sejam capazes de predizer de forma confiável processos complexos, como é o caso da combustão de gotas.

Desta forma, a teoria quase-estacionária (t.q.e) desenvolvida pela associação das hipóteses e conceitos estabelecidos por [Godsave \(1953\)](#) e [Spalding \(1953\)](#) visando a descrição da combustão de uma gota imersa em um ambiente rico em oxidante, permite que o processo global de evaporação de gotas combustíveis seja compreendido. Assim, a t.q.e também conhecida por lei D^2 ([SAHARIN, 2013](#)), descreve o comportamento linear de gaseificação da gota combustível durante todo o período de evaporação, tal como é apresentado a seguir pela Fig. 2.6.

Figura 2.6 – Histórico de evaporação de uma gota combustível imersa em um ambiente controlado e completamente preenchido por oxidante. (O autor, 2021)



Na Fig. 2.6 duas seções são apresentadas, sendo a primeira, referente a região entre a origem dos eixos ordenados e o tempo de aquecimento (t_{aq}), e a segunda, partindo de t_{aq} até o limite de t_{evap} (tempo de evaporação). Na primeira seção, os dois seguimentos (cheio e tracejado) representam o comportamento usualmente não-linear de pré-evaporação da gota, a qual absorve do ambiente gasoso a energia térmica disponível durante todo o intervalo Δt_{aq} atingindo, segundo Pinheiro *et al.* (2018), a temperatura de bulbo úmido (T_{wb}) a qual é relativa a substância evaporada. A T_{wb} é atingida em detrimento da T_{ebu} (temperatura de ebulição), em função do processo de oscilação térmica ao qual a gota é exposta, sendo este, responsável e concomitantemente induzido pelo escoamento de Stefan definido por Fuchs (2013) e Cooke (1967).

O escoamento de Stefan, assim como o fenômeno produzido pela convecção natural, apresenta grande importância no processo de evaporação. Uma vez que o mesmo, segundo Akkus (2020), intensifica a evaporação da gota líquida por meio do mecanismo de convecção. Sendo, o mesmo menos rigoroso durante a etapa de pré-aquecimento e preponderante na etapa seguinte de efetiva evaporação.

Assim, durante o período de efetiva evaporação a variação da massa da gota líquida, e portanto do diâmetro inicial da mesma, segue segundo Lefebvre e McDonnell (2017) a relação apresentada na Eq. 2.1.

$$D_{d,o}^2 - D_d^2 = K_d t \quad (2.1)$$

Sendo os termos $D_{d,o}$, D_d , K_d e t definidos respectivamente como diâmetro inicial da gota, diâmetro instantâneo da gota, taxa de evaporação da gota e tempo transcorrido de evaporação.

Tal equação (Eq. 2.1), de grande importância ao presente trabalho também será recorrentemente apresentada na forma expressa pela Eq. 2.2, a qual descreve o tempo normalizado de evaporação e é frequentemente associada ao diâmetro normalizado nos gráficos de evaporação ($D_d^2/D_{d,o}^2$ vs $t/D_{d,o}^2$).

$$K_d = \frac{D_{d,o}^2 - 0}{t} \quad \longrightarrow \quad K_d^{-1} = \left(\frac{t}{D_{d,o}^2} \right) \quad (2.2)$$

Adicionalmente ao apresentado, a tabela a seguir complementa o modelo quase-estacionário por meio de premissas simplificadoras que possibilitaram o uso do conjunto de equações a serem apresentadas no a seguir, Cap.3.

Figura 2.7 – Considerações complementares as simulações numéricas da gota combustível utilizando o t.q.e. (ROSS, 2001); Modificada.

1 -	Simetria esférica	A variação de massa assim como os fenômenos de convecção e difusão variam radialmente, ou seja, perdas de massa ou as trocas térmicas ocorrem igualmente por todos o perímetro da gota;
2 -	Propriedades de transporte constantes	As propriedades de transporte são consideradas constantes em cada ciclo/iteração de simulação do processo de evaporação da gota líquida;
3 -	Temperatura da gota uniforme e constante	Temperatura da gota durante a fase de evaporação é considerada como constante e igual a temperatura de bulbo úmido;
4 -	Os efeitos Soret e Dufour não são considerados	A difusão de massa em função do gradiente de temperatura, bem como o fluxo de calor devido ao gradiente de concentração são negligenciados;
5 -	A radiação é desconsiderada	O processo de radiação é negligenciado, de modo que todo o fluxo térmico seja proveniente dos processo de condução e convecção;
6 -	<i>n</i> -Heptano como combustível	O <i>n</i> -heptano é utilizado como substância de análise nas simulações numéricas de evaporação devido a ampla disponibilidade de dados experimentais na literatura;
7 -	Atmosfera de Nitrogênio	O nitrogênio é utilizado como gás ambiente no sistema de evaporação da gota combustível devido a sua baixa reatividade em atmosfera padrão e em contato com o combustível utilizados.

2.2 Quantificação de incertezas e análise de sensibilidade

A incerteza é um campo de estudo amplamente avaliado pela física, matemática, e portanto, pela engenharia. No entanto, também é muito frequente encontrarmos o conceito de incerteza (tal como o termo) associado as ações cotidianas dos indivíduos, expressando estados de dúvida sobre fatos passados, momentâneos e futuros (LINDLEY, 2013).

Tanto em situações cotidianas como em ambientes acadêmicos o termo e os temas relacionados a incerteza, apesar da recorrência, ainda são pouco compreendidos e geram muitos questionamentos. Isto devido ao resumido, mas denso conceito que caracteriza a incerteza. A qual é descrita por Iaccarino (2009) como sendo o “vazio” de informação sobre determinado assunto ou contexto.

Tal definição, no entanto, torna-se ainda mais complexa se associarmos o conceito de incerteza ao grau de conhecimento dos indivíduos a respeito de fatos e objetos específicos. De modo que, sistemas físicos idênticos quando modelados por observadores distintos tendem a assumir diferentes níveis de certeza, dependendo assim do conhecimento *a priori* de quem os descreveu.

Adicionalmente, pode-se considerar (de forma pragmática) no conceito de incerteza questões relativas à variabilidade das informações utilizadas, ambiguidade e metodologia científica aplicada na análise dos sistemas. Assim, tais considerações na medida em que tornam o conceito de incerteza mais completo também aumentam a dificuldade de aplicá-lo aos sistemas reais.

Neste sentido, e de acordo com Najm (2009), Soize (2017) e McClarren (2018), as incertezas podem ser representadas por dois grupos fundamentais, de modo a reduzir parcialmente a complexidade na identificação das mesmas. Sendo elas, as incertezas epistêmicas e as incertezas aleatórias, tal como exemplificado a seguir.

Incertezas aleatórias:

“As incertezas aleatórias surgem da inerente aleatoriedade dos sistemas avaliados. Sendo o termo derivado do *latim* “*aleator*” que significa “jogar de dados”. Definição essa, que confere uma boa compreensão desse tipo de incerteza. Assim, considerando todas as réplicas de um experimento qualquer ou de uma

pesquisa realizada em campo, ao avaliarmos o conjunto de respostas obtidas será possível identificar pequenas discrepâncias entre as informações coletadas. Isso, em função de problemas relacionados as tolerâncias de aferição e das condições ambientais no momento da obtenção dos dados ..." (MCCLARREN, 2018, p.14).

Incertezas epistêmicas:

"As incertezas epistêmicas surgem da falta de informação ou de conhecimento de um sistema qualquer. Sendo muitas vezes, essa incerteza consequência da aproximação de um objeto real por um modelo, ou por erros numéricos associados a solução do problema avaliado. Nos dois casos, é provável que os erros gerados sejam provenientes das simplificações de fatores ou por características do sistema que não foram verificadas durante a transcrição do mesmo ..." (MCCLARREN, 2018, p.14).

Tais definições, em certa medida, assemelham-se à ideia estabelecida pelo senso comum sobre erro, visto que denotam certas irregularidades nas possíveis respostas geradas pelos sistemas analisados. Todavia, erro e incerteza serão tratados na presente dissertação por conceitos distintos, tal como é apresentado a seguir pela contraposição das definições, e também pelo discutido por Faragher (2004) em publicação vinculada ao departamento de defesa da Austrália.

2.2.1 *Erro versus incerteza*

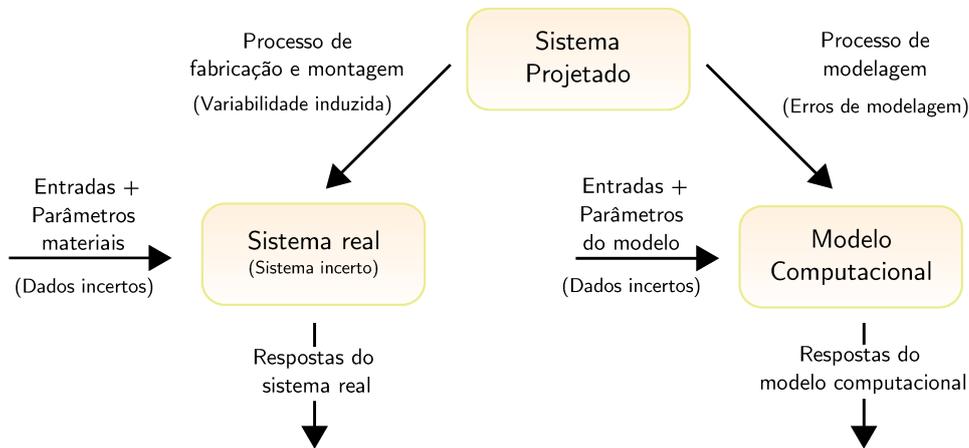
Apesar de não haver um consenso na literatura especializada sobre as diferenças formais entre erro e incerteza, tal como mencionado por Iaccarino (2009) e Cunha (2017), é possível associar o erro em UQ a estrutura numérica de solução de equações, a aritmética de precisão finita e as eventuais falhas de programação. Em contraposição, a incerteza pode ser entendida como o fator de variabilidade dos sistemas analisados ou a subjetividade de definição que cada sistema produz em seus observadores em função de conceitos distintos e/ou ausentes dos indivíduos.

Neste contexto, e utilizando o diagrama da Fig. 2.8, é possível exemplificar esquematicamente o conceito de erro e incerteza por meio dos modelos globais de experimentação³ típica-

³ Nas sentenças onde a conjunção "de" é associada ao termo "experimentação", a palavra "real" pode ser empregada sem qualquer perda de sentido.

mente usados em engenharia; nos quais, a metodologia da caixa preta é utilizada para representar o sistema projetado (S.P), o sistema real (S.R) e o modelo computacional (Mod.C).

Figura 2.8 – Processo esquemático de projeto contendo erros e incertezas. (Soize, ??); Modificada.



Na figura anterior, a qual apresenta o fluxo de erros e incertezas, o sistema de experimentação projetado é ilustrado como a estrutura de planejamento técnico para a obtenção dos sistemas finais S.R e Mod.C. Os quais, são totalmente dependentes, e portanto, sensíveis as oscilações das etapas intermediárias de fabricação/montagem e modelagem computacional.

Assim, para o caso do sistema de experimentação material indicado na Fig. 2.8, a sensibilidade do sistema esta relacionada as incertezas induzidas via variabilidade (e.g., geométrica e de forma) dos componentes mecânicos que compõem o S.R. De modo que, a variabilidade desses componentes produz sobre o sistema final (S.R), características de funcionamento defasadas em relação ao dimensionado no S.P. por esta razão, o sistema de experimentação material é considerado por natureza como um sistema incerto.

Adicionalmente, a resposta final gerada pelo S.R também é composta pelos fatores incertos em relação as entradas e aos parâmetros de operação do sistema. Os quais, em geral são de cunho epistêmico.

Já para o caso do modelo computacional, a estrutura intermediária de materialização do sistema é conhecida como processo de modelagem. No qual, não se considera a existência de um fator aleatório promotor de variabilidade, e sim incertezas de implementação ou simplificação das equações fundamentais utilizadas no modelo codificado. As quais, provocam em associação com os parâmetros incertos de entrada, as incertezas sobre as respostas finais do sistema modelado.

Neste sentido, a compreensão a respeito das incertezas e erros ao nível das respectivas definições torna-se de grande utilidade, ao passo que, produz conhecimento e suscita questionamentos adicionais a respeito das características iniciais e intermediárias que afetam os resultados dos sistemas estudados. De modo que, a proposição, abordagem e aplicação dos métodos e técnicas visando a propagação das incertezas tornam-se mais adequadas aos propósitos de execução dos projetos.

2.2.2 *Abordagens e métodos para a modelagem e propagação das incertezas*

Tal como apresentado anteriormente, e ainda segundo [Sepahvand, Marburg e Hardtke \(2010\)](#), o processo de quantificação de incertezas é uma forma realista e comum de representar os parâmetros de um sistema os quais não podem ser descritos de forma determinística em função das incertezas associadas. Deste modo, a escolha adequada da abordagem e dos métodos aplicados aos sistemas incertos e aos modelos computacionais são de suma importância para a obtenção de respostas que atendam a equidade entre qualidade e custo.

Desta forma, duas possíveis abordagens podem ser utilizadas no tratamento das incertezas, as abordagens não-probabilísticas (anti-otimização e possibilística) e as probabilísticas. Todavia, a técnica não-probabilística por ser menos adequada aos problemas com alta dimensionalidade ([CUNHA, 2017](#)) não será empregada neste trabalho, e portanto, para maiores informações a respeito dos conceitos e aplicações da mesma o autor indica os trabalhos desenvolvidos por [Soize \(2005\)](#), [Moens e Vandepitte \(2005\)](#) como referências introdutórias ao assunto. Já a abordagem probabilística, segundo [Cunha \(2015\)](#), pode ser entendida como a abordagem na qual as teorias de probabilidade são utilizadas para modelar as incertezas dos sistemas físicos sob a perspectiva de um objeto matemático aleatório.

Assim, considerando o vetor de valores quaisquer $\mathbf{Q}_i \in \mathbb{R}$, com $\mathbf{Q} = (q_1, q_2, q_3, \dots, q_n)$ representando as quantidades de interesse do modelo avaliado, e Ω_i descrevendo o espaço amostral associado à variável aleatória \mathbf{Q}_i (todas independentes). Então, de acordo com [Iaccarino \(2009\)](#) na abordagem probabilística de incertezas a composição $\mathbf{Q}_i(\omega_i)$ representa a variável aleatória das quantidades de interesse contínuas (estocásticas), a quais mapeiam o espaço amostral Ω_i em direção ao conjunto resposta do modelo avaliado (Y). Possibilitando, assim, que as incertezas associadas ao sistema físico sejam propagadas ao referido conjunto (os y valores obtidos das

simulações), sob a forma de uma função distribuição de probabilidade ρ_Y ; por meio da qual, os momentos estatísticos esperados $\mathbb{E}[Y]$ (Eq. 2.3) e $\mathbb{V}[Y]$ (Eq. 2.4) podem ser definidos.

$$\mathbb{E}[Y] = \int_{\Omega} y \rho_Y(y) dy, \quad (2.3)$$

$$\mathbb{V}[Y] = \int_{\Omega} (y - \mathbb{E}[Y])^2 \rho_Y(y) dy. \quad (2.4)$$

Neste contexto, o método de Monte Carlo, a técnica de expansão em polinômio caos e a análise de sensibilidade global via índices de Sobol, representam um conjunto de ferramentas (ou *frameworks*) que se combinadas de forma adequada possibilitam a solução de problemas com alta dimensionalidade e sem o acréscimo demasiado na complexidade e custo de execução dos mesmos, tal como é discutido por [Hauseux, Hale e Bordas \(2017\)](#), além de proporcionar um maior entendimento a respeito dos fatores e termos considerados na descrição dos sistemas avaliados.

2.2.2.1 Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo (MMC) proposto por [Metropolis e Ulam em 1949](#) com o objetivo de resolver problemas de matemática e física usando abordagem a estatística, é até os dias atuais um dos métodos mais utilizados segundo [Maître e Knio \(2010\)](#). Sendo amplamente aplicado nas áreas da saúde, economia, agricultura e principalmente nas pesquisas desenvolvidas em engenharia mecânica; campo no qual, o método foi introduzido por [Shinozuka e Jan em 1972 \(GHANEM; SPANOS, 2003\)](#) no estudo de processos digitais aleatórios.

Segundo [Ghanem e Spanos \(2003\)](#), o MMC aplicado aos sistemas incertos caracteriza-se pela obtenção das respostas probabilísticas de forma não-intrusiva, na qual, o conjunto resposta é obtido realizando-se N ciclos de experimentação sobre o sistema avaliado até que o mesmo atinja a convergência.

De maneira específica, [Cunha \(2017\)](#) descreve o método de MC como sendo uma estratégia de amostragem das variáveis aleatórias provenientes dos parâmetros incertos e associadas por meio de uma distribuição de probabilidade conjunta (J-PDF), as quais formam uma coleção de dados de entrada a serem aplicados sob o modelo avaliado. De modo que, a cada ciclo finalizado

uma resposta determinística é obtida, e ao fim dos N ciclos o conjunto de resposta final seja caracterizado em termos da variabilidade (amplitude) do processo.

Assim, as simulações utilizando o método de Monte Carlo apresentam de forma explícita a dualidade “custo vs benefício”, visto que, os resultados gerados pela aplicação do método aproximam-se da resposta real dos sistemas analisados à medida que a quantidade de amostras avaliadas cresce ($N \rightarrow \infty$). Implicando, desta forma, na redução da taxa de convergência (cerca de $1/\sqrt{N}$) da resposta esperada e tornando as simulações utilizando o MMC lentas e por vezes impraticáveis.

2.2.2.2 Expansão em polinômio caos

A técnica de expansão em polinômio caos (PCE) e as suas respectivas variantes gPCE e aPCE (acrônimos em inglês para expansão generalizada e expansão arbitrária em polinômio caos) aplicadas a quantificação de incertezas, tem sido utilizadas de forma bem sucedida em diversos setores da engenharia. Dos quais, podem ser destacados os de dinâmica estrutural (SAAD; GHANEM, 2013; CORRADI *et al.*, 2013), vibrações (LI; GHANEM, 1998 e GHIOCEL; GHANEM, 2002), soldagem (SHENG; WANG, 2018) e nas áreas de fluidodinâmica computacional e combustão (CHEN; GOTTLIEB; HESTHAVEN, 2005; KNIO; MAITRE, 2006 e REAGANA *et al.*, 2003).

De acordo com Sheng e Wang (2018) o aPCE, ou de forma extensiva conhecido apenas por expansão em polinômio caos (PCE), tem atualmente ganhado destaque extra em comparação as técnicas (também) não intrusivas do PC e gPCE. Isto, devido a grande quantidade de distribuições estatísticas que possibilitam a formação das bases ortogonais do polinômio desta técnica. Já, em comparação a alguns dos métodos de quantificação de incerteza baseados em amostragem (Monte Carlo e LHC), o PCE destaca-se pela proporcional eficiência computacional em relação ao baixo número de amostras necessárias para a avaliação dos sistemas incertos; bem como, pelo usual e reduzido tempo empregado nas simulações numéricas. Características estas, as quais segundo Marelli e Sudret (2015) provém da utilização de modelos reduzidos (metamodelos) para a obtenção dos momentos estatísticos de primeira e segunda ordem (Eqs. 2.3 e 2.4) dos sistemas avaliados. Eliminando, desta forma, a recursiva e dispendiosa interação com o modelo determinístico inicial.

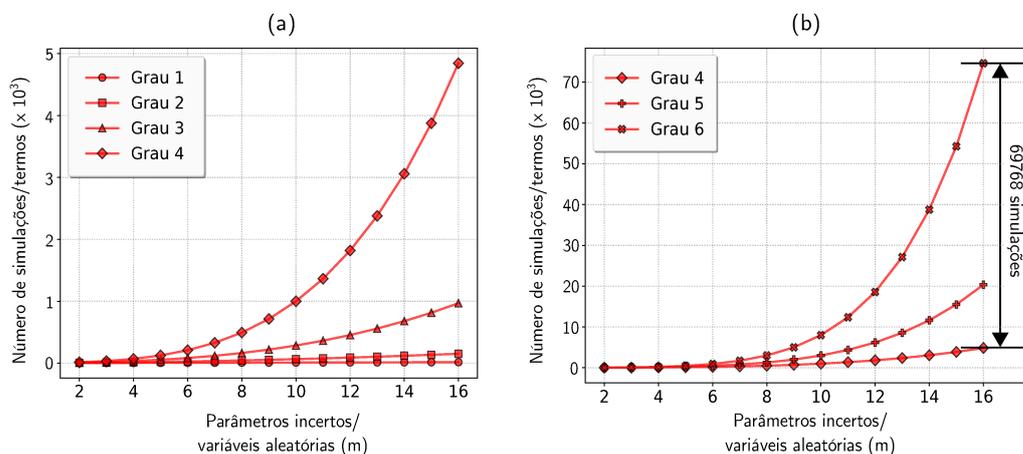
Segundo Sepahvand, Marburg e Hardtke (2010), adicionalmente a funcionalidade de substituir o modelo estocástico inicial por um funcional, o PCE apresenta de forma conveniente a necessidade de calcular apenas uma única vez os coeficientes da expansão polinomial do meta-modelo. Os quais, são obtidos por técnicas tais como a da projeção espectral descrita por Maître e Knio (2010) e da colocação estocástica discutida em Xiu (2010) e Vucinic, Leta e Janardhanan (2019).

Neste contexto, e apesar das muitas vantagens da representação dos sistemas estocásticos por um metamodelo baseado no PCE, alguns desafios surgem frente a almejada consolidação e universalidade da técnica. Sendo o principal desafio, o conhecido como “*curse of dimensionality*” (maldição da dimensionalidade). O qual, segundo Doostan e Iaccarino (2008) esta associado a quantidade de variáveis incertas avaliadas (m), ao grau máximo dos polinômios ortogonais (p), a cardinalidade ($\text{card } \mathcal{A}$) do modelo simplificado e ao número de simulações computacionais necessárias para a convergência do processo de metamodelagem.

De modo que, a Eq. 2.5 exemplifica matematicamente a correlação entre o grau máximo da expansão polinomial truncada e a quantidade de parâmetros incertos avaliados, os quais quantificam o crescimento exponencial do número de termos a serem calculados pelo PCE via combinação de fatores, tal como também pode ser visualizado pela Fig. 2.9.

$$\text{card } \mathcal{A} = N_t = \binom{m+p}{p} = \frac{(m+p)!}{m! p!} \quad (2.5)$$

Figura 2.9 – Avaliação gráfica do mal da dimensionalidade relativa a metamodelagem usando o PCE. (O autor, 2021)



Na Fig. 2.9, na qual os gráficos (a) e (b) descrevem o crescimento do número de amostras

em função do aumento dos parâmetros incertos, o mal da dimensionalidade fica evidente; isto, pela acentuada característica não linear de algumas das curvas exibidas. As quais, passam a apresentar comportamento aproximadamente exponencial na medida em que o grau da expansão polinomial aumenta, assim como a quantidade de parâmetros incertos.

De forma específica, as expansões polinomiais do 4^o e 6^o grau (escolhidas aleatoriamente) podem ser tidas como exemplo. Uma vez que, para $m = 16$ e uma diferença de apenas duas unidades no grau máximo das expansões polinomiais esperadas, as mesmas diferem de maneira absoluta em 69768 simulações necessárias para convergência do processo de metamodelagem, tendo cada uma cerca de 5 e 75 mil termos gerados (Eq. 2.5). Quantidades para as quais, o método do PCE transita ligeiramente entre o limite da viabilidade ou torna-se proibitivo, tal como avaliado por [Sudret \(2015\)](#). Adicionalmente, a característica assintótica das curvas fica explícita ao compararmos o perfil da expansão polinomial do 4^o grau nas figuras (a) e (b), a qual apresenta-se com característica exponencial no gráfico (a) e praticamente linear na figura (b), isto devido a acentuada distorção gerada pelo abrupto crescimento da curva que representa o polinômio truncado do 6^o grau para os valores de $m \geq 10$.

Assim, visando a utilização do PCE em sistemas com alta dimensionada duas alternativas podem ser aplicadas para contornar o mal da dimensionalidade. A primeira, a qual consiste na técnica proposta por [Blatman e Sudret \(2009\)](#) chamada de “*low-rank polynomial*” (classificação dos polinômios de baixa ordem); e a segunda, a qual é utilizada neste trabalho, e compreende na composição entre o método de Monte Carlo, a técnica do PCE e da análise de sensibilidade global (apresentada a seguir), de modo a reduzir o número de parâmetros propagados em direção a resposta final dos sistemas incertos.

2.2.2.3 Análise de sensibilidade

As técnicas de análise de sensibilidade, assim como as de propagação de incertezas, segundo [Ghanem, Higdon e Owhadi \(2017\)](#), têm ganhado a cada dia mais espaço nas avaliações científicas e mercadológicas. Isto, devido a acentuada evolução e ampla utilização de rebuscadas representações físicas e numéricas dos sistemas analisados. Tais representações, conhecidas como “*modelos*”, beneficiam-se do avanço tecnológico, e principalmente computacional da atualidade ([IACCARINO, 2009](#)); possibilitando, de acordo com [Borgonovo e Plischke \(2016\)](#), a composição

e alternância experimental de inúmeras características dos sistemas físicos.

Todavia, e pela perspectiva do pesquisador Robert Rosen (1991) descrita por Saltelli *et al.* (2008), os modelos como parte de um sistema natural e mutável caracterizam-se como representações auto-contidas de um determinado instante (muito específico) de análise; de modo que, a universalidade dos mesmos fica restrita a perspectiva do responsável por sua proposição. Assim, é factível assumir que os modelos mesmo quando bem desenvolvidos e sendo compostos por inúmeras variáveis exploratórias, têm apenas alguns resquícios em quantidade e intensidade que realmente descrevem as leis gerais dos sistemas avaliados ou do “mundo real”.

Neste contexto, a análise de sensibilidade apresenta-se como uma técnica multipropósito, podendo ser aplicada no processo de quantificação e avaliação dos parâmetros de um modelo, sob a perspectiva global como a aplicada neste trabalho ou local como a descrita por Saltelli *et al.* (2008). De modo que, seja possível verificar a existência e o grau de correlação entre os parâmetros do mesmo (NGUYEN; REITER, 2015), na calibração e desempenho (LOUCKS *et al.*, 2005) dos sistemas modelados frente as inerentes incertezas de projeto; e por fim, na avaliação e compreensão das quantidades física modeladas.

De maneira formal, a técnica de análise de sensibilidade (do inglês “*Sensitivity Analysis*” - SA) pode ser definida tal como expresso por Saltelli (2004). Por meio da qual, é realizado o estudo de como as incertezas nos parâmetros de saída podem ser devidamente distribuídos as diferentes fontes de incerteza nos parâmetros de entrada do modelo avaliado.

CAPÍTULO III

MODELO MATEMÁTICO

No presente capítulo, a modelagem matemática utilizada para a construção do código computacional de evaporação da gota combustível será apresentada, tendo como referência estrutural os trabalhos publicados por Lefebvre e McDonell (2017), Rauch (2018) e principalmente o publicado por Pinheiro e Vedovoto (2019). Sendo as equações de Nusselt e Sherwood apresentadas de forma enfática, uma vez que as mesmas passaram do rígido padrão clássico as versáteis equações denominadas como NuSh-nat (*Nusselt and Sherwood natural equations*) propostas no presente trabalho.

Adicionalmente, também serão apresentadas as clássicas equações associadas as técnicas de propagação de incertezas mediante expansão polinomial do caos (PCE) e as referentes ao processo de análise de sensibilidade via índices de Sobol (SA-Sobol). Todavia, as mesmas não serão caracterizadas termo-a-termo visto que o PCE e a SA foram utilizados no presente trabalho como um *framework* estocástico.

3.1 Modelagem matemática para evaporação da gota de n -heptano

O sistema de equações utilizado para a modelagem da gota de n -heptano evaporando em meio inerte de nitrogênio, seguiu no presente trabalho a abordagem clássica (ou quase-estacionária) de equacionamento. Sendo, o termo base da variação de massa dado pela Eq.

3.2, a qual corresponde a derivada ordinária da massa específica, Eq. 3.1.

$$\frac{dD_d}{dt} = -\frac{2\dot{m}_d}{\pi\rho_l D_d^2}, \quad (3.1)$$

$$\rho_l = \frac{m_d}{V_d} \rightarrow m_d = \rho_l V_d. \quad (3.2)$$

Nas quais, o termo m_d corresponde a massa da gota em processo de evaporação, \dot{m}_d a taxa de evaporação da gota, ρ_l a massa específica da gota de *n*-heptano, D_d o diâmetro da gota e V_d o volume de líquido de *n*-heptano.

Ainda em relação ao termo mássico, a taxa de evaporação pode ser explicitamente verificada pela Eq. 3.3, conhecida como equação de Stefan-Maxwell,

$$\dot{m}_d = 2\pi R_d \rho_m D_{vm} Sh_m \ln(1 + B_M), \quad (3.3)$$

na qual os sub-escritos *m* representam a mistura do vapor de *n*-heptano e o gás ambiente, R_d o raio da gota, ρ_m a específica da mistura, D_{vm} o coeficiente de difusão ou difusividade da mistura, Sh_m (número de Sherwood da mistura) a transferência ou circulação de massa na superfície da gota líquida e B_M o número de Spalding. Sendo, os dois últimos também considerados matematicamente como termos de ponderação.

Assim, e sob tal perspectiva, B_M é representado pela Eq. 3.4

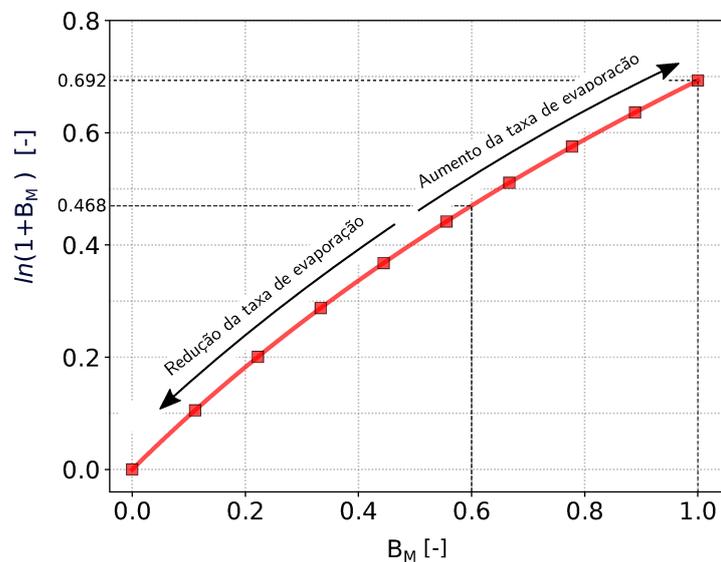
$$B_M = \frac{Y_{vs} - Y_{vg}}{1 - Y_{vs}} = \frac{Y_{vs}}{Y_{vg}} - 1, \quad (3.4)$$

na qual Y_{vs} e Y_{vg} , tal como exemplificado por Pinheiro e Vedovoto (2019), denotam respectivamente as frações mássicas de vapor sobre a superfície da gota e tendendo ao infinito, ou seja, a uma distância muito grande da mesma. Todavia, a Eq. 3.4, tal como apresentada não permite a compreensão dos efeitos causados por B_M sobre a taxa de evaporação indicada na Eq. 3.3. Assim, o termo apropriado a tal propósito é o descrito pelo trecho de equação $\ln(1 + B_M)$, o qual esta simultaneamente associado ao número de Spalding e a equação de variação de massa da gota.

Deste modo, e com o auxílio da Fig. 3.1 verifica-se que quanto maior o número de Spalding, maior é a tendência de aumento da taxa de evaporação da gota avaliada. Entretanto, como

a relação de crescimento ou redução entre B_M e $\ln(1 + B_M)$ não resulta em uma interação linear, então a taxa expressa pela Eq. 3.3 fica limitada a 69.2% do potencial máximo calculado (ou efetivo), isto, considerando apenas a influência do termo de Spalding sobre o processo de evaporação. Em sentido oposto, a premissa também é verdadeira, uma vez que, a diminuição de B_M acarreta em uma conseqüente diminuição de \dot{m}_d , assim, considerando apenas a influência do gradiente mássico no processo de conversão de massa, quanto menor a fração de vapor de n -heptano sob a superfície da gota (Y_{vs}) maior tende a ser a capacidade efetiva de evaporação da mesma.

Figura 3.1 – Avaliação dos efeitos da redução e aumento do número de Spalding sobre a taxa de evaporação da gota líquida. (O autor, 2021)



Utilizando interpretação similar a aplicada ao número de Spalding, o adimensional Sh_m apresentado na Eq. 3.3 pode ser compreendido. Todavia, o número de Sherwood detém conceitos intrínsecos muito mais relevantes ao contexto global do processo de evaporação do aqueles associados ao termo B_M . Conceitos estes, de difícil representação matemática e principalmente de complexa interpretação física, os quais geram dentre a comunidade científica especializada inúmeras divergências a respeito da melhor e mais adequada formulação a ser aplicada na representação dos efeitos destes adimensionais sob o processo de evaporação das gotas combustíveis.

Neste sentido, uma das principais correlações utilizadas tanto para o cálculo de Sh_m quanto de Nu_m , sendo este último o adimensional responsável pela quantificação das trocas térmicas ao redor da gota líquida, de acordo com Sazhin *et al.* (2006), é o equacionamento de Ranz-Marshall

(RM) apresentado na Eq. 3.5.

$$RM : \begin{cases} Nu_m = 2 + 0.6Re_d^{1/2}Pr_m^{1/3}, \\ Sh_m = 2 + 0.6Re_d^{1/2}Sc_m^{1/3}. \end{cases} \quad (3.5)$$

Tal equação (3.5), exibi os números de Sheerwood (Sh_m) e Nusselt (Nu_m) variando respectivamente em torno de outros dois adimensionais, os números de Schmidt (Sc_m) e Prandl (Pr_m). Os quais, pela interpretação física e matemática da formulação são dependentes da existência de um escoamento forçado nas fronteiras da gota combustível. Isto, em função do fator multiplicador representado pelo número adimensional de Reynolds (Re_d), o qual é representado pela Eq. 3.6 e composto pela massa específica da gota líquida (ρ_l), pelo diâmetro inicial da gota evaporando ($D_{d,o}$), pela velocidade do escoamento subjacente a gota combustível (V_{esc}) e pelo termo de viscosidade dinâmica da massa líquida (μ_l).

$$Re_d = \frac{\rho_l D_{d,o} V_{esc}}{\mu_l}, \quad (3.6)$$

Contudo, desconsiderar os efeitos de viscosidade cinemática (ν_m) e de difusividade térmica (α_m), Eq. 3.7 (Sc_m - Schimidt); bem como, os de viscosidade dinâmica (μ_m), difusidade mássica (D_{vm}), do calor específico (c_{p_m}) e condutividade térmica (k_m) da mistura vapor de combustível e gás ambiente, Eq. 3.8 (Pr_m - Prandl), apenas pela inexistência de um escoamento forçado, seria os mesmo que ignorar por completo a existência do significativo escoamento de Stefan, do fenômeno de “*sweeling*” e até mesmo do importante fenômeno da convecção natural (Sub-sec. 2.1.1).

$$Sc_m = \frac{\mu_m}{\rho_m D_{vm}} = \frac{\nu_m}{D_{vm}}. \quad (3.7)$$

$$Pr_m = \frac{\mu_m c_{p_m}}{k_m} = \frac{\nu_m}{\alpha_m}. \quad (3.8)$$

Desta forma, a correlação proposta na presente dissertação (Eq. 3.9 e 3.10), a qual foi obtida pelo processo de calibração do tipo “*toy*”, visa re-significar e principalmente possibilitar

que efeitos ou fenômenos induzidos por questões de forma, e por gradientes mássicos ou térmicos sejam verificados mesmo na ausência de escoamentos forçados atuando sobre a gota combustível.

$$NuSh - nat : \begin{cases} Nu_m = C_1 + C_2 (Gr^{C_3} + Re_d)^{0.5} Pr_m^{C_4} ; \\ Sh_m = C_1 + C_2 (Gr^{C_3} + Re_d)^{0.5} Sc_m^{C_4}. \end{cases} \quad (3.9)$$

$$C_{1-5} : \begin{cases} C_1 = (x_5 + T_{ref,g}) + (T_{ref,d} + Gr) x_1; \\ C_2 = Gr [1 - (T_{ref,g} + x_3)] x_2; \\ C_3 = x_4; \\ C_4 = T_{ref,g}. \end{cases} \quad (3.10)$$

Assim, os coeficientes C_2 e C_4 das equações NuSh-nat foram dispostos de modo a evidenciar a importância e influência da temperatura crítica (T_c) do combustível em relação a temperatura do ambiente circundante (T_g), Eq. 3.10. De modo que, tais coeficientes continuem a existir mesmo em sistemas onde a gravidade padrão (g_o) passe a ser tratada como gravidade reduzida ($g_o \times 10^{-2}$); ou seja, em sistemas nos quais têm-se a necessidade de evitar os efeitos gravitacionais, seja para a compreensão de possíveis fatores ocultos pelo processo de convecção natural ou pela real aproximação gravitacional do meio externo ao valor de $g_o \times 10^{-2}$. Adicionalmente a Eq. 3.11 representa respectivamente as temperaturas de referência em relação a temperatura ambiente/do gás ambiente ($T_{ref,g}$) e a temperatura de referência em relação a temperatura da gota (T_d) combustível ($T_{ref,d}$), ambas criadas como equações auxiliares aos sistemas de Eqs. 3.9 e 3.10.

$$T_{ref,g} = \frac{|T_g - T_c|}{T_c} ; \quad T_{ref,d} = \frac{|T_d - T_c|}{T_c} . \quad (3.11)$$

O coeficiente C_4 , todavia, foi adicional como termo de exponenciação ao número de Grashoff (Gr), Eq. 3.12, tendo como objetivo garantir que em sistemas envolvendo escoamento forçado os efeitos da convecção da natural não sobreponha em nenhuma dos passos de tempo das simulações numéricas o valor de Reynolds. Já C_5 foi alocado junto a aos adimensionais Pr_m e Sc_m de modo a controlar as variações de massa e trocas térmicas, isto utilizando o processo de otimização diferencial o qual será mencionado nas seções a seguir.

$$Gr_d = \frac{g\rho_g^2(T_g - T_d)D_d^3}{T_g\mu_m^2}. \quad (3.12)$$

Por fim, C_1 é posto como termo constante na Eq. 3.9 como forma de garantir as mínimas variações térmica e de massa para os períodos nos quais a gota combustível apresenta baixo aquecimento, ou seja, em situações onde a estrutura líquida da gota passa a apresenta, mesmo que de forma reduzida, o processo de expansão e contração de volume, tal como é verificado durante o período de pré-aquecimento ilustrado pela Fig. 2.6. Tal constância do coeficiente C_1 , contudo, difere-se do termo constante “2” da correlação de Ranz-Marshall; isto, em função da variação do termo associado x_5 (Tab. 5.1), o qual atrela C_1 ao comportamento da substância evaporada. Assim, o coeficiente C_1 pode assumir valores distintos para os casos nos quais as propriedades do combustível analisado sejam muito distantes das características do combustível utilizado no presente trabalho, o *n*-heptano.

Com relação às trocas térmicas entre a gota e meio externo, três situações são consideradas nos cálculos de quantidade de calor. A primeira corresponde ao calor latente (Q_L), o qual representa a quantidade de energia térmica efetivamente utilizada pela gota para transicionar/transformação de fase, Eq. 3.13. Na referida equação de Q_L , L_v corresponde a calor latente de vaporização, e a equação assumi valor negativo devido ao propósito ao qual a referida quantidade de energia térmica é destinada, ou seja, para a transformação da fase de líquido ao vapor.

$$Q_L = -L_v\dot{m}_d. \quad (3.13)$$

A segunda situação associada ao contexto das trocas térmicas, é aquele no qual toda a energia térmica da gota líquida é quantificada (Eq. 3.14). Nesta situação é importante que a diferença entre vaporização e evaporação seja compreendida. Uma vez que, a evaporação corresponde a mudança de fase sofrida pelo líquido a temperatura abaixo da temperatura de ebulição. Ao passo que vaporização, é o processo de transição do estados líquido ao estado gasoso, atingido após aquecimento da substância a temperatura igual ou muito próxima da temperatura de ebulição da substância pura avaliada.

Deste modo, Q_{vap} representa o calor total absorvida pela gota de *n*-heptano e G o fator de ponderação entre a energia disponível no ambiente externo e a quantidade absorvida pela gota.

$$Q_{vap} = G\pi D_d Nu_m k_m (T_g - T_d). \quad (3.14)$$

Onde o fator G apresentado a seguir de acordo com a formulação da Eq. 3.15.

$$G = \frac{\beta}{e^\beta - 1}; \quad \beta = -\frac{\dot{m}_d c_{p_m}}{2\pi k_m D_d}. \quad (3.15)$$

Assim, a terceira situação relacionada as trocas térmicas da gota líquida de n -heptano, corresponde ao somatória (Eq. 3.16) das equações Eq. 3.13 e Eq. 3.14. O qual, resulta na quantidade de calor (Q_s) sensível absorvido pela gota no decorrer do processo de evaporação.

$$Q_s = Q_L + Q_{vap}. \quad (3.16)$$

Neste contexto, no qual o efetivo cálculo das trocas térmicas apresenta-se como ferramenta fundamental para a descrição do comportamento de evaporação da gota combustível. As equações desenvolvidas no presente (equações NuSh-nat) foram associadas às correções propostas por Abramzon e Sazhin (2006) ao modelo quase-estacionário (ou clássico) de evaporação (Eq. 3.17 e 3.18). Sendo as equações NuSh-nat acopladas aos termos Sh_m^* e Nu_m^* .

$$F_M = (1 + B_M)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M}; \quad F_T = (1 + B_T)^{0.7} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T}, \quad (3.17)$$

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh_m - 2}{F_M}; \quad Nu^* = 2 + \frac{Nu_m - 2}{F_T}. \quad (3.18)$$

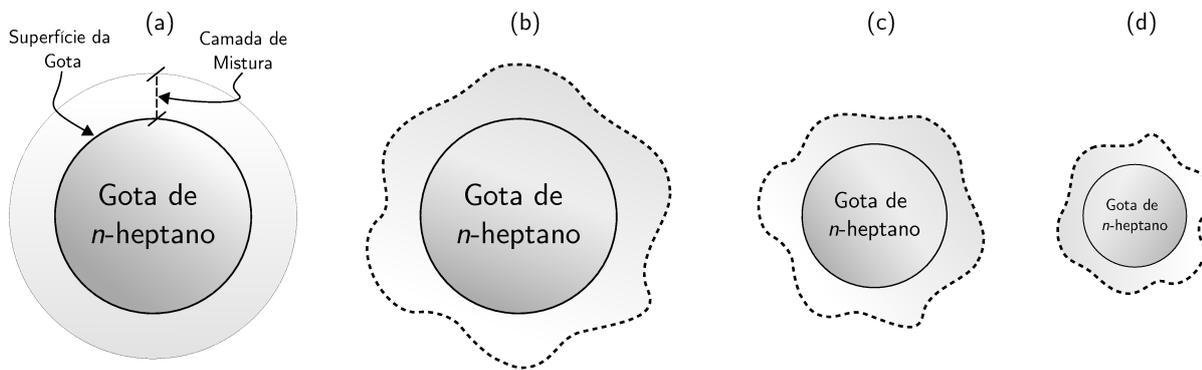
Por fim, todas as propriedades termofísicas do processo de evaporação da gota combustível de n -heptano, foram calculadas utilizando a ponderação α entre as regiões gasosa (meio externo a gota) e da superfície da gota líquida, tal como é apresentado nas Eq. 3.19 e 3.20, e verificado nas publicações de Sparrow e Gregg (1958), Sazhin (2014) e Lefebvre e McDonell (2017).

$$T_m = T_s + \alpha (T_g - T_s), \quad (3.19)$$

$$Y_{vm} = Y_{vs} + \alpha (Y_{vg} - Y_{vs}). \quad (3.20)$$

No presente trabalho, assim como feito para as equações NuSh-nat, α não foi mantido constante como sugerido por Sparrow e Gregg (1958). Tendo o mesmo variado proporcionalmente ao valor calculado pela formulação de Grashoff (Gr), respeitando deste modo, as distorções criadas pelo processo de convecção natural na região da camada de mistura da gota. Tal como apresentado pela Fig. 3.2

Figura 3.2 – Representação das gotas de n -heptano em períodos distintos de evaporação com as respectivas camadas de mistura distorcidas. (O autor, 2021)



Assim, na Fig. 3.2 uma mesma gota é apresentada em tempos distintos de evaporação. Sendo a gota inicial aquela representa na figura (a) e a gota próxima da extinção a ilustrada pela letra (d). Nestas figuras, a camada de mistura é exemplificada de forma distorcida para as três últimas amostras, tal distorção é resultado da ação do fenômeno de convecção natural que se processa nas imediações da gota líquida de n -heptano. Sob tal perspectiva, utilizar a regra do 1/3 para determinar a posição da fronteira da camada de mistura, e por consequência a ponderação para os cálculos das propriedades termofísicas seria uma disparidade abrupta entre a representação matemática das equações anteriores e as suposições físicas de oscilação produzidas pelo fenômeno de convecção natural.

Desta forma, a ponderação α utilizada para o cálculo das relações médias foi atribuído conforme as condições da Eq. 3.21, apresentada a seguir.

$$\alpha : \begin{cases} \frac{1}{3} , & \text{se } Gr > \frac{1}{3}; \\ Gr , & \text{se } Gr \leq \frac{1}{3}. \end{cases} \quad (3.21)$$

3.2 Modelagem matemática para os processos estocásticos

No presente trabalho, as incertezas aleatórias subjacentes ao problema de evaporação de gotas descrito acima são descritas por um formalismo probabilístico paramétrico (Soize, 2017), onde os parâmetros incertos são modelados como variáveis aleatórias. De acordo com os objetivos do capítulo, apenas a sub-etapa (E.1) representada tanto no *black-box* da Fig. 3.3 quanto da Fig. 3.4 teve o equacionamento pertinente apresentado.

3.2.1 Formulação para a análise de sensibilidade

Na presente dissertação a análise de sensibilidade global foi realizada utilizando a técnica dos índices de Sobol, sendo esta avaliada por meio do método de Monte Carlo.

Assim, e de acordo com Marelli *et al.* (2019), a variância total da função $f(\mathbf{Q})$ necessária aos cálculos dos índices de Sobol e representada por:

$$\mathbb{V}[Y] = \int_{\mathcal{D}_Q} f^2(\mathbf{q}) d\mathbf{q} - f_0^2, \quad (3.22)$$

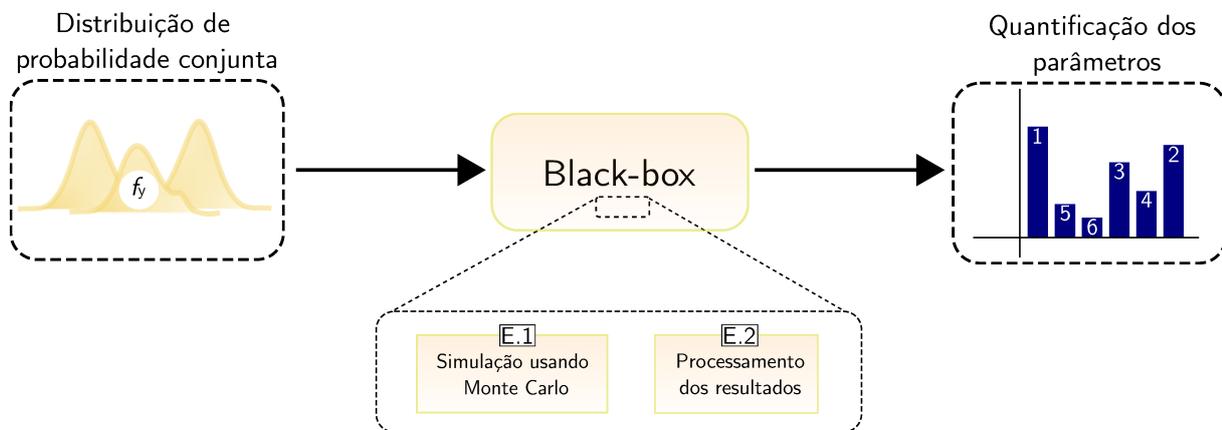
na qual f_0 corresponde ao valor esperado de $f(\mathbf{q})$, também denotado por $\mathbb{E}[f(\mathbf{q})]$, e \mathcal{D}_Q aos valores suporte das distribuições associados ao sistema avaliado; com a variância parcial representada pela equação Eq. 3.23,

$$\mathbb{V}[\mathbb{E}(Y | \mathbf{Q}_i)] = \int_0^1 \dots \int_0^1 f_{i_1, \dots, i_s}^2(q_{i_1}, \dots, q_{i_s}) dq_{i_1} \dots dq_{i_s}, \quad (3.23)$$

com $1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq M; s = 1, \dots, M$, pode ser calculada utilizando o método de Monte Carlo representado a seguir na Fig. 3.3 pela etapa 1 (E.1) dentro do *black box*.

No qual “ n ” realizações são computadas e processadas por meio das Eq. 3.24 e 3.25, gerando a quantificação dos parâmetros/índices de Sobol (Fig. 3.3) respectivamente de primeira ordem e totais.

Figura 3.3 – Sistema esquemático ilustrando o processo de cálculo dos índices de Sobol. (O autor, 2021)



Desta forma, pode-se particularizar que a Eq. 3.24, a qual representa a quantificação dos índices de Sobol de primeiro ordem, realiza a decomposição da variância do conjunto resposta Y ; isto, em função das variáveis aleatórias (V.A) testadas relativamente ao valor total da variabilidade do referido conjunto. Assim, cada V.A analisada (q_i) assume valor complementar de sensibilidade até o limite de uma unidade (1 u.d) ou de 100% em relação a $\mathbb{V}[Y]$, sem que interações adjacentes sejam consideradas.

$$S_{i_1, \dots, i_s} = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}(Y | \mathbf{Q}_i)]}{\mathbb{V}[Y]}, \quad (3.24)$$

Já, a Eq. 3.25 apresenta o cálculo dos índices totais de Sobol, nela são considerados os efeitos principais de cada parâmetro e também a influência dos parâmetros adjacentes, ou seja, a sensibilidade de uma variável q_i avaliada sofre influência direta do restante do conjunto \mathbf{Q} . Sendo cada índice total representado também em escala de 0 à 100% de forma complementar.

$$S_i^T = \sum_{\{i_1, \dots, i_s\} \supset i} S_{i_1, \dots, i_s}. \quad (3.25)$$

3.2.2 Formulação para a propagação de incertezas

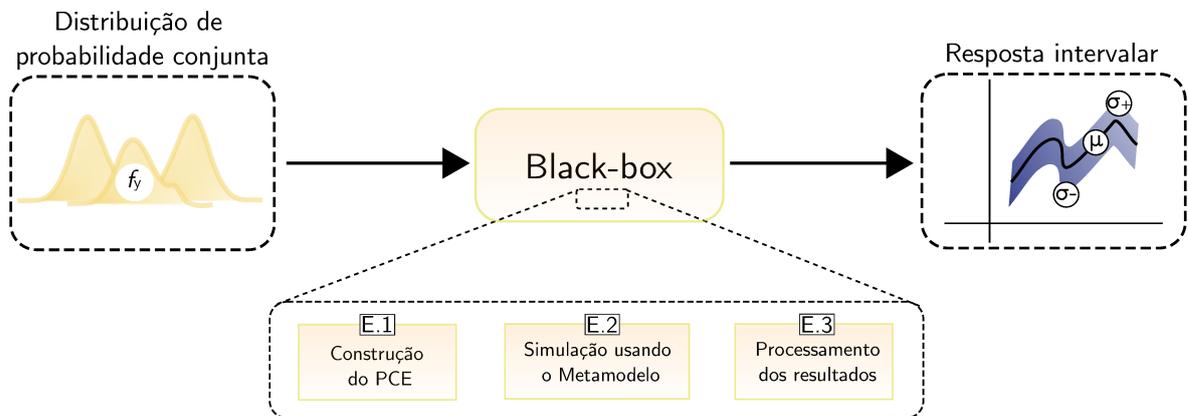
O modelo representado pela expansão arbitrária em polinômio caos, tal como descrita por Sudret (2015), pode ser caracterizada pelo polinômio $\mathcal{M}^{PCE}(\mathbf{Q})^4$ apresentado na Eq. 3.26.

⁴ O processo de obtenção dos coeficientes y_α e das bases ortogonais $\Psi_\alpha(\mathbf{Q})$ pode ser verificado de forma detalhada em Sudret (2015).

$$Y = \mathcal{M}^{PCE}(\mathbf{Q}) = \sum_{\alpha=0}^{\infty} y_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{Q}) \quad (3.26)$$

No qual, y_{α} pertencente aos reais denota os coeficientes da expansão polinomial a serem determinados durante a etapa E.1 da Fig. 3.4, ao passo que, $\Psi_{\alpha}(\mathbf{Q})$ descreve os polinômios ortonormais multivariados da expansão polinomial (também determinados em E.1), a qual em teoria pode ser composta por infinitos termos ($\text{card } \mathcal{A} \mapsto \infty$).

Figura 3.4 – Sistema esquemático ilustrando o processo propagação de incertezas via PCE. (O autor, 2021)



Todavia, uma representação contendo infinitos termos torna-se computacionalmente proibitiva, assim como para alguns casos envolvendo as simulações de Monte Carlo, bem como inimaginável sob a perspectiva da engenharia. Assim, a expansão polinomial apresentada na Eq. 3.26 passa a ser truncada no termo P , tal como pode ser verificado na Eq. 3.27 e pela sequências das bases multivariadas do PCE ($\Psi_0(\mathbf{Q}), \Psi_1(\mathbf{Q}), \Psi_2(\mathbf{Q}), \dots, \Psi_p(\mathbf{Q})$).

$$Y \simeq \mathcal{M}^{PCE}(\mathbf{Q}) = \sum_{\alpha=0}^P y_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{Q}) + \varepsilon_P \quad (3.27)$$

Tal truncamento, produz sobre as respostas geradas pelo PCE um erro, o qual é representado na equação anterior pelo termo ε_P . Assim, é comum e de extrema importância que a qualidade do polinômio truncado seja testada ou descrita por meio de alguma métrica de avaliação do erro, tal como a apresentada na Eq. 3.28 conhecida como *leave-one-out cross-validation*, ou por coeficiente de correlação de validação cruzada.

$$Q^2 = 1 - \frac{PRESS_{cv}}{\mathbb{V}[Y]} \quad (3.28)$$

Na qual, $PRESS_{cv}$ (acrônimo em inglês de *predicted residual sum of squares cross validation*) representa a soma dos quadrados dos erros de predição de validação cruzada (Eq. 3.29) entre as respostas obtidas pelo modelo inicial (\mathcal{M}) e pelo metamodelo (\mathcal{M}^{PCE}), com as avaliações variando de $i = 1$ até $i = n$, tal como apresentados na Eq. 3.30.

$$PRESS_{cv} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Delta_i^2, \quad (3.29)$$

$$\Delta_i \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{M}(\mathbf{q}_i) - \mathcal{M}^{PCE}(\mathbf{q}_i). \quad (3.30)$$

A variância ($\mathbb{V}[Y]$) apresentada na Eq. 3.28, por sua vez é calculada pela formulação expressa na Eq. 3.31, na qual y_i denota os valores discretos obtidos nas simulações computacionais e \bar{y} a média de todas as respostas numéricas.

$$\mathbb{V}[Y] = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2. \quad (3.31)$$

Neste contexto, a métrica Q^2 é utilizada no presente trabalho como parâmetro de convergência/calibração para a escolha do grau mais apropriado ao metamodelo gerado via PCE para o processo de evaporação de gotas combustíveis, visto que, quanto maior é o valor de Q^2 (0 à 100%) calculado por meio da Eq. 3.28 mais adequado é o grau da expansão polinomial associada ao referido coeficiente.

CAPÍTULO IV

MODELO COMPUTACIONAL

O presente capítulo apresentará a metodologia empregada nas simulações computacionais de evaporação da gota combustível descrita nos Cap. 2 e 3 desta dissertação. De modo a estabelecer o conjunto de etapas realizadas para a criação, execução e tratamento dos resultados obtidos pelo código desenvolvido neste trabalho. Conceitos de programação estruturada e orientada a objeto serão apresentados e discutidos de modo a descrever e justificar a relação entre os módulos de evaporação (principal) e de análise de incerteza (estocástico), ambos implementados em linguagem de programação Python.

A ferramenta computacional Cantera (GOODWIN *et al.*, 2018), utilizada para os cálculos das propriedades termofísicas de evaporação da gota será caracterizada de forma a justificar a utilização da mesma em detrimento a outros softwares e pacotes computacionais de mesmo propósito.

Os pacotes computacionais de análise de sensibilidade – SALib (HERMAN; USHER, 2017) – assim como os de análise de incerteza – Uncertainpy (TENNØE; HALNES; EINEVOLL, 2018) e Chaospy (FEINBERG; LANGTANGEN, FEINBERG; LANGTANGEN) – utilizados nas simulações estocásticas do processo evaporativo serão descritos de maneira sucinta, com exceção às funções destas bibliotecas as quais foram modificados para atender aos objetivos do referido trabalho; essas últimas serão apresentadas em detalhes.

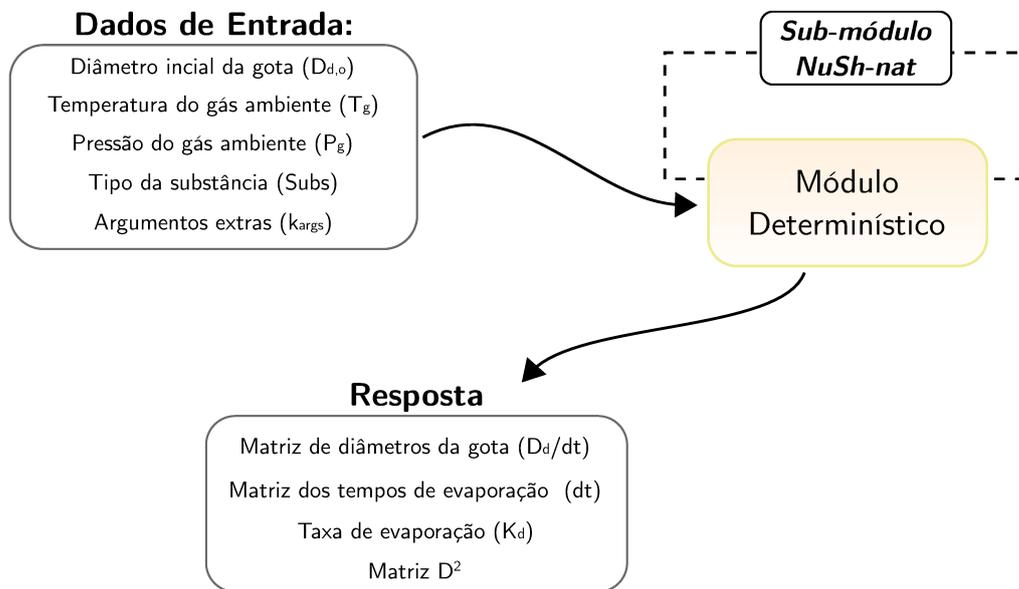
Desta forma, o capítulo encontra-se dividido nas seguintes seções: módulos globais de simulação (4.1), paradigmas de programação aplicados ao código (4.2), fluxogramas das simulações

(4.3), bibliotecas termofísicas (4.4), bibliotecas estocásticas (4.5) e método de integração das equações diferenciais ordinárias (4.6).

4.1 Módulos globais da simulação

O código computacional criado para a simulação estocástica de evaporação da gota combustível (de *n*-heptano), é constituído essencialmente por dois grandes grupos de bibliotecas interconectadas e codificadas em linguagem programação Python; os módulos determinístico (principal) e estocástico, representados pelas Fig. 4.1, 4.2 e 4.3. Nas quais os seguimentos fechados indicam o ciclo padrão do código de evaporação, ao passo que os seguimentos pontilhados representam os desvios condicionais associados ao código principal para os cálculos das propriedades termofísicas das substâncias em estudo (Fig. 4.1); e também para a análise de sensibilidade e incerteza das quantidades de interesse envolvidas no processo de evaporação da gota combustível (Fig. 4.2).

Figura 4.1 – Módulos determinístico da simulação numérica de evaporação. (O autor, 2021)



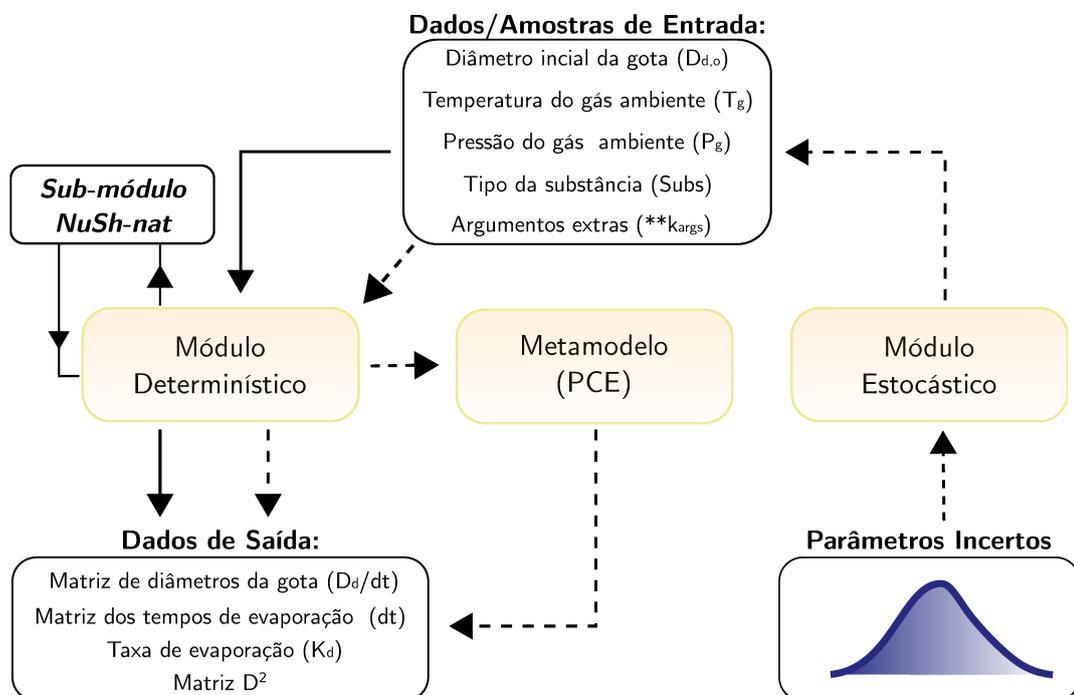
O módulo determinístico (Fig. 4.1) responsável pelo efetivo processo de evaporação da gota foi implementado utilizando as equações apresentadas no Cap. 3, seguindo o paradigma de programação estruturada o qual será descrito na Sub-sec. 4.2.1.

No referido módulo o conjunto dos dados de entrada ($D_{d,o}$, T_g , P_g , $Subs$ e k_{args}) são definidos de forma específica, atendendo aos requisitos básicos das simulações de evaporação de

uma gota combustível, tal como apresentado por Pinheiro *et al.* (2018). Ou seja, nenhum tipo de distribuição amostral ou procedimento estatístico é utilizado para a construção do conjunto dos dados de entrada. Deste modo, quaisquer variações nos valores iniciais das simulações tem como resultado efeitos evolutivos (em relação ao tempo) sob a resposta final do processo de evaporação, reduzindo ou intensificando a taxa de decomposição da gota (K_d), modificando positivamente ou negativamente o valor do diâmetro da mesma (D_d) a cada passo de tempo (dt) e alterando (mesmo que linearmente) a lei D^2 .

Adicionalmente, o módulo principal além de simular sequencialmente o processo de evaporação também possui gatilhos apropriados (seção 4.3) para a ativação de sub-módulos internos e de comunicação com módulos externos, tais como o sub-módulo *NuSh-nat* e o módulo estocástico. Podendo, dessa maneira, trabalhar de forma associada as mais diversas técnicas e sistema de simulação. Tais como os apresentados em projetos de atomizadores ou em simulações envolvendo a cinética química da combustão.

Figura 4.2 – Módulos da simulação numérica de evaporação. (O autor, 2021)



Na Fig. 4.2 o ciclo completo de simulação numérica de evaporação da gota combustível é apresentado. Por meio desta, fica evidente que o módulo determinístico atua como agente central das simulações. Uma vez que, mesmo durante o ciclo estocástico (segmentos pontilhados) o referido módulo é executado; seja para as simulações de Monte Carlo ou para a criação do

metamodelo de expansão em polinômio caos.

Na mesma representação esquemática (Fig. 4.2) o sub-módulo *NuSh-nat* (Eq. 3.9), de nomenclatura proveniente dos números adimensionais Nusselt e Sherwood aplicados ao processo de convecção natural, é representado pelo ciclo acoplado ao módulo determinístico. O qual é habilitado de forma explícita (por ação direta do usuário) em simulações onde a gota evaporada não se trata do composto orgânico *n*-heptano. Permitindo assim, simulações computacionais de gotas de diferentes substâncias puras ou daquelas com pureza próxima a 100%, como a de etanol anidro.

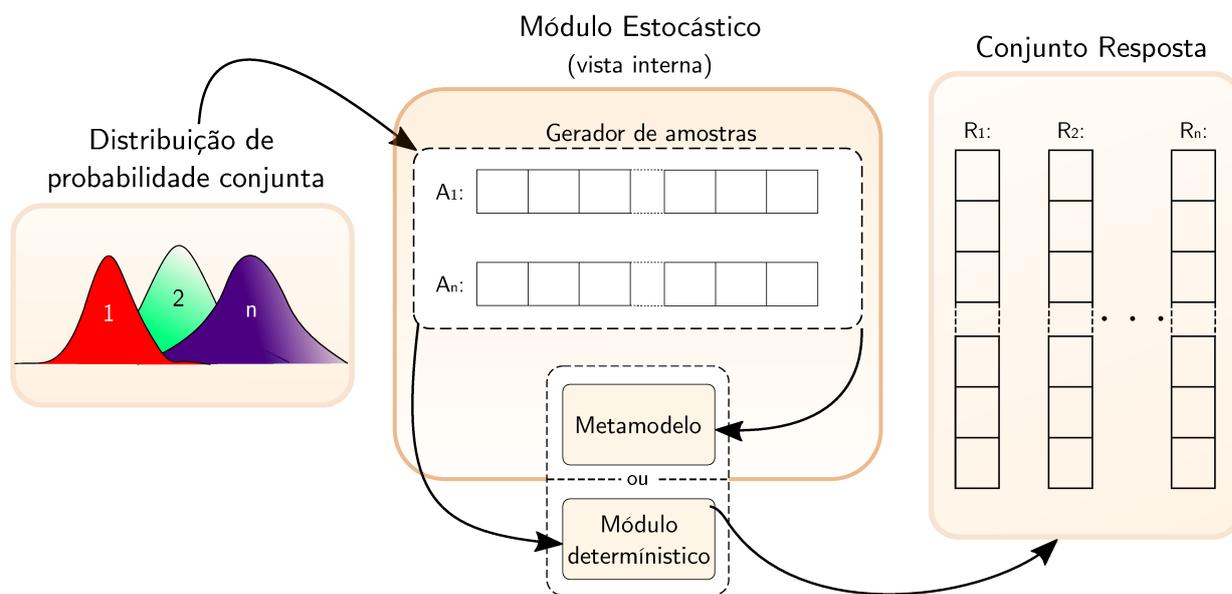
Desta forma, o sub-módulo (*NuSh-nat*) é descrito no contexto dos módulos globais do código de evaporação em função da grande influência deste sobre os dados de saída nas simulações determinísticas, e por consequência sobre o processo de criação do metamodelo PCE utilizado nas simulações estocásticas. Tornando-o, assim, uma das contribuições mais relevantes do presente trabalho.

Já o módulo estocástico, é o responsável pelas avaliações estatísticas de evaporação da gota combustível e pelo processamento de todos os dados probabilísticos pertinentes as simulações estocásticas. Sendo composto pelas bibliotecas *Uncertainpy*, *Chaospy* e *SALib*, todas encarregadas de pelo menos uma das etapas do processo de análise de sensibilidade e propagação de incerteza, Cap. 2. As quais enviam e recebem dados de forma recursiva do/para o módulo determinístico.

Na Fig.4.3 a simulação estocástica é resumida. Nela o processo tem início após a atribuição das distribuições de probabilidade aos parâmetros avaliados, os quais são enviados ao módulo estocástico e a depender do método de simulação escolhido estes são utilizados dentro do próprio módulo pelo metamodelo, ou fora do mesmo pelo módulo determinístico. De modo que, ao fim das simulações o conjunto resposta é gerado.

Neste contexto, o módulo estocástico juntamente ao módulo determinístico formam o sistema de simulação numérica de evaporação da gota combustível; de modo que, o processo de experimentação computacional realizado no presente trabalho deve ser entendido a partir do contexto global apresentado nesta seção, seguindo até as particularidades dos fluxos de informações entre as funções e sub-módulos que serão apresentados e discutidos nas seções a seguir.

Figura 4.3 – Simulação estocástica do processo de evaporação. (O autor, 2021)



4.2 Paradigmas de programação aplicados ao código

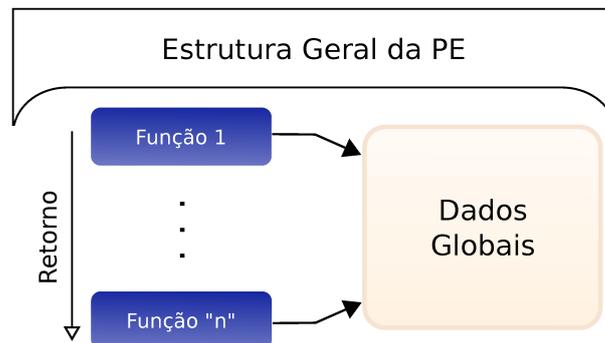
Os conceitos e paradigmas de programação são partes fundamentais na representação e simulação numérica de sistemas físicos. Os resultados obtidos destes experimentos computacionais em geral são tão melhores quanto melhor for a lógica e o procedimento aplicado na modelagem e codificação do sistema estudado.

Neste sentido, o modelo computacional de evaporação avaliado neste trabalho foi construído e implementado sob a perspectiva da programação orientada a objeto (POO) e da programação estruturada (PE), de modo a obter o melhor fluxo de informação possível entre os módulos e sub-módulos apresentados na Sec. 4.1, e também entre as funções do código fonte; valendo-se essencialmente dos conceitos de sequencialidade e abstração, apresentados a seguir.

4.2.1 Programação estruturada

A programação estruturada segundo os autores Ascencio e Campos (2008), e Jackson e MA (1975) corresponde a um paradigma de programação que obedece a três tipos básicos de estruturas: a sequencial, condicional e a de repetição (iteração). Sendo resultado desse conjunto lógico a ilustração a seguir.

Figura 4.4 – Modelo de programação estruturada. (O autor, 2021)



Na Fig. 4.4 a estrutura de dados da PE está sequencialmente ordenada da função 1 até a função “n”, de modo que, cada uma destas funções executa ações sobre os dados globais apenas ao fim do processo anterior. Desta forma, fica explícito a característica sequencial da programação estruturada e implícito a característica condicional do referido paradigma de programação, haja visto que existe uma estrutura de decisão não representada mas inerente ao processo de execução das funções subsequentes.

Sob tal perspectiva, o módulo principal do código de evaporação foi implementado (Fig. 4.1). Nele o paradigma de programação estruturada condiciona a execução da maior parte das funções auxiliares ao retorno gerado pela função anterior. Assim, qualquer inconsistência no retorno de alguma das funções implica na interrupção quase imediata da simulação, mesmo que nenhum tipo de tratamento de erro tenha sido implementado.

Esse tipo de interrupção do código, apesar de parecer contraproduziva, é extremamente útil e computacionalmente econômica. Isto pois, evita que erros do tipo “**NaN**” (*not a number*) sejam sobrescritos por dados de interações anteriores, e de forma indireta tenham influência sobre o resultado final da simulação. Adicionalmente, a interrupção da simulação por erros relacionados ao retorno das funções suplanta a necessidade de codificação dos característicos erros de sintaxe e exceção presentes na linguagem de programação Python, os quais adicionam custos de processamento e complexidade às simulações.

A função `pvs_func` (Fig. 4.5) implementada para o cálculo da pressão de vapor da gota retrata precisamente o descrito acima, uma vez que essa função é uma das primeiras e mais importantes funções executadas na simulação de evaporação. Assim, se por motivos difusos a mesma retornar um valor de `pvs_s` igual a “**NaN**” ou minimamente inconsistente com a física do

problema a função seguinte, a qual é dependente deste retorno, encerra a execução do código por não reconhecer como válido o valor fornecido.

Figura 4.5 – Função Python para o cálculo da pressão de vapor do *n*-heptano. (O autor, 2021)

```

1 def pvs_func(subs, Tda, T_C):
2
3     if subs == 'n-heptane':
4         C = numpy.array([87.829, -6996.4, -9.8802, 7.2099e-6, 2])
5     else: # ethanol
6         C = numpy.array([74.475, -7164.3, -7.327, 3.3140e-6, 2])
7
8     return np.exp(C[1] + (C[2]/Tda) + (C[3] * log(Tda)) + (C[4] * (Tda**C[5])))

```

Desta forma, o paradigma de programação estruturada torna consistente e seguro o fluxo de informação entre as funções do código principal, além de possibilitar a rápida identificação e correção de erros durante as simulações de evaporação da gota combustível.

4.2.2 Programação orientada a objetos (POO)

A programação orientada a objeto (POO), também empregada no código de evaporação, é descrita por Arlow e Neustadt (2005) como uma técnica de ação e abstração de dados. Sendo um esquema de codificação altamente rebuscado e muito eficiente na modelagem de sistemas de alta complexidade. A qual se preocupa em equalizar a importância tanto da estrutura de execução como de abstração de dados.

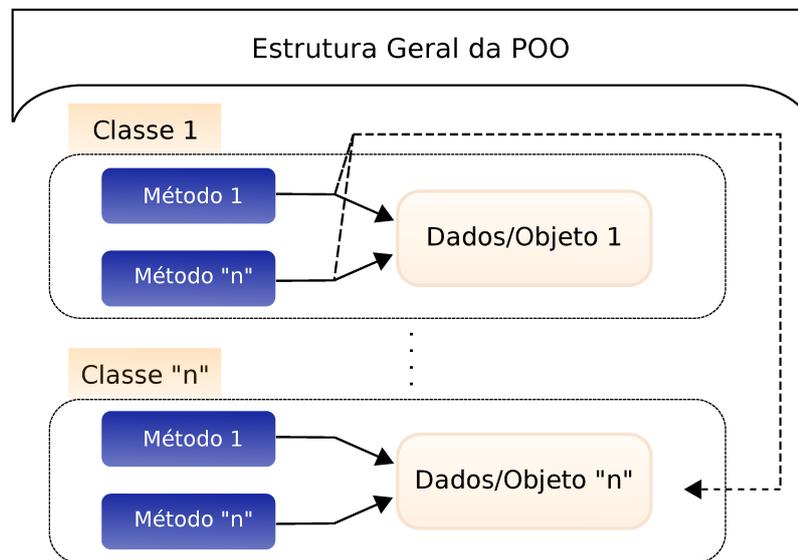
Sendo a estrutura de execução aquela correspondente à descrita na seção anterior, ao passo que a estrutura de abstração esta representada na figura seguir, Fig. 4.6.

O modelo exemplificado na Fig. 4.6 descreve de maneira genérica a estrutura da POO, na qual as classes são representadas por agrupamentos parcialmente distintos que encapsulam os objetos e os métodos que agem sobre estes. Neste modelo é possível verificar que algumas classes contornam o sistema de encapsulamento aos quais estão submetidas e passam a utilizar os métodos característicos de outras classes. Esse processo é conhecido como herança e somente é possível por meio de um sistema de referência da classe “Pai” dentro da estrutura da classe “filha”.

Ainda na Fig. 4.6, a herança esta representada pelo seguimento pontilhado saindo dos métodos da classe 1 e agindo sobre o dados da classe “n”. De modo que, as informações abstraídas

do objeto 1 não são expostos ao restante do código mesmo quando alguns dos métodos dessa classe são usados em uma classe “filha”.

Figura 4.6 – Modelo de programação orientada a objeto. (O autor, 2021)



Desta forma, no paradigma de programação orientada a objetos as classes são estruturadas em torno de um objeto provedor de informações. O qual é fragmentado ao nível da própria definição, sendo possível abstrair conceitos gerais para a construção da classe que o representa. No contexto do presente trabalho, pode-se compreender os conceitos de abstração e objeto tomando como referência o exemplo de cálculo da probabilidade binomial realizado pela classe apresentada a seguir.

No código `Probabilidade_Binominal` (Fig. 4.7) escrito em Python o objeto é representado/instanciado pela classe probabilidade binomial. Ou seja, é possível criar múltiplos objetos que conservam os atributos da classe `Probabilidade_Binominal` mais que armazenam valores distintos de probabilidade. Assim, as informações que juntas qualificação e possibilitam o cálculo da referida probabilidade são considerados os atributos obtidos por abstração do objeto. Os quais, para o referido caso estão representados pelos “ n ” eventos, os “ k ” sucessos obtidos e a probabilidade “ p ” de um evento favorável a acontecer. Assim, desconsiderando o conhecimento específico a respeito da técnica de probabilidade apresentada, é possível estabelecer e compreender a relação entre objeto e atributo.

Tal relação é de fundamental importância para a modelagem e modificação das bibliotecas que compõem o módulo estocástico do código de evaporação. Uma vez que, os pacotes compu-

tacionais utilizados (SALib e Uncertainpy) empregam amplamente o paradigma de orientação a objeto. Tornando-os sistemas com elevada organização, mas com baixo desempenho computacional e de difícil alteração.

Figura 4.7 – Função Python para o cálculo da probabilidade binomial. (O autor, 2021)

```

1  import numpy
2
3  class Probabilidade_Binomial(object):
4
5      def __init__(self,n,k,p):
6          self.n = n # n repetições
7          self.k = k # k sucessos
8          self.p = p # probabilidade p
9          self.q = 1 - self.p # probabilidade complementar
10
11     def probCalc(self):
12         ''' Calcula a probabilidade se obter 'k' sucessos em 'n' tentativas '''
13         fatorialCalc = lambda num: numpy.prod(numpy.arange(1,num+1))
14
15         self.Comb = fatorialCalc(self.n)/(fatorialCalc(self.k) *
16                                         fatorialCalc(self.n - self.k))
17         return self.Comb* (self.p)**self.k * (self.q)**(self.n - self.k)

```

4.3 Fluxogramas das simulações

A apresentação feita a respeito dos módulos determinístico e estocástico nas seções anteriores teve como objetivo estabelecer a conexão entre o modelo físico do processo de evaporação e o modelo computacional implementado em linguagem de programação Python; enfatizando as técnicas e os paradigmas de programação utilizados no código de evaporação. Neste sentido, a presente seção apresentará de forma objetiva os fluxogramas referentes aos processos de evaporação da gota combustível simulada neste trabalho. Adicionalmente, as etapas de implementação do código serão utilizadas como ferramenta descritiva dos fluxogramas apresentados.

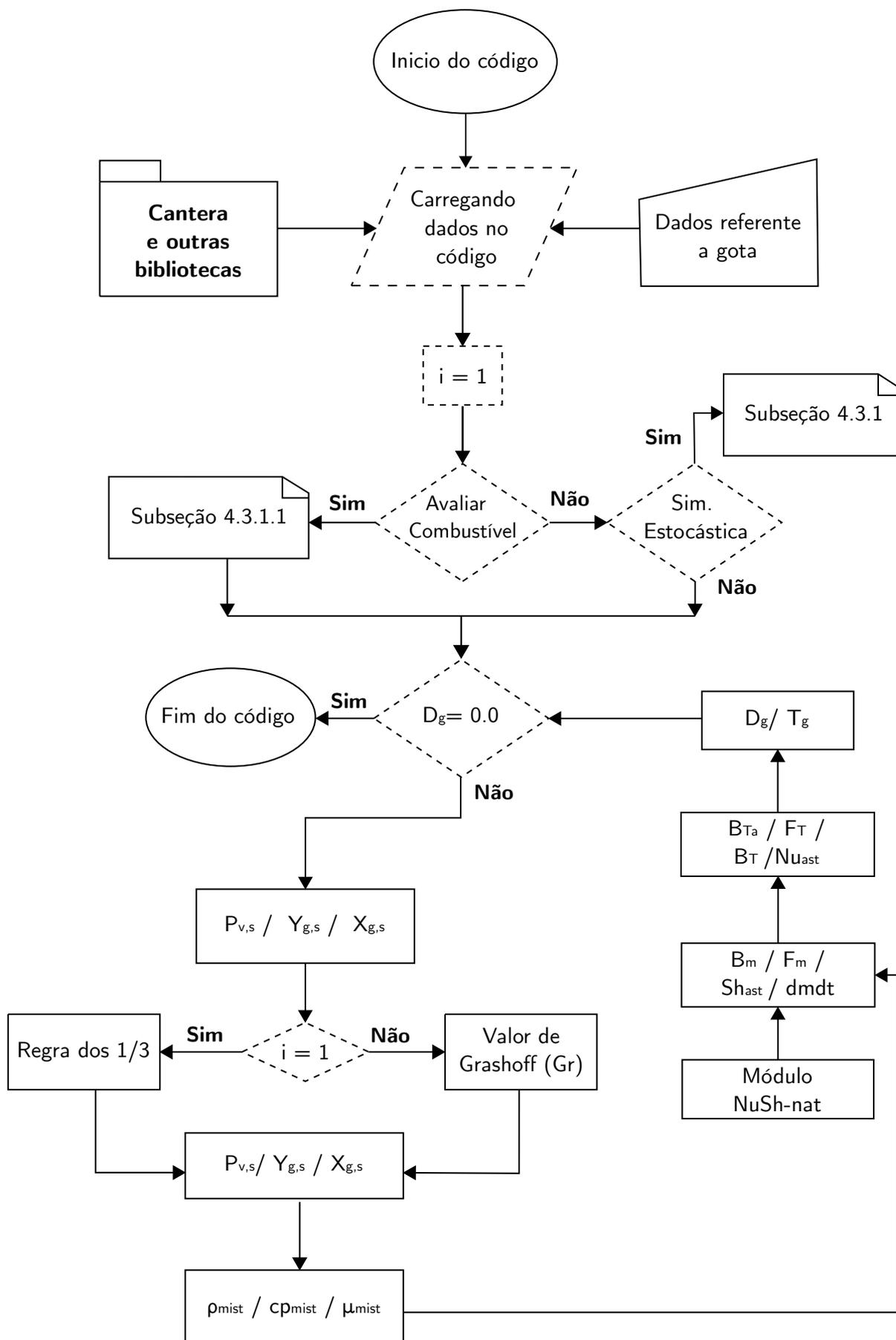
4.3.1 Fluxograma do módulo determinístico

O módulo determinístico apresentado na Fig. 4.1 tem uma estrutura de execução essencialmente sequencial (PE) associada a um sistema de verificação condicional que direciona a execução do código a ações específicas. Tais ações estão concatenadas no algoritmo da Tab. 4.1 e no fluxograma da Fig. 4.9, ambos apresentados a seguir.

Tabela 4.1 – Etapas do código determinístico. (O autor, 2021)

Etapas do código determinístico
1 - O processo de interpretação do código de evaporação tem início com a inserção dos dados de entrada da gota combustível;
2 - As propriedades térmicas e de transporte referentes ao processo de evaporação são carregadas no código por meio do estanciamento da biblioteca Cantera;
3 - O ciclo da simulação começa na inicialização do contador “ <i>i</i> ”;
4 - Verifica-se a substância simulada e o modo de execução do código;
5 - Verifica-se o valor do diâmetro atual da gota;
6 - O cálculo da pressão de vapor é realizado possibilitando a quantificação das frações mássica e molar de vapor na superfície da gota;
7 - Os parâmetros médios de temperatura, frações mássica e molar são calculados utilizando a regra de $\frac{1}{3}$ para $i = 1$ e Gr para $i > 1$;
8 - As propriedades termofísicas da mistura são obtidas por meio do objeto do item 4.1;
9 - Verifica-se qual combustível está sendo avaliado. Se não for necessário re-calcular os índices do sub-módulo <i>NuSh-nat</i> o código continua a execução, senão \mapsto (4.3.1.1);
10 - Os adimensionais Nusselt (Nu) e Sherwood (Sh) são calculados utilizando o sub-módulo <i>NuSh-nat</i> ;
11 - O cálculo da transferência de massa (B_M , F_M , Sh_{ast} e $dmdt$) é realizado;
12 - A transferência de energia térmica (B_{Ta} , F_T , Nu_{ast} , B_T) é calculada;
13 - Os cálculos de variação da temperatura e diâmetro da gota são realizados;
14 - As informações de K_g , dD_{go}/dt e tempo são processadas e verifica-se o D_{go} atual da gota.

Figura 4.8 – Fluxograma do módulo determinístico. (O autor, 2021)



4.3.1.1 Fluxograma de adaptação do sub-módulo *NuSh-nat*

Ao contrário do apresentado no fluxograma da Sub-sec. 4.3.1, o sistema de adaptação do sub-módulo *NuSh-nat* não é executado a cada nova simulação e também não tem a função específica de calcular os números adimensionais Nusselt e Sherwood para um processo específico, tal como é feito pelo próprio sub-módulo *NuSh-nat* da Tab. 4.1.

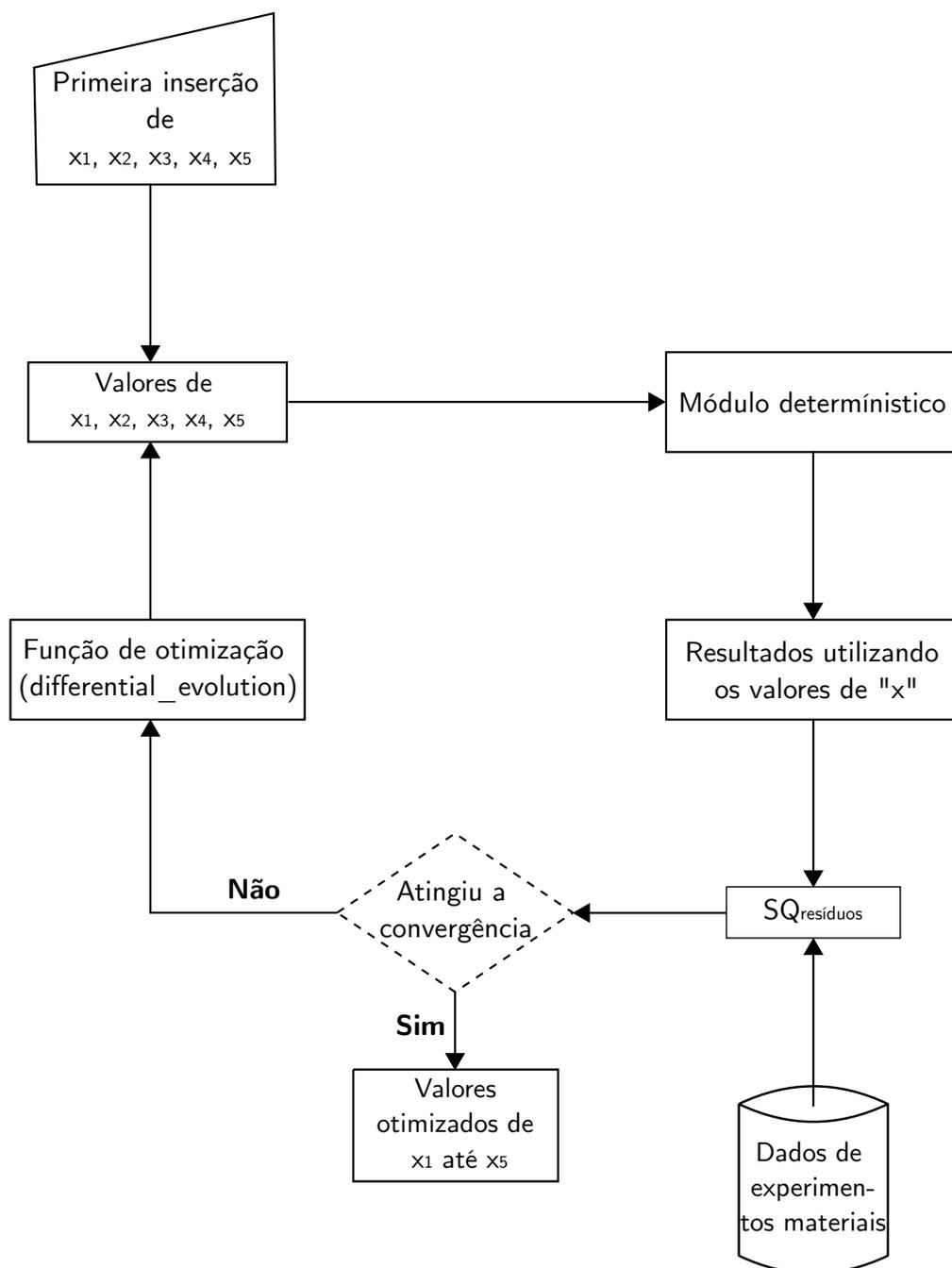
O código de adaptação tem a função de gerar por meio do processo de otimização um conjunto de constantes que, integradas à Eq. 3.9, possibilitam os cálculos futuros de Nu e Sh que melhor se aproximam do processo de evaporação real (experimentação material) a gravidade (g_0) padrão de 9.81 m/s^2 ou reduzida de $g_0 \times 10^{-2} \text{ m/s}^2$.

Desta forma, o fluxograma apresentado na Fig. 4.10 o qual é detalhado nas etapas da Tab. 4.2 descreve o processo de otimização aplicado ao módulo *NuSh-nat* para o combustível *n*-heptano. Todavia, o mesmo processo pode ser aplicado a combustíveis diferentes do simulado nesta dissertação.

Tabela 4.2 – Algoritmo de adaptação do código *NuSh-nat*. (O autor, 2021)

Etapas do código de adaptação do módulo *NuSh-nat*

- 1 - Primeira atribuição dos valores de x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 ;
 - 2 - Associando o módulo determinístico e os valores/intervalos dos do sub-módulo *NuSh-nat*;
 - 3 - Resultados obtidos por meio dos valores de x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 ;
 - 4 - Cálculo do quadrado dos resíduos (SQ_{res}) entre o item 3 e os valores de experimentos materiais contidos nos bancos de dados do sistema de evaporação;
 - 5 - Verificação da convergência do método. Se sim, fim da simulação e impressão dos valores de x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 . Se não, item 6;
 - 6 - Função de otimização Python, `differential_evolution` (dif_evol ou DE), recebe valores anteriores de x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 e retorna um novo conjunto otimizado para o recomeço do ciclo.
-

Figura 4.9 – Fluxograma de adaptação do sub-módulo *NuSh-nat*. (O autor, 2021)

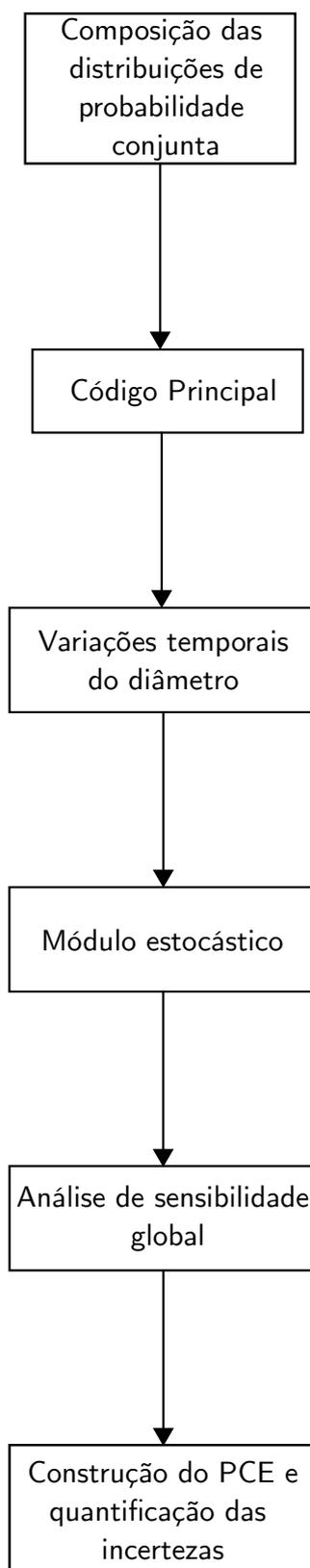
4.3.2 Fluxograma do módulo estocástico

O módulo estocástico, tal como apresentado anteriormente, é caracterizado por executar de forma auxiliar e também independente ao módulo principal; gerando amostras aleatorizadas para as simulações do código determinístico e calculando a estatística ao fim das i^{th} simulações realizadas, ou ainda gerando o modelo aproximado (PCE) e por via deste simulando o processo. Assim, o fluxograma da Fig. 4.10 o qual é detalhado pelas etapas da Tab. 4.3 apresentará o fluxo de informação da/entre as bibliotecas Chaospy e Uncertainpy.

Tabela 4.3 – Algoritmo do código estocástico. (O autor, 2021)

Etapas do código estocástico
1 - As distribuições amostrais relativas as variáveis incertas são criadas utilizando as bibliotecas Chaospy e Scipy. E as “ n ” amostras provenientes destas distribuições são enviadas ao código principal;
2 - O código principal simula a evaporação da gota combustível usando as “ n ” amostras (pelo método de monte carlo) e retorna como resultado as variações dos diâmetros da gota em cada instante de tempo;
3 - O módulo estocástico recebe a matriz de resultados do código principal e aciona a biblioteca SALib. A qual realiza a análise de sensibilidade e fornece a contribuição relativa de cada variável incerta em base total que varia de 0 a 1;
4 - As bibliotecas Uncertainpy e Chaospy são importadas e as estruturas características dessas bibliotecas são criadas;
5 - O metamodelo por meio da biblioteca Chaospy é criado usando a técnica do polinômio do caos expandido.
6 - As amostras relativas aos parâmetros incertos de maior significância são criadas, e por meio do metamodelo associado a estrutura paralelizada da biblioteca Uncertainpy tais amostras são processadas e retornam o conjunto de dados referentes a estatística das simulações.

Figura 4.10 – Fluxograma do módulo estocástico O autor, 2020



4.4 Bibliotecas termofísicas

As propriedades térmicas e de transporte, também conhecidas como propriedades termofísicas (BERGMAN; LAVINE; QUEIROZ, 2014) utilizadas nas simulações de evaporação da gota combustível foram obtidas diretamente da ferramenta computacional Cantera, a qual será descrita nessa seção. Todavia, outros pacotes computacionais como os pacotes *thermo* e CAPE-OPEN (KOOIJMAN; TAYLOR, 2000) também foram testados durante as simulações de evaporação, de modo que, o desempenho dos mesmos quando associados ao código de evaporação será apresentado.

4.4.1 CAPE-OPEN e thermo

O pacote CAPE-OPEN originalmente integrado ao simulador de processos químicos COCO, apresentou bom desempenho nos cálculos das propriedades termofísicas utilizadas nas simulações de evaporação. Podendo, até certo ponto, ser comparado a biblioteca Cantera. Contudo, o referido pacote teve como principal impedimento a interface computacional necessária para sua utilização, haja visto que, o mesmo demanda do sistema operacional proprietário Windows para a execução do instalador e correto aproveitamento de suas funcionalidades. Fato o qual, tornou inviável o uso do referido pacote no conjunto das simulações envolvendo a evaporação da gota combustível.

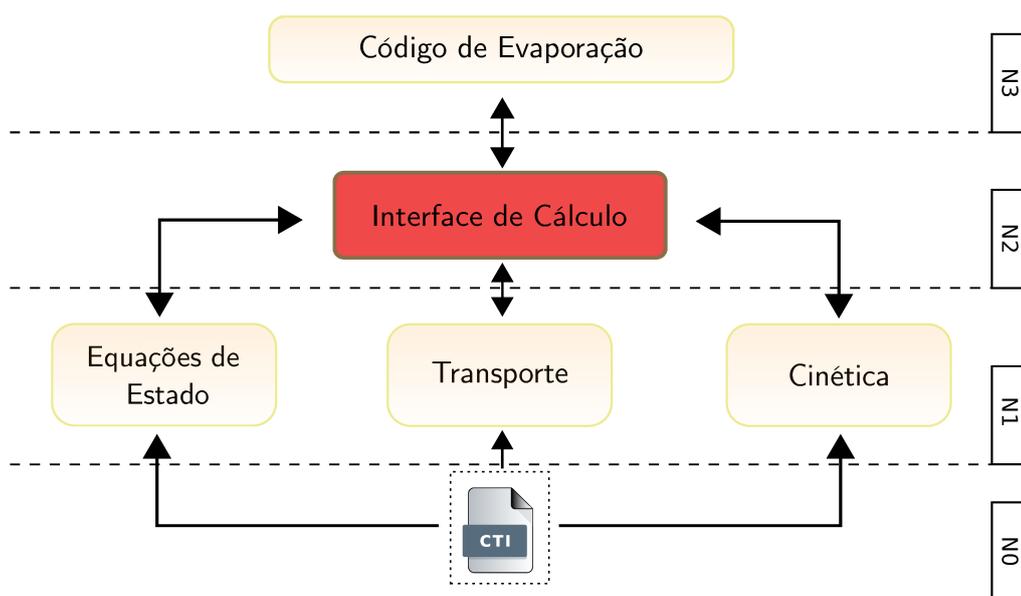
Já a biblioteca *thermo* escrita em Python e disponível no repositório oficial da linguagem, apresentou grandes problemas na execução de chamadas sucessivas de curto prazo às propriedades térmicas necessárias ao processo de evaporação. Assim, a mesma quando colocada em execução junto ao *looping* do código principal, ainda na etapa dos cálculos determinísticos, reduziu o desempenho médio do processo em aproximadamente 6 vezes em relação ao pacote CAPE-OPEN e a ferramenta Cantera utilizadas sob as mesmas condições.

Contudo, é razoável assumir que tal obstáculo poderia ser minimizado se a biblioteca possuísse uma documentação mais bem estruturada a respeito do processo de implementação e de interação desta com o interpretador da linguagem Python. Assim, por não ser bem documentada e reduzir o desempenho do processo, a presente versão da biblioteca *thermo* foi desconsiderada para as simulações de evaporação da gota combustível determinísticas e estocásticas.

4.4.2 Cantera

A biblioteca Cantera definida como um conjunto de ferramentas de código aberto para solução de problemas envolvendo cinética química, termodinâmica e processos de transporte voltados principalmente para a utilização junto as linguagens de programação Python, Matlab, C++ e Fortran 90 (GOODWIN *et al.*, 2018) apresentou, dentre todas as opções elencadas, o melhor desempenho computacional e flexibilidade durante as simulações numéricas de evaporação. Tal resultado esta associado essencialmente a simplicidade da estrutura modular utilizada pela ferramenta e às formas de armazenamento e consulta das espécies químicas no sistema de arquivo “.cti” da mesma.

Figura 4.11 – Estrutura de comunicação e armazenamento de dados da ferramenta Cantera. (O autor, 2021)



Na Fig. 4.11, a estrutura modular apresentada pelo Cantera utiliza dois sistemas de segmentação, os de fluxos de informação e os de níveis de execução. Os fluxos de informação correspondem as setas que saem de um nível interno até outro mais externo transmitindo dados, ao passo que os níveis de execução são as quatro camadas principais da referida biblioteca. Nas quais os arquivos com dados elementares sobre as espécies químicas estão armazenados (arquivos “.cti”) no nível 0 (N0), os modelos/módulos matemáticos utilizados para os cálculos das propriedades e reações químicas estão no nível 1 (N1) , o efetivo processo de cálculo ao qual o Cantera é destinado se encontra no nível 2 (N2) e o nível 3 (N3) corresponde ao nível usuário/-

código fonte. Esse sistema segmentado em fluxos e níveis possibilita a criação pontual de objetos (Sub-sec.4.2.2) sem que haja, durante as simulações computacionais, a sobrecarga de memória e processamento com recursos da biblioteca que não serão utilizados.

Seguindo a mesma lógica da estrutura geral, os dados dos arquivos *cti* (N0) também apresentam um sistema de modularização. Nestes arquivos as informações pertinentes aos sistemas químicos são dispostas em estruturas sequenciais similares as funções python, mesmo estando inseridas em um contexto de orientação a objeto. Assim, os dados das espécies e reações químicas no Cantera estão dispostos dentro dos arquivos *cti* em: dados de fase e interface, dados de espécies/elementos químicos e dados de reações químicas.

Os dados de fase e interface são essencialmente invocados e utilizados pelas equações de estado e transporte representadas na figura anterior. Ao passo que os dados das reações químicas são usados basicamente (mas não exclusivamente) para os cálculos de cinética química.

Neste contexto, o código de evaporação da gota combustível utiliza apenas os arquivos *cti* (Apêndice A) e os métodos referentes as equações de estado e transporte, os quais são estanciados pela classe *Solution*. De modo, a tirar proveito da estrutura segmentada e pré-compilada (".pyx"⁵) da ferramenta cantera durante as sucessivas chamadas feitas no transcorrer das simulações de evaporação da gota combustível.

4.5 Bibliotecas estocásticas

4.5.1 *Chaospy*

A biblioteca *Chaospy*, uma das três bibliotecas responsáveis pelos cálculos probabilísticos, é utilizada no presente trabalho de forma integrada ao módulo estocástico; sendo a principal responsável pelo processo de propagação de incerteza nas simulações de evaporação da gota combustível.

De acordo com seus autores (FEINBERG; LANGTANGEN,2015) a referida biblioteca deve ser considerada uma ferramenta numérica voltada para a quantificação de incerteza usando a técnica de expansão em polinômio caos e o método de monte carlo, ambos implementados em

⁵ Para maiores informações a respeito do processo de compilação em python (".pyx") consultar <<https://cython.org/>>.

linguagem de programação Python.

Os módulos da “*lib*” Chaospy, além do definido por seus desenvolvedores, também permite a construção de distribuições conjuntas e independentes, bem como o método de copula. Assim, durante o processo de simulação estocástica de evaporação da gota os parâmetros considerados incertos foram associados a distribuição uniforme e integrados a distribuição conjunta pelo método `cp.J()`.

Em relação a propagação de incerteza, a técnica utilizada no presente trabalho foi a da expansão em polinômio caos via método de colocação de pontos. Contudo, a biblioteca Chaospy também possui outros métodos como o método pseudo espectral e a possibilidade de uso externo do método LARS.

Adicionalmente, a biblioteca Chaospy permite a análise de sensibilidade por meio do PCE, o qual é considerado um método relativamente eficiente para as avaliações nas quais o número de variáveis incertas não é tão extensa como a quantidade avaliada no processo de evaporação da gota combustível.

Desta forma, a referida biblioteca foi utilizada na presente dissertação apenas para o cálculo da propagação de incerteza sobre o processo de evaporação. Deixando a cargo da biblioteca SALib as avaliações dos parâmetros mais influentes associados a evaporação da gota de *n*-heptano.

4.5.2 SALib

A biblioteca SALib, tal como mencionada anteriormente, foi utilizada nas simulações estocásticas de evaporação da gota combustível para avaliar os parâmetros mais influentes deste processo.

De acordo com os autores [Herman e Usher \(2017\)](#), a referida biblioteca escrita em Python tem por finalidade realizar a análise de sensibilidade (local e global) por meio de um sistema modularizado dividido em: geração de amostras e cálculo dos índices mais expressivos, seguindo as etapas da Tab. 4.4.

Tabela 4.4 – Algoritmo do código estocástico. (O autor, 2021)

Etapas de execução da biblioteca SALib.
1 - Determinação dos parâmetros e escolha dos intervalos a serem testados;
2 - Execução do método <code>sample</code> , sobre os atributos da etapa 1, para a criação de amostras;
3 - Avaliação do modelo utilizando as amostras do etapa 2;
4 - Execução do método <code>analyze</code> para o cálculo dos índices mais expressivos.

Todavia, a sequência de etapas da tabela anterior foi alterada, de modo a possibilitar a utilização da biblioteca SALib nas simulações de evaporação da gota combustível. Tal alteração não se deu propriamente na sequência de execução da biblioteca, e sim no recurso de amostragem apresentado na etapa 2 da Tab.4.4.

Deste modo, o método `sample` da biblioteca foi substituído por outro específico de nome `AsmmSamples` (Apêndice A), o qual passou a atender as particulares das simulações de evaporação da gota combustível avaliada no presente trabalho. Assim, tal modificação deu-se sobre os esquemas de geração de amostras, tais como os de random, Gaussian, Halton e Monte Carlo. Visto que, na presente versão da biblioteca Chaospy não havia a possibilidade de escolha de outro método que não fosse o de Sobol para a geração das amostras, assim a modificação mencionada deu pela adição dos métodos supramencionados.

4.5.3 *Uncertainpy*

A biblioteca *Uncertainpy*, originalmente desenvolvida para análise de modelos de neurociência e definida pelos seus autores (TENNØE; HALNES; EINEVOLL, 2018) como uma ferramenta Python de código aberto voltada para análises de sensibilidade e de propagação de incertezas, foi utilizada junto ao código de evaporação sob a perspectiva de um *framework* de gerenciamento e distribuição de dados, bem como para cálculos estatísticos simples mesmo possuindo algumas das principais funcionalidades das áreas de SA e UQ, como pode ser verificado na Tab. 4.5.

Tal escolha deu-se em função da estrutura global da biblioteca, a qual apresenta um sistema bem desenvolvido de paralelização das simulações e um eficiente processo de armazenamento das Qols, mas que restringi a obtenção/cálculos das métricas utilizadas para análise de convergência, (e.g., R^2 e Q^2). Essas restrições, em parte, podem ser entendidas em função do público alvo ao

qual a mesma foi direcionada. Todavia, pelo mesmo motivo o módulo intitulado como “*features*” e a função “*parallel*” presentes na biblioteca *uncertainpy* apresentam alto desempenho sem a necessidade de modificações adicionais feitas pelos usuários.

Tabela 4.5 – Métricas e estatísticas fornecidas pela biblioteca *Uncertainpy*. (TENNØE; HALNES; EINEVOLL, 2018)

Métrica estatística	Símbolo
Modelo e QoI avaliadas	U
Modelo e tempo das QoI	t
Média	E
Variância	V
5 th percentil	P_5
95 th percentil	P_{95}
Índices de Sobol de 1º ordem	S
Índices totais de Sobol	S_T

Por estas razões a biblioteca *uncertainpy* foi utilizada no presente trabalho em associação as já mencionadas bibliotecas *chaospy* e *SALib*.

Adicionalmente, modificações pontuais na estrutura desta biblioteca foram realizadas para atender as necessidades das simulações do processo de evaporação. Sendo a primeira relativa ao cálculo dos percentis, os quais inicialmente consideravam o valor fixo de $1-\sigma$ para o cálculo do intervalo de confiança, e após alteração passaram a receber valores variados os quais são determinados pelo usuário, tal como pode ser verificado nas Fig.4.12 e 4.13.

Figura 4.12 – Função de cálculo dos percentis da biblioteca *Uncertainpy*. (O autor, 2021)

```

1 import numpy as np #U_hat:containing the polynomial approximations
2
3 def analyse_PCE(self, U_hat, distribution, data, nr_samples=10**4):
4     # PERCENTIS PCE:
5     U_mc[feature] = U_hat[feature](*samples)
6     """... some code """
7     data[feature].percentile_5 = np.percentile(U_mc[feature], 2.5, -1)
8     data[feature].percentile_95 = np.percentile(U_mc[feature], 97.5, -1)
9
10 def monte_carlo(self, uncertain_parameters=None, nr_samples=10**4, seed=None,
11                 allow_incomplete=True):
12     # PERCENTIS MONTE CARLO:
13     """... some code """
14     data[feature].percentile_5 = np.percentile(masked_evaluations, 2.5, 0)
15     data[feature].percentile_95 = np.percentile(asked_evaluations, 97.5, 0)

```

Figura 4.13 – Função modificada para o cálculos dos percentis (inferior e superior) informados pelo usuário. (O autor, 2021)

```

1 import numpy as np #U_hat:containing the polynomial approximations
2
3 def analyse_PCE(self, U_hat, distribution, data, superior, inferior, nr_samples=10**4):
4     # PERCENTIS PCE:
5     U_mc[feature] = U_hat[feature](*samples)
6     """... some code"""
7     data[feature].percentile_5 = np.percentile(U_mc[feature], inferior, -1)
8     data[feature].percentile_95 = np.percentile(U_mc[feature], superior, -1)
9
10 def monte_carlo(self, uncertain_parameters=None, nr_samples=10**4, seed=None, superior,
11                 inferior, allow_incomplete=True):
12     # PERCENTIS MONTE CARLO:
13     """... some code """
14     data[feature].percentile_X = np.percentile(masked_evaluations, inferior, 0)
15     data[feature].percentile_XX= np.percentile(masked_evaluations, superior, 0)

```

As modificações dos percentis presentes na Fig.4.13 são as referentes aos limites superior e inferior, inseridos tanto nas definições das funções (`def analyse_PCE / monte_carlo`) como nos cálculos dos atributos "`np.percentile`".

Já a segunda modificação na biblioteca `uncertainpy` foi a realizada no método de regularização do conjunto de respostas, as quais são geradas durante as simulações estocásticas do processo de evaporação, e podem ser exemplificadas pela Fig.4.3.

Por meio desta figura, e avaliando o processo de evaporação da gota combustível é possível inferir que nem sempre os resultados obtidos das simulações utilizando diferentes combinações de amostras terão como resposta vetores com a mesma quantidade de pontos/entradas como genericamente foi representado na referida figura (R_1, R_2, \dots, R_n). Isso ocorre, pois mudanças no diâmetro inicial da gota, ou variações das temperaturas ambiente e inicial da mesma intensificam ou reduzem o processo de evaporação/decomposição. De modo que, o conjunto de valores dos vetores de resposta são alterados.

Como forma de solucionar esse problema a biblioteca `Uncertainpy` aplica o método de interpolação por *splines* cúbicas tomando por referência o vetor com a maior quantidade de dados. Todavia, para o processo de evaporação simulado neste trabalho, o qual em média pode gerar vetores com dimensões da ordem de $\mathcal{O}(10^5)$ posições a cada simulação, tal método torna-se proibitivo. Visto que, em simulações utilizando uma quantidade mínima de 10^4 amostras o montante de dados a serem armazenados e processados podem chegar a 10^9 .

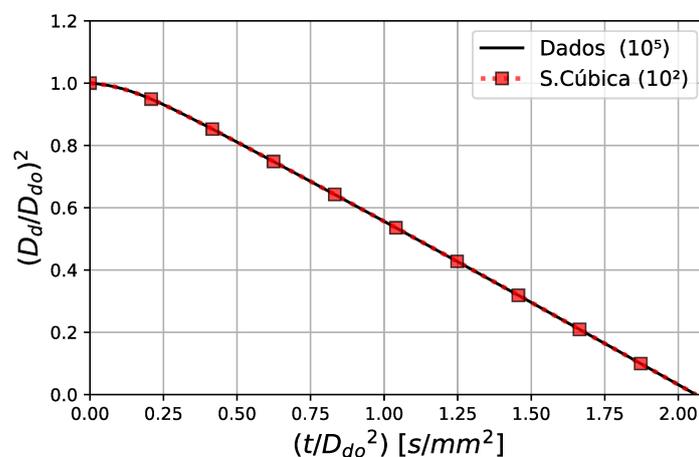
Neste contexto, a modificação feita sobre o método de regularização da biblioteca `Uncer-`

tainpy consistiu na modificação do vetor de referência pelo valor de 10^2 , ou seja, todos os vetores de resposta são interpolados utilizando um valor fixo e não mais a quantidade de valores do maior vetor de resposta gerado.

Assim, toda simulação utilizando o módulo estocástico passou a gerar no máximo 10^2 valores por amostra sem prejuízo da característica linear dos dados simulados, tal como fica evidente na Fig.4.14.

No gráfico dos dados interpolados em comparação aos valores iniciais (Fig. 4.14) os pontos plotados são referentes ao processo de evaporação de uma gota de *n*-heptano com diâmetro inicial ($D_{g,o}$) igual a $800\mu m$ a pressão ambiente de $0.1MPa$. Sendo os dados simulados aqueles representados pela reta contínua (reta 1) e os dados interpolados os representados pela reta segmentada com marcador quadrado (reta 2).

Figura 4.14 – Comparação entre os diâmetros normalizados ao quadrado *versus* o tempo dividido pelo diâmetro inicial da gota de *n*-heptano utilizando os dados simulados e os dados interpolados. (O autor, 2021)



Desta forma, por inspeção visual das retas contínua e segmentada é possível verificar que o processo de interpolação dos dados simulações utilizando 100 pontos apresenta um ajuste adequado ao da reta gerada com os mais de 100 mil valores simulados, de modo que, o referido ajuste foi aplicado a todas as simulações estocásticas do processo de evaporação da gota combustível.

4.6 Método de integração das equações diferenciais ordinárias

O processo de evaporação da gota combustível avaliada neste trabalho é descrito pelo conjunto de equações algébricas e diferenciais ordinárias (EDOs) apresentadas no Cap. 3. Sendo

este último grupo de equações o responsável pelas variações de massa, diâmetro e temperatura da gota analisada.

Neste contexto, uma maneira de se obter a solução para o conjunto de EDO's indicado é transformá-lo em equações algébricas via integração numérica (HAIRER; LUBICH; ROCHE, 2006), a qual foi realizada por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Assim, associando uma função genérica à equação diferencial ordinária de primeira ordem, temos:

$$\frac{d\phi}{dt} = f(\phi, t), \quad (4.1)$$

onde ϕ pode representar, no caso do processo de evaporação, uns dos termos ou propriedades características da gota combustível. Tais como: m_g , D_g e T_g .

Desta forma, aplicando Runge-Kutta de quarta ordem na função genérica da Eq. 4.1, temos o modelo numérico a seguir:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \Big|_n \Delta t, \quad (4.2)$$

com coeficientes iguais a:

$$k_1 = f(\phi, t), \quad (4.3)$$

$$k_2 = f\left(\phi + \frac{\Delta t}{2}k_1, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (4.4)$$

$$k_3 = f\left(\phi + \frac{\Delta t}{2}k_2, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \quad (4.5)$$

$$k_4 = f(\phi + \Delta tk_3, t + \Delta t). \quad (4.6)$$

CAPÍTULO V

RESULTADOS E DISCUSSÕES

No presente capítulo, os resultados das simulações determinísticas realizadas para o processo de evaporação da gota combustível de *n*-heptano, serão apresentados e validados por meio da comparação com os dados de experimentos materiais à gravidade padrão e reduzida publicados por Nomura *et al.* (1992) e Chauveau *et al.* (2008).

Algumas das características e efeitos de flutuação associados ao processo de evaporação da gota de *n*-heptano também serão apresentados, sendo estes descritos quantitativamente pelas representações gráficas pertinentes. De modo que, nesta primeira etapa de resultados tornar-se-á notável o interessante e frutífero acoplamento entre as simulações numéricas e os efeitos físicos esperados para o processo de evaporação da gota combustível.

Assim, feitas as devidas apresentações e discussões a respeito dos efeitos verificados nas simulações determinísticas de evaporação, os resultados referentes às simulações estocásticas serão apresentados. Inicialmente, por meio da análise de sensibilidade dos parâmetros que compõem o modelo avaliado; e em seguida, pela propagação das incertezas associadas às variáveis de maior interesse ao processo de evaporação do combustível, as quais serão representadas por meio das bandas de confiança em torno do valor médio do diâmetro da gota evaporada.

Desta forma, o capítulo encontra-se dividido nas seguintes seções: validação e discussão dos resultados (5.1), evaporação numérica do *n*-heptano (5.2) e avaliação estocástica da evaporação da gota de *n*-heptano (5.3).

5.1 Validação e discussão dos resultados

Na presente seção, a validação do modelo de evaporação da gota combustível em atmosfera de nitrogênio sob efeito da gravidade padrão e reduzida será realizado, utilizando para tal propósito as equações *NuSh-nat* associadas as modificações realizadas por Abramzon e Sirignano ao modelo clássico de evaporação.

Neste contexto, as simulações numéricas de evaporação da gota combustível foram realizadas utilizando, essencialmente, as descrições teóricas e matemáticas feitas por Abramzon e Sirignano (1989), Sazhin (2014) e Pinheiro *et al.* (2018). Alterando deste conjunto a formulação para os cálculos de Nusselt e Sherwood, os quais foram aferidos utilizando o sistema de equações descrito no Cap. 3, Eqs. 3.9 e 3.10; sendo estas, compostas pelos valores de x_1 , x_2 , x_3 , x_4 e x_5 apresentados a seguir.

Tabela 5.1 – Coeficientes das equações *NuSh-nat* para as simulações da gota de *n*-heptano. (O autor, 2021)

T_{aval}	Gravidade	x_1	x_2	x_3 [-]	x_4	x_5
$T_{c,subs} < T_g$	Padrão	0.380	0.849	0.337	0.886	1.000
	Reduzida	3.502	0.000	0.000	0.000	0.738
$T_{c,subs} \geq T_g$	Padrão	0.581	0.816	0.237	0.598	1.000
	Reduzida	4.624	0.000	0.000	0.000	0.859

Na Tab. 5.1 os termos x_1 a x_5 correspondem aos valores otimizados e que melhor se adequaram a Eq. 3.9 das simulações de evaporação da gota de *n*-heptano. De modo que, os mesmos quando associados as equações de Nu e Sh propostas neste trabalho, são capazes de reproduzir o histórico de evaporação da gota combustível com precisão média de 96.7% em relação aos dados experimentais obtidos a gravidade padrão, e de aproximadamente 95.9% em relação aos processos avaliados a gravidade reduzida.

Os dados apresentados na Tab. 5.2, por sua vez, correspondem as condições iniciais das simulações numéricas de evaporação da gota em atmosfera de nitrogênio. Tais parâmetros tam-

bém representam resumidamente os sistemas experimentais avaliados por Nomura *et al.* (1992) e Chauveau *et al.* (2008), os quais são utilizados como fonte de comparação para as simulações realizadas no presente trabalho.

Tabela 5.2 – Parâmetros de simulação do *n*-heptano. (O autor, 2021)

g [m/s ²]	P_g [MPa]	T_g [K]	D_{d,o} [μm]	T_{d,o} [K]
<i>g_o</i>	0.1	[473 – 748]	500	300
<i>g_o</i> ×10 ⁻²	0.1	[471 – 741]	370	300

Pela Tab. 5.2, verifica-se os dois sistemas de validação dos resultados mencionados anteriormente. O primeiro referente aos dados das simulações à gravidade padrão (*g_o*) de 9.81 m/s², e o segundo, as simulações utilizando a gravidade reduzida de *g_o*×10⁻² m/s². Para o primeiro caso, a gota de *n*-heptano teve o diâmetro inicial estabelecido em 500 μm, e as temperaturas das vizinhanças iguais a 473 K, 548 K, 623 K e 748 K. Já para o caso utilizando gravidade reduzida, a gota evaporada teve o diâmetro inicial atribuído de 370 μm e as temperaturas das vizinhanças foram fixadas em 471 K, 555 K, 648 K e 741 K.

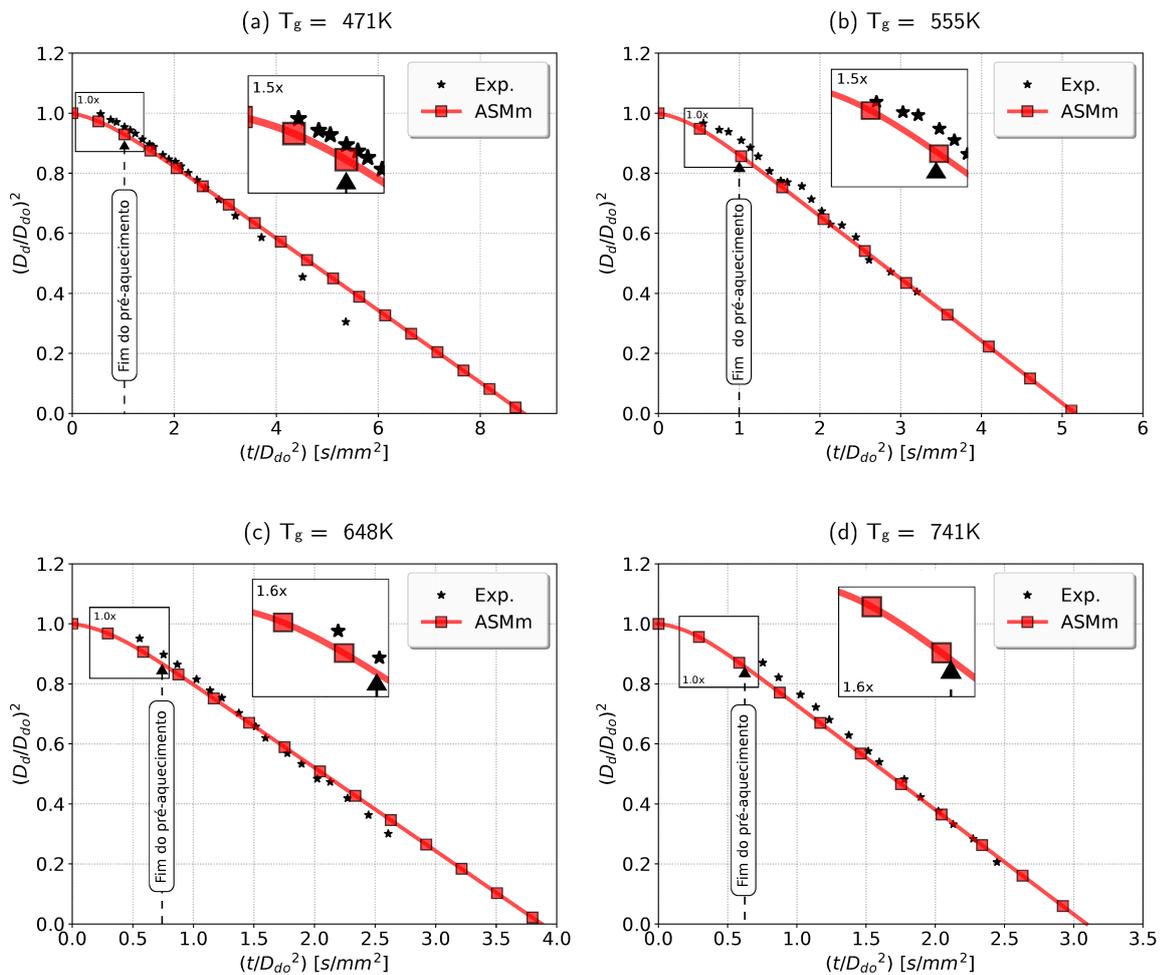
5.1.1 Simulações a gravidade reduzida

As simulações de evaporação em ambiente sob a ação da gravidade reduzida, apesar de não serem o foco desse trabalho, serão utilizadas como referencial argumentativo para o caso da evaporação sob ação da gravidade padrão; e também desempenharão função comprobatória da versatilidade e boa conectividade entre as equações *NuSh-nat* e o processo de evaporação de gotas combustíveis puras. Isto pois, as referidas equações mesmo não tendo sido projetadas especificamente para as simulações na ausência do fenômeno de convecção natural, geram resultados percentuais médios com erros inferiores a 4.1% quando comparados aos dados de experimentos materiais presentes na literatura.

Essa proximidade entre os resultados simulados e os dados reais, deve-se a característica adaptativa dos termos x_1 a x_5 , os quais passam pelo processo de otimização mencionado no Cap. 4, e também produzem modificações sobre os coeficientes da Eq. 3.9 (como no caso do coeficiente C_1) no decorrer das simulações computacionais à medida que a temperatura da gota combustível

é incrementada. Proporcionando, assim, maior interatividade entre as equações de variação de energia térmica e redução de massa ao longo do processo computacional de evaporação; bem como, aproximando os resultados numéricos daqueles encontrados em sistemas reais. Tal como pode ser verificado pelas figuras a seguir.

Figura 5.1 – Perfil comparativo de evaporação da gota de *n*-heptano em atmosfera de nitrogênio ($T_g = 471\text{ K}$ a 741 K) e a gravidade reduzida para os casos simulados e experimentais. (O autor, 2021)



Nas figuras do perfil comparativo de evaporação da gota de *n*-heptano (Fig. 5.1), para cada temperatura duas sequências de resultados são apresentadas; sendo estes, os resultados computacionais obtidos na presente dissertação e os dados de experimentos materiais presentes em literaturas especializadas (NOMURA *et al.*, 1992 ; RATH, 2012). Para os quais, os marcadores quadrados representam os valores obtidos numericamente utilizando os parâmetros das Tabs. 5.1 e 5.2 em ambiente a gravidade reduzida, e os marcadores em forma de estrela indicam os dados proveniente dos experimentos materiais sob o mesmo sistema gravitacional.

Os resultados computacionais também denotados pela sigla ASMm (acrônimo em inglês para Modelo de Abramzon e Sirignano modificado), demonstram a evolução da característica linear do processo de evaporação para a sequência de temperaturas supramencionadas; além, de evidenciar o comportamento não linear da evaporação do combustível durante os primeiros instantes do processo.

Nos gráficos apresentados, as regiões de forte tendência linear encontram-se todas a direita da marcação que indica o fim do processo de pré-aquecimento. Isso pode ser explicado pela possível ocorrência de um equilíbrio dinâmico entre os sistemas gota-atmosfera. De modo que, quanto maior o gradiente de temperatura entre estes sistemas, mais rápido o equilíbrio é atingido e menor é a região não linear no processo.

De forma específica, na Fig. 5.1, para os resultados referentes as temperaturas de 471 K e 555 K, verifica-se a existência de divergências tanto para os dados obtidos computacionalmente quanto por meio dos experimentos materiais, isto em relação a linearidade enunciada pela lei D^2 , principalmente nos instantes iniciais da evaporação; efeito o qual, mantém-se para as temperaturas de 648 K e 741 K, contudo, em menor magnitude como pode ser verificado pela seção ampliada em 1.6 vezes nos gráficos (c) e (d) da mesma figura.

Em experimentos materiais realizados por Chauveau *et al.* (2008), os mesmos efeitos não lineares constatados nos gráficos apresentados para o *n*-heptano também são verificados para o processo de evaporação de uma gota de *n*-decano em atmosfera de nitrogênio e a gravidade reduzida. No qual, o aumento da temperatura ambiente apenas atenua as não-linearidades existentes, as quais somente esvaecem por completo em sistemas muito particulares.

Neste contexto, as divergências verificadas por Chauveau *et al.*, Nomura *et al.* e no presente trabalho, podem estar relacionadas as condições de aferição utilizadas nos experimentos materiais e/ou aos conceitos aplicados na codificação computacional (Cap. 4) do fenômeno de evaporação da gota combustível. Haja visto que, em todos os testes realizados por estes pesquisadores os parâmetros de experimentação material e computacional foram mantidos praticamente inalterados.

Contudo, também é razoável supor a influência de algumas das propriedades dos combustíveis como fonte das irregularidades ocorridas durante a evaporação. Tal como, a influência da temperatura crítica ($T_{c,hept}$) do *n*-heptano (540 K) como causa do referido comportamento, uma

vez que, na ausência da convecção natural o efeito físico de flutuação⁶ sofrido pela massa de combustível é minimizado ou até mesmo extinto (CHAUVEAU; BIROUK; GÖKALP, 2007). O que corrobora para o acúmulo de gás sob as fronteiras da gota líquida em temperaturas muito próximas da temperatura crítica da substância, como nos casos avaliados.

Todavia, considerar as condições críticas do combustível como fator determinante para a formação da região não linear verificada, principalmente, nos processos apresentados pelos gráficos (a) e (b) da Fig. 5.1, seria negar de imediato a suposição simplificadora de equilíbrio dinâmico; o que exigiria procedimentos muito mais avançados do que aqueles discutidos e empregados no processo de evaporação em questão, tais como os discriminados pela Mecânica Estatística (TUCKERMAN, 2010) e os apresentados por Givler e Abraham (1996) a respeito da evaporação supercrítica de gotas.

Assim, é razoável assumir como credível as considerações de linearidade do modelo quase-estacionário de evaporação (SPALDING, 1953; GODSAVE, 1953), tendo como ressalva a não concordância deste modelo para os períodos iniciais da gaseificação em atmosfera a gravidade reduzida. Tal como apresentado nos resultados computacionais encontrados no presente trabalho, e nos experimentos materiais de Nomura *et al.* (1992), Chauveau *et al.* (2008).

Neste contexto, e buscando um modelo simplificado para a evaporação de gotas combustíveis (CHAUVEAU; BIROUK; GÖKALP, 2007), o qual tenha reduzidos erros percentuais para as simulações computacionais em atmosfera a gravidade reduzida, as equações *NuSh-nat* tornam-se uma alternativa viável. Ao passo que estas, quando associadas aos coeficientes da Tab. 5.1 obtiveram especificamente para as simulações apresentadas na figura anterior, discordância percentual média em relação ao respectivo valor experimental de no máximo 3.06% ($T_g = 471$ K), 3.47% ($T_g = 555$ K), 4.89% ($T_g = 648$ K) e 4.59% ($T_g = 741$ K).

5.1.2 Simulações a gravidade padrão

As simulações computacionais de evaporação em ambiente a gravidade padrão foram realizadas sob os mesmos conceitos daqueles aplicados para o caso anterior. Modificando-se, no entanto, os valores da gravidade, diâmetro da gota evaporada e os termos (x_1 a x_5) das equações

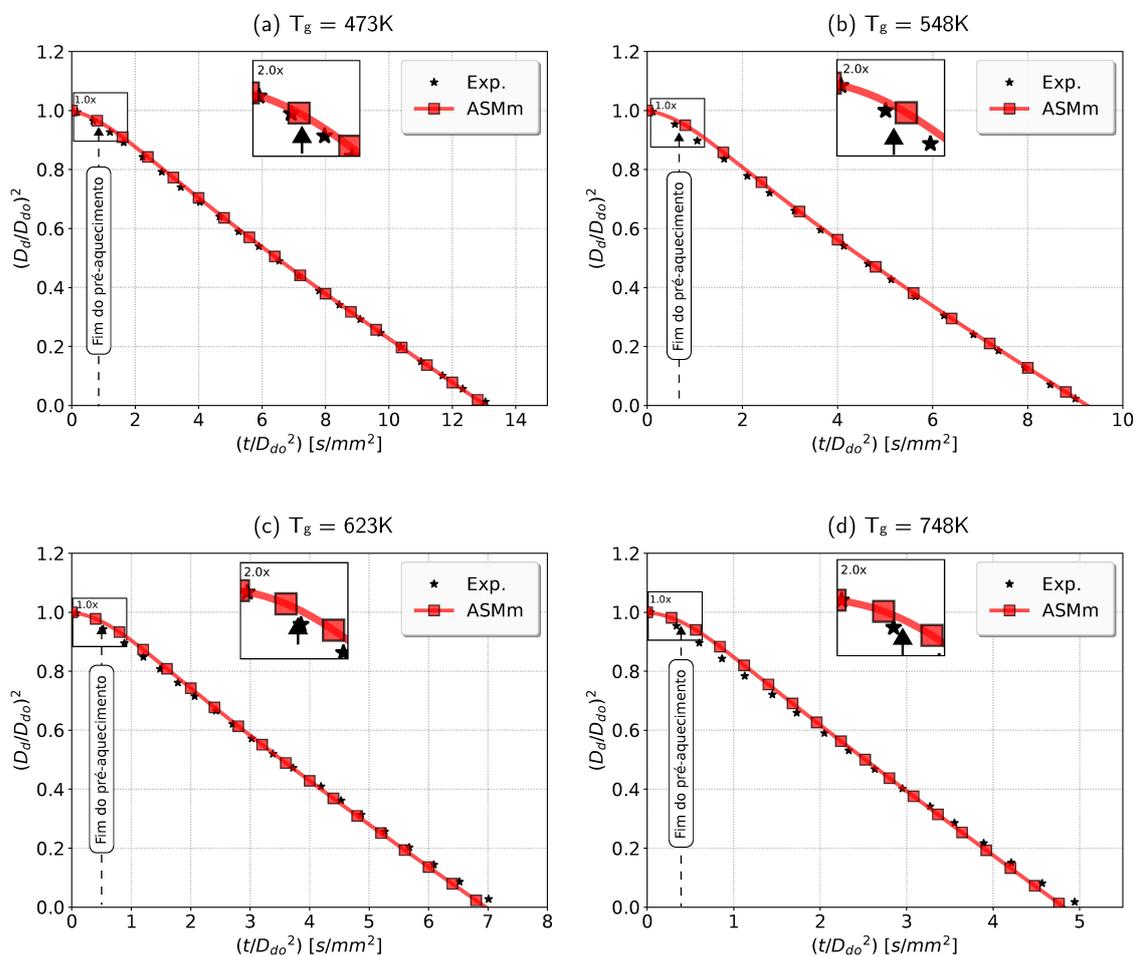
⁶ Em evaporação, entende-se por flutuações as pequenas variações de forma e/ou volume que a estrutura da gota líquida apresenta em curtos espaços de tempo.

de Nusselt e Sherwood provenientes do módulo *NuSh-nat*. Deste modo, o diâmetro inicial da gota o qual era de $370\ \mu\text{m}$ foi modificado para $500\ \mu\text{m}$, e as temperaturas do ambiente foram escolhidas no intervalo de 473 K a 748 K. Isto, para que fosse possível comparar os resultados computacionais obtidos aos dados de experimentos materiais disponíveis na literatura. Já os coeficientes do módulo *NuSh-nat* (C_1 a C_5) foram re-calculados por meio de novas simulações de otimização, Tab. 5.1; visto que, a gravidade, uma das condições de contorno mais importantes para o processo, passou de reduzida ao valor da gravidade padrão.

Por fim, os valores da pressão ambiente e temperatura inicial da gota permaneceram inalterados, vide Tab. 5.2.

Na figura a seguir (Fig. 5.2) os gráficos (a), (b), (c) e (d) representam, tal como para os casos de evaporação a gravidade reduzida, a variação do diâmetro normalizado da gota de *n*-heptano em relação ao tempo relativo a extinção da mesma.

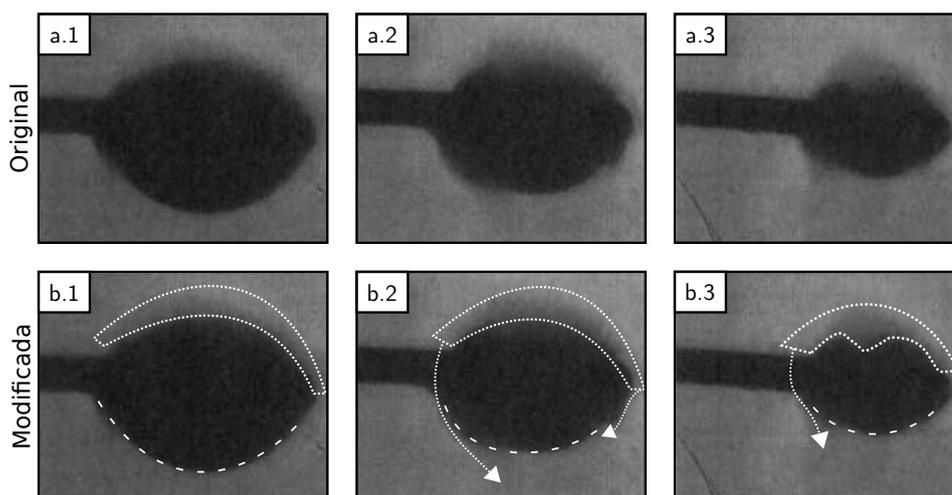
Figura 5.2 – Perfil comparativo de evaporação da gota de *n*-heptano em atmosfera de nitrogênio ($T_g = 473\ \text{K}$ a $748\ \text{K}$) e a gravidade padrão para os casos simulados e experimentais. (O autor, 2021)



Nesta figura (Fig. 5.2), verifica-se que de maneira geral o processo realizado a gravidade padrão gera resultados muito mais próximos da linearidade proposta pela lei D^2 do que aqueles obtidos em gravidade reduzida, além de evidenciar um proporcional aumento na taxa relativa de evaporação da gota para as temperaturas apresentadas. Tais valores, podem ser explicados em função do escoamento induzido nas fronteiras da gota líquida, resultado direto do efeito gravitacional atuante, o qual age sobre a mesma de modo a favorecer a difusão da massa de combustível evaporado.

O fenômeno descrito pode ser melhor compreendido pela visualização da figura a seguir, obtida por [Nomura et al. \(1992\)](#), na qual duas seções da mesma gota são apresentadas. A primeira em formato original, e a segunda contendo marcações que evidenciam a massa de vapor sobre a gota, bem como o deslocamento desta quantidade gasosa. Ao passo que, a sequência numérica ao lado dos índices (a) e (b) representam a evolução temporal do processo; ou seja, a evaporação tem início nos instantes exibidos nas figuras (a.1) - (b.1) e apresenta-se em estágio de evaporação avançada nos períodos das imagens (a.3) - (b.3).

Figura 5.3 – Registros reais de evaporação de uma gota de *n*-heptano em atmosfera de nitrogênio, $P_g = 1.00$ MPa, $T_g = 755$ K a gravidade padrão. ([NOMURA et al., 1992](#)); Modificada.



Por meio da figura anterior (Fig. 5.3), e tendo como referencia a haste horizontal sobre a qual a gota é mantida, verifica-se que sob a ação da gravidade padrão a parte inferior da gota acumula massa líquida (pontilhado aberto), distorcendo a esperada geometria esférica do volume líquido de *n*-heptano. Tal distorção, induz o gás ambiente a deslocar-se em direção oposta ao acúmulo de líquido (empuxo gasoso), ou seja, para a região superior da gota. Desta forma, o gás

ambiente em contato com a película de vapor (pontilhado fechado) recém desprendida da gota, impulsiona a mesma a escoar na direção apontada pelas setas das figuras (b.2) e (b.3).

Esse processo nas fronteiras da gota líquida, além de promover o fluxo de gás ambiente e de massa de vapor recém evaporada, também cria um gradiente mássico e térmico na superfície da gota, o qual é aparentemente proporcional ao volume instantâneo de combustível. Assim, o ciclo de flutuações provocado pelo efeito gravitacional tem início e propaga-se até que a gota de *n*-heptano seja completamente consumida.

Desta forma, o processo aqui intitulado por "*buoyancy convection*" (convecção induzida por flutuação) explica em termos macroscópicos a relativa linearidade do processo de evaporação realizado em atmosfera a gravidade padrão. Visto que, as flutuações que induzem parte do gradiente térmico e de massa durante o processo de evaporação, são atenuadas à medida que o volume líquido da gota reduz. De modo, a manter a constância entre causa e efeito em processos de evaporação realizados na presença do fenômeno de convecção natural.

Neste contexto, ao avaliarmos os gráficos da Fig. 5.2 em comparação aos apresentados na Fig. 5.1 (relativos a gravidade reduzida), é possível notar uma maior regularidade dos dados provenientes dos experimentos materiais na presença da gravidade padrão do que na ausência desta. Sendo a mesma avaliação feita para as simulações computacionais, as quais geram resultados na região de pré-aquecimento mais próximos da linearidade atestada pela lei D^2 do que para o caso anterior realizado a gravidade reduzida.

Adicionalmente, também pode-se verificar que a distância média entre as curvas computacionais e materiais apresenta-se reduzida. De maneira que, o erro percentual médio entre essas é inferior a 3.29%. E a diferença percentual absoluta entre as mesmas a cada temperatura não ultrapassa 1.29% ($T_g = 473$ K), 2.65% ($T_g = 548$ K), 4.20% ($T_g = 623$ K) e 5.00% ($T_g = 748$ K) respectivamente.

5.2 Evapora numérica do *n*-heptano

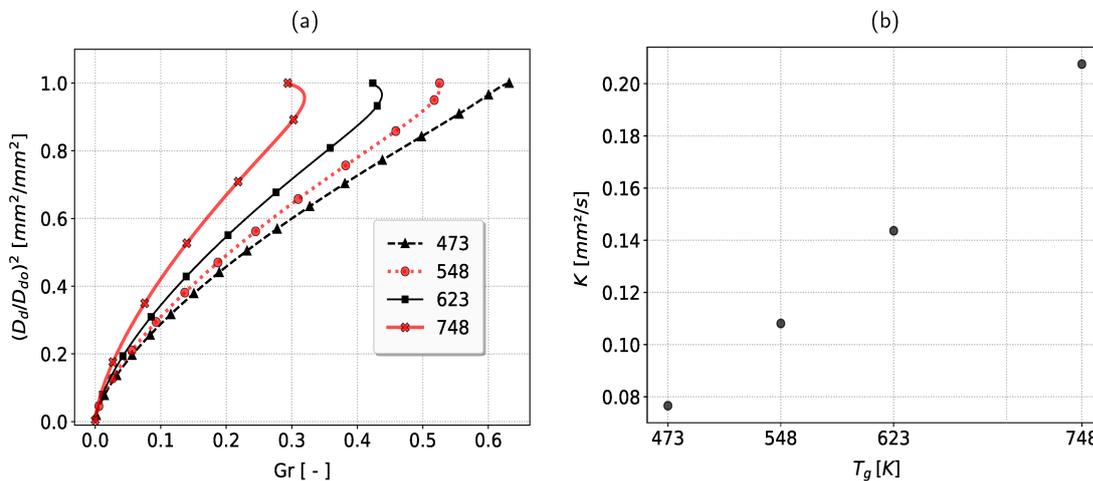
O processo de evaporação apresentado na seção e nos capítulos anteriores (Sec. 5.1, e Cap. 3 e 4) descreve com precisão a evolução numérica do diâmetro normalizado da gota combustível de *n*-heptano em relação ao tempo relativo a extinção da mesma, além de compará-lo aos

resultados provenientes de experimentos materiais (Fig. 5.2). Todavia, alguns parâmetros que promovem ou participam da referida variação do diâmetro da gota combustível são tratados apenas qualitativamente durante o texto, de modo que os mesmos, serão apresentados de forma quantitativa na presente seção por meio de suas representações gráficas.

Assim, dentre os inúmeros parâmetros envolvidos no processo de evaporação da gota combustível, os relacionados ao processo de convecção natural e ao gradiente de térmico destacam-se. Uma vez que estes descrevem as flutuações da evaporação da gota de *n*-heptano sob a perspectiva matemática, conciliando a esta os inerentes conceitos físicos associados aos processo.

Neste contexto, o número de Grashoff (Eq. 3.12) é sem dúvidas um dos parâmetros de maior relevância ao processo evaporativo. Visto que o mesmo, tal como apresentado na Fig. 5.4, tem comportamento regular em boa parte do histórico de evaporação da gota de *n*-heptano, com ligeira variação no início do processo; a qual é verificada no intervalo fechado de 1.0 a 0.9, tendo como referencial o eixo do diâmetro normalizado da gota (D_d^2/D_{do}^2), Fig. 5.4 (a). Sendo tal comportamento resultado da ação gravitacional sob a gota combustível (Fig. 5.3, b.1-b.3).

Figura 5.4 – Comportamento do diâmetro normalizado (D_d^2/D_{do}^2) em função da variação do número de Grashoff (Gr). (O autor, 2021)



Adicionalmente, o gradiente térmico também apresenta acentuada relevância ao processo de evaporação da gota combustível. Seja pela incidência deste sobre a taxa de evaporação (K) (Fig. 5.4-b), a qual aumenta a medida em que a diferença entre a temperatura da gota e do meio externo aumenta, ou pela redução do efeito oscilatório induzido pela convecção natural sob a gota em proporção correspondente a redução do gradiente térmico, tal como pode ser verificado na Fig. 5.4-a.

5.3 Avaliação estocásticas da evaporação do *n*-heptano

Na presente seção a avaliação estocástica da evaporação da gota de *n*-heptano será apresentada. De forma que os parâmetros considerados incertos e de maior preponderância ao processo sejam quantificados por meio da análise de sensibilidade global, possibilitando, assim, que em etapa posterior (de propagação das incertezas) as bandas de confiança em torno do termo médio da variação do diâmetro da gota sejam obtidas para as temperatura do ambiente externo iguais a 473 K, 548 K, 623 K e 748 K.

5.3.1 Análise de sensibilidade aplicada a evaporação da gota de *n*-heptano

O processo de análise de sensibilidade global da evaporação da gota de *n*-heptano, assim como mencionado anteriormente, é aplicado na presente dissertação via técnica de Sobol (ou dos índices de Sobol) associada ao método de Monte Carlo. De modo que, os resultados aqui apresentados foram obtidos por meio de múltiplas simulações computacionais que utilizaram 100 mil ciclos cada, e as quais seguiram duas perspectivas distintas de análise.

A primeira perspectiva, de caráter puramente exploratório, associou as Eqs. 3.1, 3.3, 3.4 e 3.7 em um sistema de equações base, o qual descreve a redução de massa da gota líquida de *n*-heptano em relação ao tempo. Tal sistema, com os termos descritos na Tab. 5.3 e sinalizados pelos marcadores circulares na coluna definida como “1ª simulação”, apresenta apenas grandezas diretamente associadas a característica mássica do referido processo evaporativo. De modo que nenhuma das características intrínsecas ao sistema térmico de evaporação de gotas é considerado nesta primeira avaliação. Isto é feito com o objetivo de verificar a oscilação e preponderância apenas dos termos mássicos durante simulação estocástica.

Já em relação a segunda perspectiva de avaliação, a qual foi aplicada às duas últimas simulações, o objetivo de análise voltou-se à característica comparativa entre as variáveis/termos envolvidos no sistema computacional. De modo que todas as equações descritas no Cap. 3 foram utilizadas nas simulações estocásticas de análise de sensibilidade global, das quais os termos avaliados são apresentados nas colunas definidas por “2ª simulação” e “3ª simulação” da Tab. 5.3. Sendo nestas simulações, atribuído tanto os termos mássicos como os relacionados as variáveis

térmicas, de modo que as mesmas são denominadas na presente dissertação como “simulações completas”.

Tabela 5.3 – Termos efetivamente utilizados no processo de análise de sensibilidade global das três principais simulações de evaporação da gota de *n*-heptano. (O autor, 2021)

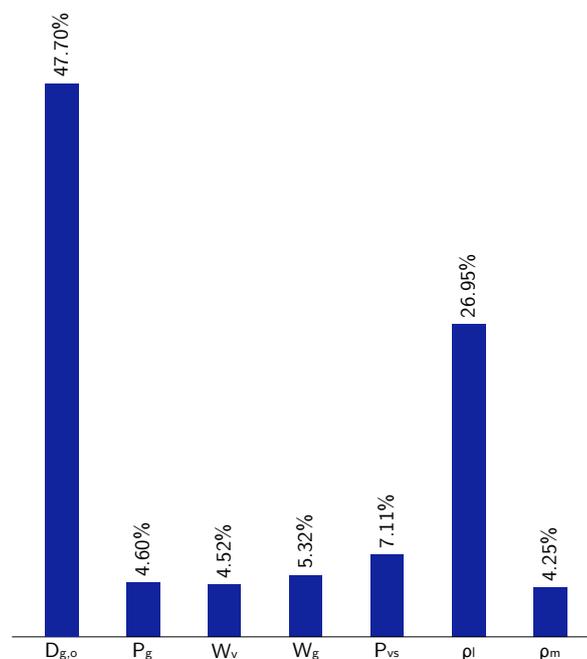
Nome	Descrição	Simulação			Suportes
		1ª	2ª	3ª	
$D_{d,o}$	Diâmetro da inicial da gota	●	●		$[500 \times p_i ; 500 \times p_s] \mu\text{m}$
P_g	Pressão do ambiente externo	●	●	●	$[0.10 \times p_i ; 0.10 \times p_s] \text{MPa}$
T_d	Temperatura da gota		●	●	$[300 \times p_i ; 300 \times p_s] \text{K}$
W_v	Peso molecular do vapor de <i>n</i> -heptano	●	●	●	$[100.21 \times p_i ; 100.21 \times p_s] \text{kg/kmol}$
W_g	Peso molecular do gás atmosférico	●	●	●	$[28.02 \times p_i ; 28.02 \times p_s] \text{kg/kmol}$
$P_{v,s}$	Pressão de vapor do <i>n</i> -heptano	●	●	●	$[6648 \times p_i ; 6648 \times p_s] \text{MPa}$
L_v	Calor latente de vaporização		●	●	$[363552 \times p_i ; 363552 \times p_s] \text{J/kg}$
$c_{p,l}$	Calor específico do líquido		●	●	$[2247 \times p_i ; 2247 \times p_s] \text{J/kmol/K}$
ρ_l	Massa específica do líquido	●	●	●	$[679 \times p_i ; 679 \times p_s] \text{kg/m}^3$
D_{vm}	Difusividade da mistura		●	●	$[1.1 ; 1.1 \times p_s] \times 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$
ρ_m	Massa específica da mistura	●	●	●	$[0.84 ; 0.84 \times p_s] \text{kg/m}^3$
$c_{p,m}$	Calor específico da mistura		●	●	$[1164 ; 1164 \times p_s] \text{J/kmol/K}$
μ_m	Viscosidade dinâmica do líquido		●	●	$[1.90 ; 1.90 \times p_s] \times 10^{-5} \text{Pa}\cdot\text{s}$
k_m	Condutividade Térmica da mistura		●	●	$[0.030 ; 0.030 \times p_s] \text{W/m/K}$
Gr	Número de Grashoff		●	●	$[0.3 ; 0.3 \times p_s] [-]$

Neste sentido, os termos apresentados na tabela anterior (Tab. 5.3), ditos incertos, foram todos associados a distribuição uniforme; uma vez que os conceitos físicos dos mesmos possibili-

tam a referida atribuição; e adicionalmente, por esta ser a escolha mais conservadora segundo o princípio da entropia máxima (teoria da informação). Sendo os respectivos hiperparâmetros (ou suportes) apresentados na coluna “Valores” da Tab. 5.3, na qual p_s define o multiplicador do limite superior igual a 1.1 e p_i o multiplicador do limite inferior igual a 0.9.

Desta forma, a simulação exploratória (reduzida) realizada utilizando apenas os termos mássicos gerou como resultados as porcentagens apresentadas a seguir na Fig. 5.5. Na qual o diâmetro da gota, diretamente associado ao conceito de redução de massa, teve como valor a porcentagem de 47.70% de influência sobre o processo de evaporação do *n*-heptano; ao passo que a massa específica do líquido, grandeza com a segunda maior notoriedade na referida simulação, apresentou influência aproximada de 26.95% sobre o processo evaporativo, sendo cerca de 1.80 vezes menos influente sob o processo evaporativo da gota de *n*-heptano do que o diâmetro inicial da mesma. Indicando deste modo, que o diâmetro inicial da gota, assim como mencionado por Chauveau, Birouk e Gökalp (2007) apresenta elevada preponderância na velocidade de evaporação.

Figura 5.5 – Índices totais de Sobol para a simulação exploratória da gota de *n*-heptano. (O autor, 2021)

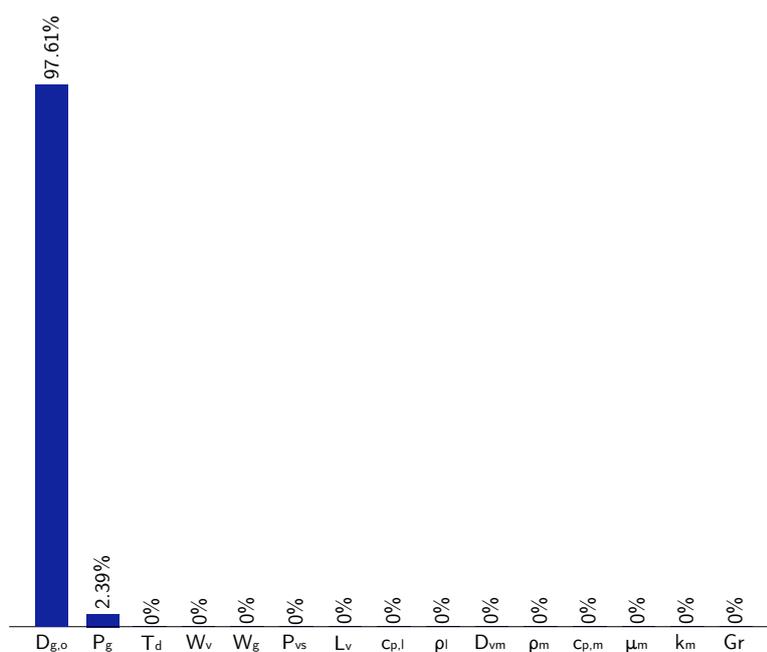


Já os componentes P_g , W_v , W_g , $P_{v,s}$ e ρ_m apresentaram baixos níveis de importância sobre a redução de massa da gota se comparados com a massa específica do líquido ou com o diâmetro inicial da gota de *n*-heptano, tendo os mesmos variado em torno de 4.25% e 7.11% com média

aproximada de 4.66%. Valores estes que podem ter sido enviesados (positiva ou negativamente) pela reduzida formulação utilizada, a qual desconsiderou as relações térmicas no processo de variação da massa da gota de *n*-heptano, levando em conta apenas a relação matemática das equações mencionadas no início desta seção.

Em contrapartida aos resultados apresentados na Fig. 5.5, a segunda simulação do processo de evaporação da gota de *n*-heptano foi realizada utilizando todas as equações apresentadas no Cap. 3 e seguindo integralmente os procedimentos de implementação e excussão apresentados no Cap. 4, gerando os resultados apresentados a seguir.

Figura 5.6 – Índices totais de Sobol para a simulação comparativa da gota de *n*-heptano contendo todas as variáveis térmicas e de massa referente ao presente processo de evaporação. (O autor, 2021)

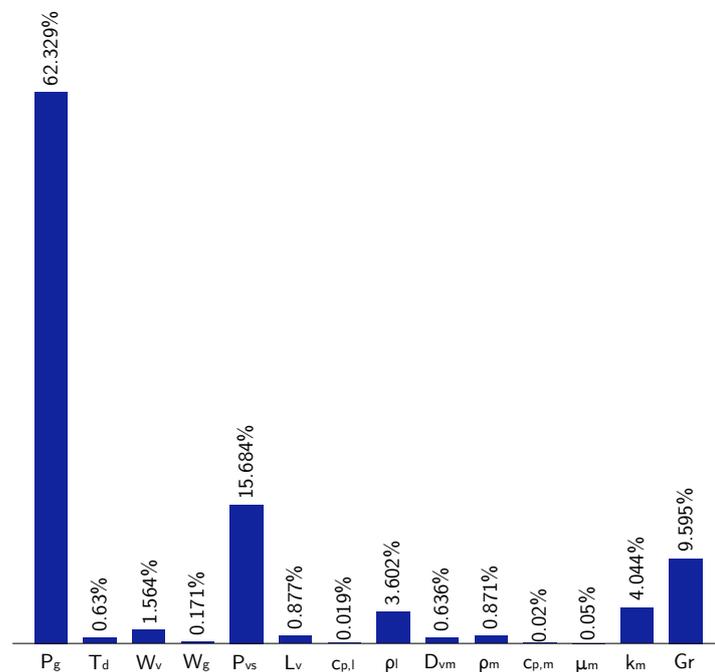


Na Fig. 5.6, verifica-se que o diâmetro inicial da gota de *n*-heptano tem grande preponderância sob o processo evaporativo da mesma, atingindo cerca de 97.61% da influência total sob o processo, enquanto a pressão do ambiente externo (do gás atmosférico) expressa apenas 2.39% de relevância frente a evaporação da gota; já os outros fatores, como pode ser verificado na figura anterior, não apresentaram qualquer influência na presente avaliação estocástica. De modo que na presente simulação conhecida como “completa”, ou seja, considerando todos os efeitos pertinentes ao processo evaporativo que ocorre na região hidrodinâmica da gota líquida (Fig. 1.7), tais como os de convecção natural, “inchaço térmico” e o escoamento de Stefan, quando

avaliados por meio dos termos T_d , W_v , W_g , P_{vs} , L_v , $c_{p,l}$, ρ_m , $c_{p,m}$, ρ_l , D_{vm} , μ_m , k_m e Gr simultaneamente ao diâmetro inicial da gota de n -heptano, os mesmos têm seus efeitos sobrepostos pela acentuada sensibilidade do processo de evaporação frente ao impacto gerado pela variação do diâmetro inicial da gota. Assim, ao contrário do que era esperado após a primeira simulação (de caráter exploratório) a adição das relações e efeitos térmicos ao processo evaporativo provocou um aumento da importância do diâmetro inicial da gota de n -heptano em relação ao conjunto dos outros termos avaliados.

Neste contexto, e em busca de outros fatores que pudessem influenciar no processo de evaporação da gota de n -heptano, a última simulação estocástica de análise de sensibilidade global foi realizada considerando a maior parte dos parâmetros adotados na simulação anterior, excluindo-se deste conjunto apenas o diâmetro inicial da gota, visto que o mesmo sobreporia as contribuições dos outros termos avaliados, tal como foi verificado na Fig. 5.6.

Figura 5.7 – Índices totais de Sobol para a simulação comparativa da gota de n -heptano sem a participação do diâmetro inicial da gota. (O autor, 2021)



Desta forma, após os já mencionados 100 mil ciclos realizados pelo código de evaporação estocástica (Cap. 4) desenvolvido no presente trabalho, foi possível visualizar de forma satisfatória as contribuições individuais de cada um dos quatorze termos avaliados na referida simulação. De modo que os de maior representatividade sobre o processo de evaporação da gota de n -heptano foram os da pressão do ambiente externo (P_g) com 62.329% de representatividade, a pressão

de vapor do *n*-heptano (P_{vs}) com 15.684%, a massa específica do líquido (ρ_l) com 3.602%, a condutividade térmica da mistura vapor-gás (k_m) com 4.044% de preponderância e o número de Grashoff (Gr) com 9.595% de representatividade.

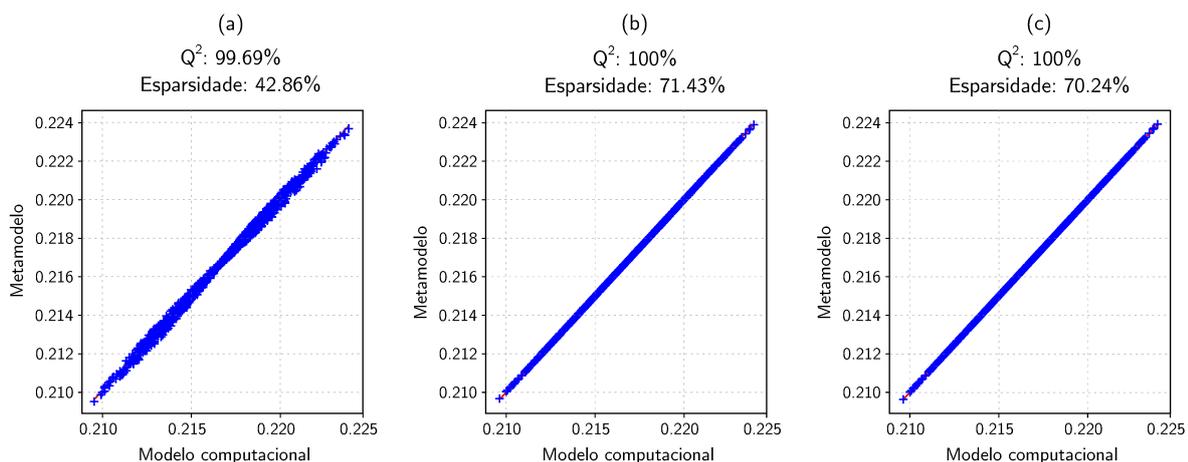
Assim, é possível inferir que o processo de evaporação da gota de *n*-heptano possui outros fatores de relevância ao processo de evaporação os quais são frequentemente ocultos pela elevada preponderância de termos/fatores como o do diâmetro inicial da gota combustível.

5.3.2 Propagação das incertezas sobre o processo de evaporação da gota de *n*-heptano

O processo de propagação das incertezas aplicado no presente trabalho, assim como descrito no Cap. 2, utilizou como parâmetros de entrada os termos de maior significância obtidos pela análise de sensibilidade global da simulação estocástica. A qual foi realizada na sub-seção anterior (Sub-sec. 5.3.1) e obteve como repostas os termos apresentados a seguir: $D_{g,o}$, P_g , P_{vs} , ρ_l , k_m e Gr .

A construção do metamodelo para as simulações probabilísticas, deu-se por meio da associação amostral dos termos mencionados às múltiplas simulações de avaliação do grau do PCE, as quais foram realizadas buscando caracterizar a melhor aproximação polinomial possível ao sistema de evaporação da gota de *n*-heptano. Assim, a métrica estatística Q^2 foi utilizada para a análise dos experimento referentes as simulações computacionais criadas respectivamente com 50, 100 e 500 amostras para um conjunto de teste formado por 1000 realizações (simulações), as quais resultaram nas figuras a seguir.

Figura 5.8 – Cálculo da qualidade de ajuste para os dados de formação do PCE associado ao respectivo grau do polinômio ortogonal, utilizando 50 amostras e 1000 simulações de treino do metamodelo gerado. (O autor, 2021)



Na Fig. 5.8, a expansão polinomial do caos criada utilizou 50 amostras provenientes da distribuição amostral do conjunto de dados da Sub-sec. 5.3.1, formando assim, os respectivos polinômios do 1^o, 2^o e 3^o grau, os quais foram validados utilizando outras 1000 amostras distintas também obtidas do mesmo conjunto de dados. Sendo as repostas geradas pelo modelo computacional e pelo metamodelo relacionadas por meio da taxa de evaporação da gota de *n*-heptano (*K*), a qual foi escolhida como variável de saída das referidas análises em função da representação unitária desta a cada nova avaliação estocástica.

Figura 5.9 – Cálculo da qualidade de ajuste para os dados de formação do PCE associado ao respectivo grau do polinômio ortogonal, utilizando 100 amostras e 1000 simulações de treino do metamodelo gerado. (O autor, 2021)

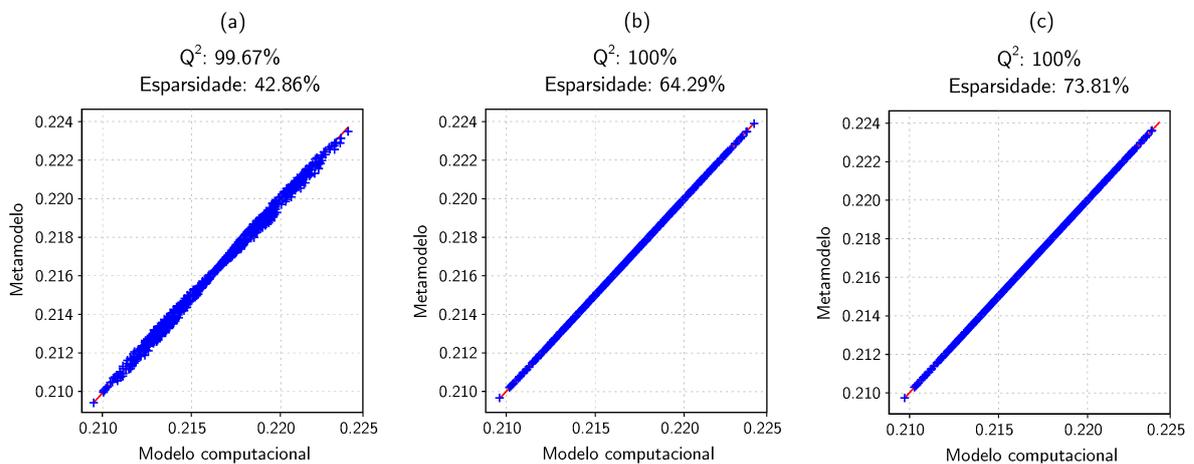
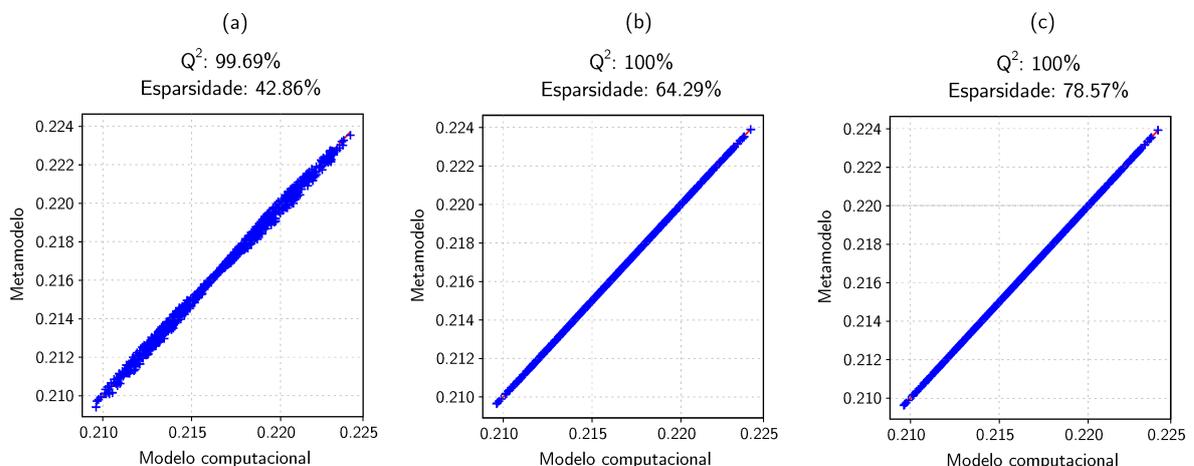


Figura 5.10 – Cálculo da qualidade de ajuste para os dados de formação do PCE associado ao respectivo grau do polinômio ortogonal, utilizando 500 amostras e 1000 simulações de treino do metamodelo gerado. (O autor, 2021)



Desta forma, verifica-se pela porcentagem de Q^2 que para os três casos avaliados nas Figs. 5.8, 5.9 e 5.10, que o metamodelo gerado apresenta excelente ajuste em relação aos resultados

obtidos pelo modelo computacional proposto na presente dissertação, bem como elevada esparsidade (distribuição) sobre a linha de ajuste, principalmente nos sistemas ilustrados nos gráficos (b) e (c) das referidas figuras. Todavia, o que procura-se conciliar nesta etapa de análise estocástico não é apenas a qualidade de Q^2 mas também a magnitude da dispersão dos dados sobre a já mencionada linha ideal de ajuste (linha diagonal), bem como garantir a reprodutibilidade das referidas características ao variar-se o número de amostras para a construção do PCE.

Neste sentido, dentre os experimentos realizados (Figs. 5.8, 5.9 e 5.10) aquele que apresentou simultaneamente as três características desejadas ao metamodelo criado, foi o experimento estocástico ilustrado pelo gráfico (b) da Fig. 5.9. De modo que o referido metamodelo, de grau 2 e obtido utilizando 100 amostras é considerado o que melhor representa o processo de evaporação da gota combustível de *n*-heptano. Tendo em vista que o mesmo manteve de forma sucessiva a alta qualidade dos dados gerados nas últimas simulações realizadas, evidenciando assim a estabilidade do metamodelo a qual é associada a qualidade expressa por Q^2 .

Assim, de posse dos termos fundamentais ao processo de propagação das incertezas, os quais são: os parâmetros mais sensíveis (ou preponderantes) ao processo, as referidas distribuições amostrais, os hiperparâmetros das distribuições (Tab. 5.3) e o grau máximo admitido para a expansão polinomial, torna-se, desta forma, possível a obtenção das bandas de confiança relativas ao diâmetro médio de evaporação da gota combustível, as quais são apresentadas nas figuras a seguir.

Figura 5.11 – Perfil evaporativo médio contendo as bandas de confiança da gota de *n*-heptano em atmosfera inerte de nitrogênio a temperatura ambiente de 473 K (a) e 548 K (b). (O autor, 2021)

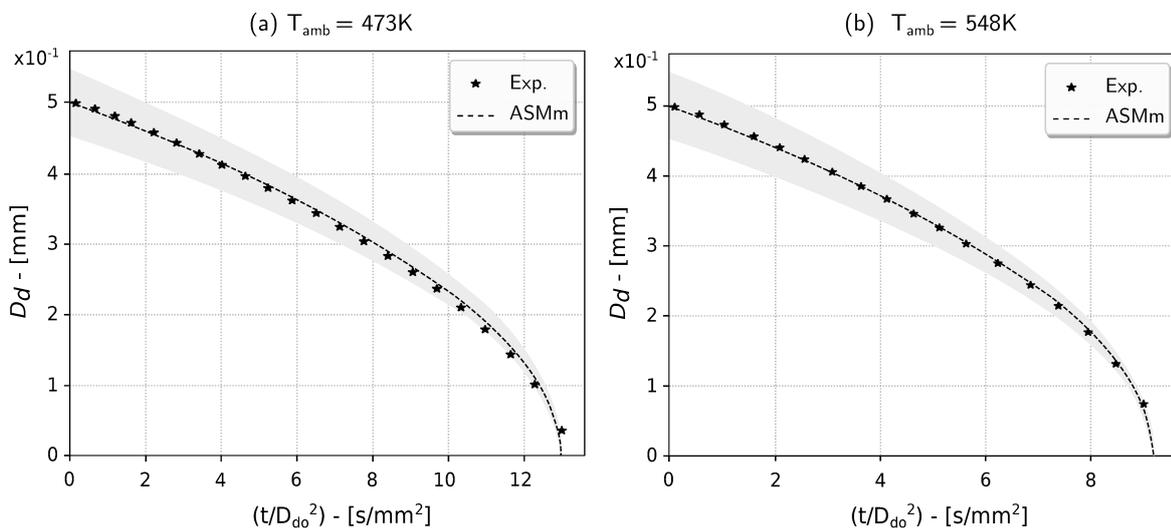
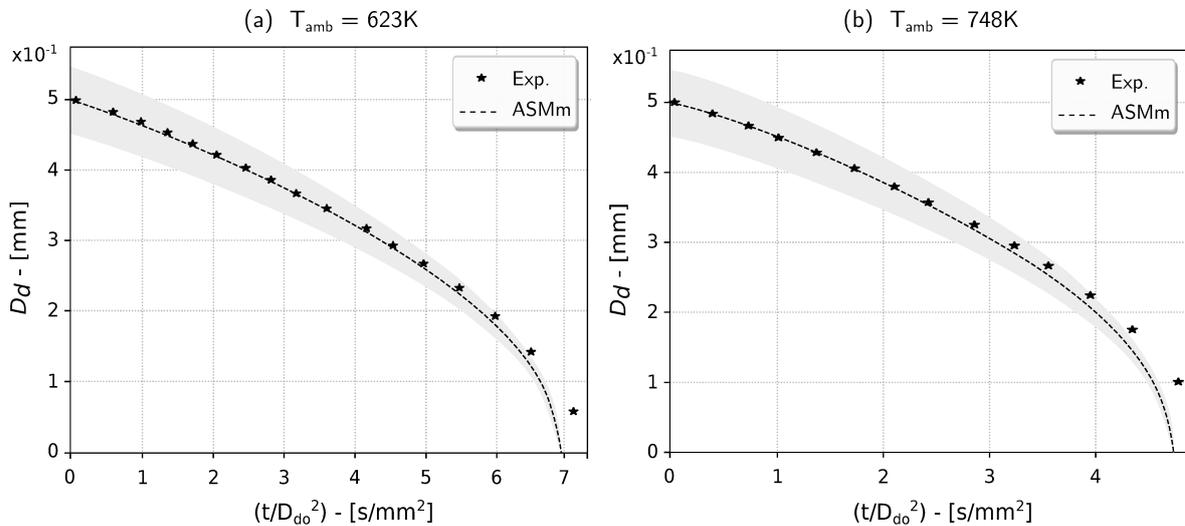


Figura 5.12 – Perfil evaporativo médio contendo as bandas de confiança da gota de *n*-heptano em atmosfera inerte de nitrogênio a temperatura ambiente de 623 K (a) e 748 K (b). (O autor, 2021)



Nas Figs. 5.11 e 5.12, gráficos (a) e (b), as bandas de confiança para as temperaturas ambiente de 473K, 548K, 623K e 748K relativas ao processo de evaporação da gota combustível de *n*-heptano são apresentadas. Adicionalmente, os dados provenientes dos experimentos materiais realizados por [Chauveau et al. \(2008\)](#) também são exibidos (marcador em forma de estrela), isto com o objetivo de explicitar a interseção entre os valores experimentais e as bandas de confiança obtidas pelas simulações estocásticas desenvolvidas no presente trabalho. De forma que torna-se possível verificar, que para as temperaturas abaixo da temperatura de 540 K, ou seja, da temperatura crítica do *n*-heptano ($T_{c,hep}$), todos os pontos/valores materiais estão exatamente sobre a linha média do processo de evaporação ou nas proximidades deste. Já para as temperaturas acima de $T_{c,hep}$ (623 K e 748 K) apenas dois dos pontos experimentais estão fora do intervalo de confiança de 95%. Sendo estes, os pontos próximos ao esvaecimento da gota, região na qual pouco se sabe sobre o comportamento das mesma. De modo que é razoável desconsiderar as possíveis diferenças entre o (meta)modelo e os dados experimentais nesta região, a qual tem pouco o quase nenhuma relevância aos processo de combustão da atualidade.

Neste contexto, é possível, então, afirmar que o metamodelo do segundo grau gerado pela técnica do PCE utilizando apenas 100 amostras é capaz de (re)produzir os resultados computacionais relacionados ao processo de evaporação da gota de *n*-heptano a baixo custo englobando 95% dos casos avaliados.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente trabalho teve como foco a análise de sensibilidade e a propagação das incertezas associadas ao processo de evaporação da gota combustível de *n*-heptano. Utilizando para tal propósito o método de Monte Carlo e a técnica de expansão em polinômio caos, ambos aplicados ao código computacional de evaporação de gotas desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia. De modo que ao fim das simulações computacionais, dois grandes grupos de resultados foram alcançados, os de característica determinística e aqueles de perfil estocástico.

Os resultados determinísticos representados prioritariamente pela redução do diâmetro normalizado da gota ($D_d^2/D_{d,o}^2$) em relação ao também normalizado tempo de redução ($t/D_{d,o}^2$), foram obtidos pela associação entre os códigos computacionais propostos por [Pinheiro *et al.* \(2018\)](#) e o desenvolvido nesta dissertação. Que orientou-se essencialmente pela teoria quase-estacionária de evaporação e apresentou as equações NuSh-nat de cálculo dos adimensionais Nusselt e Shewood como uma das principais contribuições do presente trabalho, as quais se contrapõem a rígida correlação de Ranz-Marshall por meio da versatilidade de cálculo dos coeficientes os quais compõem as mesmas; possibilitando, assim, a obtenção de resultados numéricos de evaporação do *n*-heptano com similaridade superior a 95% em comparação aos valores aferidos em experimentos materiais. Resultados estes, os quais comprovam a viabilidade e necessidade de maiores investimentos no aprimoramento das técnicas uni-dimensionais de simulação, as quais apresentam baixo custo e elevada eficiência.

Adicionalmente, por meio das simulações determinísticas, também foi possível verificar e compreender algumas das características e fenômenos transcorridos ao longo da evaporação da gota combustível, tais como os de convecção natural e o associado a taxa de evaporação da gota combustível. Os quais em resumo descrevem o movimento de transformação da gota líquida em vapor ao longo do processo de evaporação; sendo o primeiro, resultado do deslocamento de fluido na superfície da gota, o qual é induzido pela combinação entre as distorções geométricas da mesma e o sistema gravitacional do meio externo. Já o segundo, é primordialmente influenciado pelo gradiente térmico entre a gota combustível e o ambiente no qual a mesma esta imersa, de modo que o aumento da temperatura externa e manutenção (ou redução) da temperatura inicial da gota líquida promove um incremento na taxa de evaporação das mesma.

As simulações estocásticas, por sua vez, através da técnica de análise de sensibilidade global via índices de Sobol, demonstraram durante as avaliações numéricas que a significância dos termos analisados está diretamente associada às considerações físicas e matemáticas aplicadas na codificação *a priori* do sistema. De forma que, quanto mais próximo o modelo criado é do sistema real avaliado, mais evidente e proporcional são as contribuições de cada termo na composição computacional do mesmo. Tal conclusão pode ser verificada pela análise de sensibilidade das simulações reduzida e completa apresentadas no presente trabalho, nas quais a ausência dos conceitos térmicos (sistema reduzido) induzem a um aumento da significância de algumas das propriedades, como ocorre para o caso do peso específico do vapor (W_v), o qual tem preponderância aumentada na ausência dos efeitos térmico e quase nenhuma influência em sistemas que consideram respectivo efeito na modelagem do processo de evaporação.

Já pelos resultados diretamente associados às avaliações de propagação de incertezas, foi possível constatar que o envelope estocástico ao redor da variação do diâmetro médio é capaz de englobar 95% dos resultados obtidos em experimentos materiais e/ou computacionais similares ao descrito na presente dissertação. Tal como foi feito para os resultados dos experimentos materiais obtidos por [Chauveau et al. \(2008\)](#), os quais ficaram sobre a linha média de variação do diâmetro ou entre os limites das bandas de confiança, com exceção aos dados finais representados nos gráficos das temperaturas de 623 K e 748 K. Todavia, estes pontos encontram-se em uma região de difícil mensuração tanto aos experimentos materiais quanto computacionais, de modo que a contribuição física dos mesmos pode se excluída da referida análise.

Assim, verifica-se que o presente trabalho contribuiu significativamente para o incremento do respectivo campo de pesquisa por meio de duas vertentes. A primeira pela proposição das equações NuSh-nat, as quais demonstraram excelente capacidade de representação dos efeitos térmicos e mássicos no processo evaporativo da gota combustível de *n*-heptano, atingindo deste modo o objetivo aos quais as mesmas foram propostas. E por último, correlacionando a análise de sensibilidade global e a propagação das incertezas ao processo de evaporação utilizando técnicas estatísticas (Sobol e PCE) ainda não/ou pouco verificadas na literatura especializada de sprays e evaporação de gotas.

Por fim, como sugestão a trabalhos futuros, recomenda-se a realização da análise de sensibilidade sob as equações NuSh-nat, de modo que seja possível identificar quais dos termos envolvidos apresentam maior influência sobre o processo de evaporação. Também recomenda-se que as simulações de evaporação da gota combustível extrapole a análise monocomponente, passando a lidar com arranjos complexos como os verificados em substâncias multicomponentes e hidratadas, como é o caso dos combustíveis *blends* e do biodiesel. Por último, recomenda-se que o sistema avaliado na presente dissertação seja expandido à análise da evaporação em nuvens de gotas combustíveis similares as encontradas em sprays.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAMZON, B.; SAZHIN, S. Convective vaporization of a fuel droplet with thermal radiation absorption. **Fuel**, Elsevier, v. 85, n. 1, p. 32–46, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2005.02.027>>. 39

ABRAMZON, B.; SIRIGNANO, W. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. **International journal of heat and mass transfer**, Elsevier, v. 32, n. 9, p. 1605–1618, 1989. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90043-4](https://doi.org/10.1016/0017-9310(89)90043-4)>. 70, 73

AKKUS, Y. The effect of stefan flow on the models of droplet evaporation. **Isı Bilimi ve Tekniği Dergisi**, v. 40, n. 2, p. 309–318, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.47480/isibted.817053>>. 22

ARLOW, J.; NEUSTADT, I. **UML 2 and the unified process: practical object-oriented analysis and design**. [S.l.]: Pearson Education, 2005. ISBN 0321321278,9780321321275. 51

ASCENCIO, A. F. G.; CAMPOS, E. A. V. de. **Fundamentos da programação de computadores**. [S.l.]: Pearson Educación, 2008. ISBN 978-85-64574-16-8. 49

ASHGRIZ, N. **Handbook of atomization and sprays: theory and applications**. Springer Science & Business Media, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-1-4419-7264-4>>. 18

A.S.R.E, A. S. of R. E. **Refrigerating Engineering**. American Society of Refrigerating Engineers, 1932. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=j3MfAQAAMAAJ>>. 15

BEN, E. D. P. E. Balanço energético nacional 2020: ano base 2019. **Rio de Janeiro**, 2010. 2

BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S.; QUEIROZ, E. M. **Fundamentos de Transferência de Calor E de Massa**. [S.l.]: Grupo Gen-LTC, 2014. ISBN 978-85-216-2504-9. 60

BLATMAN, G.; SUDRET, B. Anisotropic parcimonious polynomial chaos expansions based on the sparsity-of-effects principle. In: **Proc ICOSSAR09, International Conference in Structural Safety and Reliability**. [S.l.: s.n.], 2009. 31

BOILEAU, M.; PASCAUD, S.; RIBER, E.; CUENOT, B.; GICQUEL, L.; POINSOT, T.; CAZALENS, M. Investigation of two-fluid methods for large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. **Flow, Turbulence and Combustion**, Springer, v. 80, n. 3, p. 291–321, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10494-007-9123-1>>. 3

BONEFAČIĆ, I.; WOLF, I.; BLECICH, P. Improvement of fuel oil spray combustion inside a 7 mw industrial furnace: A numerical study. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 110, p. 795–804, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.08.218>>. 3

BOOKER, J.; ROSS, T. An evolution of uncertainty assessment and quantification. **Scientia Iranica**, Elsevier, v. 18, n. 3, p. 669–676, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.scient.2011.04.017>>. 5

BORGONOVO, E.; PLISCHKE, E. Sensitivity analysis: a review of recent advances. **European Journal of Operational Research**, Elsevier, v. 248, n. 3, p. 869–887, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ejor.2015.06.032>>. 31

CHAUVEAU, C.; BIROUK, M.; GÖKALP, I. Why the d2-law does not hold during droplet vaporization in microgravity conditions. In: **In21st Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems,(ILASS Europe 2007), Mugla, Turkey**. [S.l.: s.n.], 2007. 74, 81

CHAUVEAU, C.; HALTER, F.; LALONDE, A.; GÖKALP, I. **An experimental study on the droplet vaporization**: effects of heat conduction through the support fiber. In: . [S.l.: s.n.], 2008. 69, 71, 73, 74, 87, 89

CHEN, Q.-Y.; GOTTLIEB, D.; HESTHAVEN, J. S. Uncertainty analysis for the steady-state flows in a dual throat nozzle. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 204, n. 1, p. 378–398, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.10.019>>. 29

COOKE, J. R. Some theoretical considerations in stomatal diffusion: A field theory approach. **Acta Biotheoretica**, Springer, v. 17, n. 3, p. 95–124, 1967. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01625092>>. 22

CORRADI, M.; GHERLONE, M.; MATTONE, M.; SCIUVA, M. D. A comparative study of uncertainty propagation methods in structural problems. In: **Computational methods in stochastic dynamics**. Springer, 2013. p. 87–111. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-94-007-5134-7_6>. 29

CUNHA, A. Modeling and quantification of physical systems uncertainties in a probabilistic framework. In: **Probabilistic Prognostics and Health Management of Energy Systems**. Springer, 2017. p. 127–156. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-55852-3_8>. 4, 14, 25, 27, 28

CUNHA, A. B. d. J. **Modeling and uncertainty quantification in the nonlinear stochastic dynamics of horizontal drillstrings**. Tese (Doutorado) — Université Paris-Est; Pontifícia universidade católica (Rio de Janeiro, Brésil), 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.17771/PUCRio.acad.26637>>. 27

DAMASCENO, M. M. R.; SANTOS, J. G. de F.; VEDOVOTO, J. M. Simulation of turbulent reactive flows using a fdf methodology—advances in particle density control for normalized variables. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 170, p. 128–140, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.05.004>>. 12

DOOSTAN, A.; IACCARINO, G. **Breaking the curse of dimensionality for a class of pdes with stochastic inputs**. [S.l.], 2008. 30

DUARTE, B. A. de F.; MELO, R. R. da S.; VILLAR, M. M.; SERFATY, R.; NETO, A. da S. An extension of oberbeck–boussinesq approximation for thermal convection problems. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, Springer, v. 40, n. 6, p. 1–15, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s40430-018-1181-x>>. 12

DUDLEY, J. M.; GENTY, G.; COEN, S. Supercontinuum generation in photonic crystal fiber. **Reviews of modern physics**, APS, v. 78, n. 4, p. 1135, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.78.1135>>. 7

FARAGHER, J. **Probabilistic methods for the quantification of uncertainty and error in computational fluid dynamic simulations**. [S.l.], 2004. 25

FEINBERG, J.; LANGTANGEN, H. P. Chaospy: An open source tool for designing methods of uncertainty quantification. **Journal of Computational Science**, Elsevier, v. 11, p. 46–57, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jocs.2015.08.008>>. 45, 62

FROST, D. Initiation of explosive boiling of a droplet with a shock wave. **Experiments in Fluids**, Springer, v. 8, n. 3, p. 121–128, 1989. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF00195785>>. 21

FUCHS, N. A. **Evaporation and droplet growth in gaseous media**. [S.l.]: Elsevier, 2013. ISBN 978-1-4832-0060-6. 22

GANTZ, C. **Refrigeration: a history**. [S.I.]: McFarland, 2015. ISBN 9781476619699, 9780786476879, 0786476877. 15

GERASIMOV, D. N.; YURIN, E. I. **Kinetics of evaporation**. Springer, 2018. v. 68. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-319-96304-4>>. 17, 18, 19

GHANEM, R.; HIGDON, D.; OWHADI, H. **Handbook of Uncertainty Quantification**. Springer, 2017. v. 6. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-12385-1_1>. 31

GHANEM, R. G.; SPANOS, P. D. **Stochastic finite elements: a spectral approach**. [S.I.]: Courier Corporation, 2003. ISBN 9780486428185, 0486428184. 28

GHIOCEL, D. M.; GHANEM, R. G. Stochastic finite-element analysis of seismic soil–structure interaction. **Journal of Engineering Mechanics**, American Society of Civil Engineers, v. 128, n. 1, p. 66–77, 2002. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9399\(2002\)128:1\(66\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:1(66))>. 29

GIVLER, S. D.; ABRAHAM, J. Supercritical droplet vaporization and combustion studies. **Progress in Energy and Combustion Science**, Elsevier, v. 22, n. 1, p. 1–28, 1996. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0360-1285\(95\)00013-5](https://doi.org/10.1016/0360-1285(95)00013-5)>. 74

GODSAVE, G. Studies of the combustion of drops in a fuel spray—the burning of single drops of fuel. In: ELSEVIER. **Symposium (international) on combustion**. 1953. v. 4, n. 1, p. 818–830. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(53\)80107-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(53)80107-4)>. 21, 74

GOODWIN, D. G.; SPETH, R. L.; MOFFAT, H. K.; WEBER, B. W. **Cantera: An Object-oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes**. 2018. <<https://www.cantera.org>>. Version 2.4.0. Disponível em: <<http://doi.org/10.5281/zenodo.1174508>>. 45, 61

HAIRER, E.; LUBICH, C.; ROCHE, M. **The numerical solution of differential-algebraic systems by Runge-Kutta methods**. [S.I.]: Springer, 2006. v. 1409. ISBN 9783540518600, 3540518606. 68

HAUSEUX, P.; HALE, J. S.; BORDAS, S. P. Accelerating monte carlo estimation with derivatives of high-level finite element models. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 318, p. 917–936, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.01.041>>. 28

HERMAN, J.; USHER, W. SALib: An open-source python library for sensitivity analysis. **The Journal of Open Source Software**, The Open Journal, v. 2, n. 9, jan 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.21105/joss.00097>>. 45, 63

IACCARINO, G. **Quantification of uncertainty in flow simulations using probabilistic methods**. [S.l.], 2009. 8, 24, 25, 27, 31

Iaccarino, G. Uncertainty quantification in computational science. In: **Computational Intelligence in Aerospace Sciences**. The American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA), 2014. p. 113–148. Disponível em: <<https://doi.org/10.2514/5.9781624102714.0113.0148>>. 3

JACKSON, M. A.; MA, J. Principles of program design. 1975. 49

JR, C. E. B. **The Slipcover for The John Zink Hamworthy Combustion Handbook: Three-Volume Set**. [S.l.]: CRC press, 2018. 8

JR, C. E. B.; GERSHTEIN, V.; LI, X. J. **Computational fluid dynamics in industrial combustion**. [S.l.]: CRC press, 2000. ISBN 9781482274363. 7

KEATING, E. L. **Applied combustion**. CRC press, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1201/9781420017489>>. 3

KHALIL, M.; NAJM, H. N. Probabilistic inference of reaction rate parameters from summary statistics. **Combustion Theory and Modelling**, Taylor & Francis, v. 22, n. 4, p. 635–665, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/13647830.2017.1370557>>. 5

KITANO, T.; NISHIO, J.; KUROSE, R.; KOMORI, S. Evaporation and combustion of multicomponent fuel droplets. **Fuel**, Elsevier, v. 136, p. 219–225, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.07.045>>. 3

KNIO, O. M.; MAITRE, O. L. Uncertainty propagation in CFD using polynomial chaos decomposition. **Fluid dynamics research**, IOP Publishing, v. 38, n. 9, p. 616, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.fluidyn.2005.12.003>>. 29

KOOIJMAN, H. A.; TAYLOR, R. **The ChemSep book**. [S.l.]: Books on Demand Norderstedt, Germany, 2000. ISBN 3-8311-1068-9. 60

LAW, C. K.; SUNG, C. J.; WANG, H.; LU, T. Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanisms for combustion modeling. **AIAA journal**, v. 41, n. 9, p. 1629–1646, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.2514/2.7289>>. 3

LEFEBVRE, A. H.; MCDONELL, V. G. **Atomization and sprays**. CRC press, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1201/9781315120911>>. 14, 18, 22, 33, 39

LI, R.; GHANEM, R. Adaptive polynomial chaos expansions applied to statistics of extremes in nonlinear random vibration. **Probabilistic engineering mechanics**, Elsevier, v. 13, n. 2, p. 125–136, 1998. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0266-8920\(97\)00020-9](https://doi.org/10.1016/S0266-8920(97)00020-9)>. 29

LINDLEY, D. V. **Understanding uncertainty**. John Wiley & Sons, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/9781118650158>>. 24

LOUCKS, D.; BEEK, E. V.; STEDINGER, J.; DIJKMAN, J.; VILLARS, M. Model sensitivity and uncertainty analysis. **Water resources systems planning and management**, UNESCO The Netherlands, p. 255–290, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-319-44234-1>>. 32

MAÎTRE, O. L.; KNIO, O. M. **Spectral methods for uncertainty quantification: with applications to computational fluid dynamics**. Springer Science & Business Media, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-90-481-3520-2>>. 28, 30

MARELLI, S.; LAMAS, C.; SUDRET, B.; KONAKLI, K.; MYLONAS, C. Uqlab user manual–sensitivity analysis. **Report UQLab-V1**, p. 2–106, 2019. 41

MARELLI, S.; SUDRET, B. Uqlab user manual–polynomial chaos expansions. **Chair of Risk, Safety & Uncertainty Quantification, ETH Zürich, 0.9-104 edition**, p. 97–110, 2015. 29

MCALLISTER, S.; CHEN, J.-Y.; FERNANDEZ-PELLO, A. C. **Fundamentals of combustion processes**. Springer, 2011. v. 302. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-1-4419-7943-8>>. 18

MCCLARREN, R. G. **Uncertainty Quantification and Predictive Computational Science**. Springer, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-99525-0_1>. 3, 24, 25

MERKER, G. P.; SCHWARZ, C.; TEICHMANN, R. **Combustion engines development: mixture formation, combustion, emissions and simulation**. Springer Science & Business Media, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-642-14094-5>>. 3

METROPOLIS, N.; ULAM, S. The monte carlo method. **Journal of the American statistical association**, Taylor & Francis, v. 44, n. 247, p. 335–341, 1949. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/01621459.1949.10483310>>. 28

MINTON, P. E. **Handbook of evaporation technology**. [S.l.]: William Andrew, 1986. 14

MOENS, D.; VANDEPITTE, D. A survey of non-probabilistic uncertainty treatment in finite element analysis. **Computer methods in applied mechanics and engineering**, Elsevier, v. 194, n. 12-16, p. 1527–1555, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cma.2004.03.019>>. 27

MUELLER, M. E.; IACCARINO, G.; PITSCH, H. Chemical kinetic uncertainty quantification for large eddy simulation of turbulent nonpremixed combustion. **Proceedings of the Combustion Institute**, Elsevier, v. 34, n. 1, p. 1299–1306, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.07.054>>. 8, 9

NAJM, H. N. Uncertainty quantification and polynomial chaos techniques in computational fluid dynamics. **Annual review of fluid mechanics**, Annual Reviews, v. 41, p. 35–52, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.010908.165248>>. 8, 24

NGUYEN, A.-T.; REITER, S. A performance comparison of sensitivity analysis methods for building energy models. In: SPRINGER. **Building simulation**. 2015. v. 8, n. 6, p. 651–664. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s12273-015-0245-4>>. 32

NOMURA, H.; KONO, M.; SATO, J.; MARKS, G.; IGLSEDER, H.; RATH, H. J. Effects of the natural convection on fuel droplet evaporation. In: **Microgravity Fluid Mechanics**. Springer, 1992. p. 245–252. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-50091-6_27>. 69, 71, 72, 73, 74, 76

PARK, S. H.; LEE, C. S. Combustion performance and emission reduction characteristics of automotive dme engine system. **Progress in energy and combustion science**, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 147–168, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2012.10.002>>. 3

PERSSON, T. **Eulerian-Lagrangian Modeling of Multicomponent Spray for Aseptic Treatment of Carton Bottles in the Food Process and Packaging Industry**. Dissertação (Mestrado), 2013. 8

PETERS, N.; ROGG, B. **Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008. v. 15. 3

PINHEIRO, A. P. *et al.* **Lagrangian modeling of droplet evaporation**. Universidade Federal de Uberlândia, 2018. 12, 22, 47, 70, 88, 102, 103

PINHEIRO, A. P.; VEDOVOTO, J. M. Evaluation of droplet evaporation models and the incorporation of natural convection effects. **Flow, Turbulence and Combustion**, Springer, v. 102, n. 3, p. 537–558, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10494-018-9973-8>>. 33, 34

RATH, H. J. **Microgravity Fluid Mechanics: IUTAM Symposium Bremen 1991**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. 72

RAUCH, B. **Systematic accuracy assessment for alternative aviation fuel evaporation models**. Stuttgart: Deutsches Zentrum für Luft-und Raumfahrt, Institut für , 2018. 33

REAGANA, M. T.; NAJM, H. N.; GHANEM, R. G.; KNIO, O. M. Uncertainty quantification in reacting-flow simulations through non-intrusive spectral projection. **Combustion and Flame**, Elsevier, v. 132, n. 3, p. 545–555, 2003. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(02\)00503-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00503-5)>. 29

RITCHIE, H.; ROSER, M. Co and greenhouse gas emissions. **Our World in Data**, 2017. <https://ourworldindata.org/co2-and-other-greenhouse-gas-emissions>. 2

ROSS, H. D. **Microgravity combustion: fire in free fall**. [S.l.]: Elsevier, 2001. 23

SAAD, G. A.; GHANEM, R. G. Robust structural health monitoring using a polynomial chaos based sequential data assimilation technique. In: **Computational methods in stochastic dynamics**. Springer, 2013. p. 203–213. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-94-007-5134-7_12>. 29

SAHARIN, S. B. **Vaporization and autoignition characteristics of ethanol and 1-propanol droplets: influence of water**. Tese (Doutorado) — Université de Bourgogne, 2013. 21

SALTELLI, A. Global sensitivity analysis: an introduction. In: CITESEER. **Proc. 4th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output (SAMO04)**. [S.l.], 2004. v. 27, p. 43. 32

SALTELLI, A.; RATTO, M.; ANDRES, T.; CAMPOLONGO, F.; CARIBONI, J.; GATELLI, D.; SAISANA, M.; TARANTOLA, S. **Global sensitivity analysis: the primer**. John Wiley & Sons, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/9780470725184>>. 32

SAZHIN, S. **Droplets and sprays**. [S.l.]: Springer, 2014. v. 345. 14, 17, 18, 19, 39, 70

SAZHIN, S.; KRISTYADI, T.; ABDELGHAFAR, W.; HEIKAL, M. Models for fuel droplet heating and evaporation: comparative analysis. **Fuel**, Elsevier, v. 85, n. 12-13, p. 1613–1630, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2006.02.012>>. 35

SEPAHVAND, K.; MARBURG, S.; HARDTKE, H.-J. Uncertainty quantification in stochastic systems using polynomial chaos expansion. **International Journal of Applied Mechanics**, World Scientific, v. 2, n. 02, p. 305–353, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/S1758825110000524>>. 27, 30

SHENG, H.; WANG, X. Applying polynomial chaos expansion to assess probabilistic available delivery capability for distribution networks with renewables. **IEEE Transactions on Power Systems**, IEEE, v. 33, n. 6, p. 6726–6735, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/TPWRS.2018.2825657>>. 29

SHI, Y.; GE, H.-W.; REITZ, R. D. **Computational optimization of internal combustion engines**. Springer Science & Business Media, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-0-85729-619-1>>. 3

SHINOZUKA, M.; JAN, C.-M. Digital simulation of random processes and its applications. **Journal of sound and vibration**, Elsevier, v. 25, n. 1, p. 111–128, 1972. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0022-460X\(72\)90600-1](https://doi.org/10.1016/0022-460X(72)90600-1)>. 28

Silveira Neto, A. D. **Escoamentos Turbulentos - Análise Física e Modelagem Teórica**. [S.l.]: Composer, 2020. v. 1. ISBN 978-6599036514. 4

SIRIGNANO, W. A. **Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays**. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. ISBN 978-1-4471-6385-5. 20

SOIZE, C. A comprehensive overview of a non-parametric probabilistic approach of model uncertainties for predictive models in structural dynamics. **Journal of sound and vibration**, Elsevier, v. 288, n. 3, p. 623–652, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jsv.2005.07.009>>. 27

Soize, C. **Uncertainty quantification: An Accelerated Course with Advanced Applications in Computational Engineering**. Springer, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-319-54339-0>>. 14, 24, 26, 41

SPALDING, D. The combustion of liquid fuels. **Symposium (International) on Combustion**, v. 4, n. 1, p. 847 – 864, 1953. ISSN 0082-0784. Fourth Symposium (International) on Combustion. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(53\)80110-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(53)80110-4)>. 21, 74

SPARROW, E.; GREGG, J. Similar solutions for free convection from a nonisothermal vertical plate. **Trans. ASME**, v. 80, n. 2, p. 379–386, 1958. 39, 40

SUDRET, B. Polynomial chaos expansions and stochastic finite element methods. **Risk and reliability in geotechnical engineering**, CRC Press Boca Raton, FL, p. 265–300, 2015. 31, 42

TANAKA, S.; AYALA, F.; KECK, J. C. A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine. **Combustion and flame**, Elsevier, v. 133, n. 4, p. 467–481, 2003. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(03\)00057-9](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(03)00057-9)>. 3

TENNØE, S.; HALNES, G.; EINEVOLL, G. T. Uncertainpy: A python toolbox for uncertainty quantification and sensitivity analysis in computational neuroscience. **Frontiers in neuroinformatics**, Frontiers, v. 12, p. 49, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.3389/fninf.2018.00049>>. 45, 64, 65

TUCKERMAN, M. **Statistical mechanics: theory and molecular simulation**. [S.l.]: Oxford university press, 2010. 74

URNS, S. R. **Introdução à Combustão: Conceitos e Aplicações**. [S.l.]: AMGH Editora, 2013. 1

VEDOVOTTO, J. M. **Mathematical and numerical modeling of turbulent reactive flows using a hybrid LES/PDF methodology**. Tese (Doutorado) — Chasseneuil-du-Poitou, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - ENSMA, Poitiers, France, 2011. 3, 4, 10

VILLAR, M. M. *et al.* **Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais**. Universidade Federal de Uberlândia, 2007. 12

VUCINIC, D.; LETA, F. R.; JANARDHANAN, S. **Advances in Visualization and Optimization Techniques for Multidisciplinary Research: Trends in Modelling and Simulations for Engineering Applications**. Springer Nature, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-981-13-9806-3>>. 30

WANG, H.; SHEEN, D. A. Combustion kinetic model uncertainty quantification, propagation and minimization. **Progress in Energy and Combustion Science**, Elsevier, v. 47, p. 1–31, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2014.10.002>>. 8, 9, 10

WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W.; WARNATZ, J. **Combustion**. [S.l.]: Springer, 2006. 1

WESTBROOK, C. K.; DRYER, F. L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion. **Progress in Energy and Combustion Science**, Elsevier, v. 10, n. 1, p. 1–57, 1984. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0360-1285\(84\)90118-7](https://doi.org/10.1016/0360-1285(84)90118-7)>. 3

XIU, D. **Numerical methods for stochastic computations: a spectral method approach**. Princeton university press, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.2307/j.ctv7h0skv>>. 30

YARIN, A. L.; ROISMAN, I. V.; TROPEA, C. **Collision phenomena in liquids and solids**. Cambridge University Press, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/9781316556580>>. 18

APÊNDICE A

Método de amostragem para as simulações estocásticas de evaporação. (O autor, 2021)

```
1 def AsmmSamples(num_amostras, T_inf, reg_amost=0, **kwargs):
2
3     PATH = os.path.join(os.getcwd(), 'DADOS_SIMULACOES', 'heptane'
4                          , f'heptane_{T_inf}K_Dados1.dat')
5
6     df, T_inf = pd.read_csv(PATH), T_inf
7     dist = atribuindo_distribuicoes(df, T_inf)
8     distribuicoes = chaospy.J(*dist)
9
10    Salib = kwargs.get('Salib')
11
12    if Salib:
13        calc_second_order = kwargs.get('calc_second_order')
14        D = kwargs.get('D')
15        while True:
16            if calc_second_order:
17                N = round(num_amostras/(2*D+2))
18                mod_amostras = N*(2*D+2)
19            else:
20                N = round(num_amostras/(D+2))
21                mod_amostras = N*(D+2)
22
23            if mod_amostras >= num_amostras:
24                num_amostras = mod_amostras
25                break
26            else:
27                num_amostras += 1
28
29    reg = ['Sobol', 'random', 'halton', 'gaussian', 'MC']
30    amostras = distribuicoes.sample(num_amostras, rule=reg[reg_amost])
31
32    amostraslinha = []
33    amostrascoluna = []
34
35    for var0 in range(amostras.shape[1]):
36        for var1 in range(amostras.shape[0]):
37            amostraslinha.append(amostras[var1, var0])
38            amostrascoluna.append([*amostraslinha])
39            amostraslinha *= 0
40
41    return distribuicoes, amostrascoluna
```

ANEXO 1

Arquivo .cti para as simulações do combustível *n*-heptano. (PINHEIRO *et al.*, 2018)

```
1 #-----
2 # Phase data
3 #-----
4 deal_gas(name = "nheptane",
5     elements = " N H C ",
6     species = "" N2 NXC7H16 """,
7     reactions = "all",
8     transport = "Mix",
9     initial_state = state(temperature = 300.0, pressure = OneAtm))
10 #-----
11 # Species data
12 #-----
13 species(name = "N2",
14     atoms = " N:2 ",
15     thermo = (
16         NASA( [ 300.00, 1000.00],
17             [ 3.298677000E+00, 1.408240400E-03,
18               -3.963222000E-06, 5.641515000E-09,
19               -2.444854000E-12, -1.020899900E+03, 3.950372000E+00 ] ),
20         NASA( [ 1000.00, 5000.00],
21             [ 2.926640000E+00, 1.487976800E-03,
22               -5.684760000E-07, 1.009703800E-10,
23               -6.753351000E-15, -9.227977000E+02, 5.980528000E+00 ] )),
24     transport = gas_transport(
25         geom = "linear",
26         diam = 3.62,
27         well_depth = 97.53,
28         polar = 1.76, rot_relax = 4.00), note = "121286")
29
30 species(name=u'NXC7H16',
31     atoms='H:16 C:7',
32     thermo=(NASA([300.00, 1000.00],
33                 [-2.87207092E+00, 9.32041149E-02,
34                   -6.40456780E-05, 2.38086194E-08,
35                   -3.78967402E-12, -2.53424927E+04, 4.26531873E+01]),
36                 NASA([1000.00, 5000.00],
37                     [ 5.73791665E+00, 6.44007959E-02,
38                       -2.84793287E-05, 4.64592749E-09,
39                       0.00000000E+00, -2.73735324E+04, -3.62210002E-01])),
40     transport=gas_transport(geom= 'nonlinear',
41                             diam= 5.644, well_depth= 537.597), note= u'000000')
```

Arquivo .cti para as simulações do combustível etanol puro. (PINHEIRO *et al.*, 2018)

```

1 #-----
2 # Phase data
3 #-----
4 deal_gas(name = "nheptane",
5     elements = " N H C ",
6     species = "" N2 NXC7H16 """,
7     reactions = "all",
8     transport = "Mix",
9     initial_state = state(temperature = 300.0, pressure = OneAtm))
10 #-----
11 # Species data
12 #-----
13 species(name = "N2",
14     atoms = " N:2 ",
15     thermo = (
16         NASA( [ 300.00, 1000.00],
17             [ 3.298677000E+00, 1.408240400E-03,
18               -3.963222000E-06, 5.641515000E-09,
19               -2.444854000E-12, -1.020899900E+03, 3.950372000E+00] ),
20         NASA( [ 1000.00, 5000.00],
21             [ 2.926640000E+00, 1.487976800E-03,
22               -5.684760000E-07, 1.009703800E-10,
23               -6.753351000E-15, -9.227977000E+02, 5.980528000E+00] )),
24     transport = gas_transport(
25         geom = "linear",
26         diam = 3.62,
27         well_depth = 97.53,
28         polar = 1.76, rot_relax = 4.00), note = "121286")
29
30 species(name=u'NXC7H16',
31     atoms='H:16 C:7',
32     thermo=(NASA([300.00, 1000.00],
33         [-2.87207092E+00, 9.32041149E-02,
34           -6.40456780E-05, 2.38086194E-08,
35           -3.78967402E-12, -2.53424927E+04, 4.26531873E+01]),
36         NASA([1000.00, 5000.00],
37             [ 5.73791665E+00, 6.44007959E-02,
38               -2.84793287E-05, 4.64592749E-09,
39               0.00000000E+00, -2.73735324E+04, -3.62210002E-01])),
40     transport=gas_transport(geom= 'nonlinear',
41         diam= 5.644, well_depth= 537.597), note= u'000000')

```
